

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

Sistemi a 2 Stati

Relatore:
Prof. Zucchini Roberto

Presentata da:
Xotta Francesco

Anno Accademico 2020/2021

Contatti e Informazioni

Francesco Xotta

Corso di Laurea Triennale in Fisica

Università di Bologna, Italia

E-mail: francesco.xotta@studio.unibo.it

Anno Accademico 2020/2021

Sommario

I sistemi a due livelli sono un caso singolare di sistema quantistico che può esistere in due soli stati indipendenti; si tratta del tipo di sistema più semplice in assoluto da studiare, ma le sue applicazioni sono molteplici e di grande utilità sia come strumento didattico sia come semplificazione della realtà per osservare il funzionamento generale di fenomeni anche molto complessi e di notevole rilevanza applicativa, come la Risonanza Magnetica Nucleare.

Un'altra utilità di questo genere di sistemi risiede nell'importanza dei computer quantistici, argomento tutt'oggi soggetto di studio nonché di promettente sviluppo tecnologico. La semplicità di questi modelli discende dalla possibilità di usare il formalismo di Pauli per rappresentare gli operatori ed è possibile visualizzare gli stati come punti di una sfera unitaria, rendendo questi sistemi di semplice intuizione.

Indice

Introduzione	3
1 Generalità dei Sistemi a 2 Livelli	5
1.1 Formalismo di Pauli	5
1.2 Notazione Matriciale	9
1.3 Spettro Energetico di un Sistema a 2 Livelli	11
2 Esempi di Sistemi a 2 Stati nel Caso Statico	14
2.1 Molecola di Idrogeno Ionizzata	14
2.1.1 Affidabilità del Modello a 2 Stati della Molecola di Idrogeno Ionizzata	15
2.2 Effetto Stark	16
3 Evoluzione Temporale di un Sistema a due Stati	20
3.1 Operatore Evoluzione per un Sistema a Due Stati	20
3.2 Spin 1/2	22
3.3 Equazioni di Bloch	25
4 Esempi di Sistemi a 2 Stati nel Caso Dinamico	27
4.1 Risonanza Magnetica Nucleare	27
4.1.1 Applicazioni della Risonanza Magnetica Nucleare	30
4.2 Atomo Alcalino Immerso in un Campo Elettromagnetico Laser	31
5 Perturbazioni Dipendenti dal Tempo per i Sistemi a due Stati	34
5.1 Generalità di un Sistema a due Stati Perturbato	34
5.2 Teoria delle Perturbazioni Dipendente dal Tempo per Perturbazioni Impulsive	35
5.3 Atomo Alcalino Sfiato Da uno Ione	36
6 Breve Trattazione sulla Sfera di Bloch	39
6.1 Sfera di Bloch	39
A Teoria delle Perturbazioni Dipendente dal Tempo	41

B	Esperimento di Stern e Gerlach	43
C	Qubit	45

Introduzione

Un sistema a due livelli è un sistema per il quale ogni stato può essere descritto come combinazione lineare di due soli stati indipendenti, portando dunque lo spazio di Hilbert di un tale sistema ad avere dimensione 2; questa notevole semplificazione, per quanto possa sembrare estrema ed eccessivamente elementare, riesce a fornire per diversi sistemi interessanti informazioni qualitative.

Scopo di questa tesi è quello di studiare questo genere di sistemi, mostrando quali tecniche sono efficaci per la loro analisi e applicare i risultati così ottenuti a diversi esempi, dimostrando l'efficacia di questo tipo di analisi.

Inizieremo con un'esposizione del formalismo di Pauli, che permette di descrivere ogni operatore come combinazione lineare di tre operatori standard (gli operatori di Pauli) e l'operatore identità; ciò semplificherà enormemente il problema agli autovalori di ogni operatore in un sistema a due stati, compreso l'operatore Hamiltoniano, su cui entreremo nello specifico mostrando le tecniche più efficaci per trovare lo spettro energetico di un sistema a due livelli.

Come esempi di sistemi a due livelli vedremo la molecola di idrogeno ionizzato, per la quale otterremo un modello semplificato del legame tra i due nuclei di idrogeno e l'elettrone (e che confronteremo brevemente con il modello reale) e l'Effetto Stark per un atomo alcalino, dove osserveremo come un campo elettrico riesca a dividere le linee spettrali di tale atomo (ottenendo informazioni qualitativamente valide anche per atomi non alcalini e molecole).

Introducendo l'operatore di evoluzione temporale e fornendo un modello semplificato di una particella con spin $\frac{1}{2}$ per la quale si ignorano tutti gli altri gradi di libertà aggiuntivi (rotazionali, vibrazionali, ecc... ecc...) otterremo l'equazione di Bloch, che viene usata per lo studio della magnetizzazione quando si analizza la Risonanza Magnetica Nucleare. La Risonanza Magnetica Nucleare è un fenomeno che si ha quando un nucleo viene immerso in un primo campo magnetico costante e, successivamente, anche in un campo magnetico oscillante perpendicolare al primo, osservando la probabilità che ci sia un cambio dell'allineamento dello spin rispetto al primo campo magnetico.

Altro fenomeno che vedremo usando la teoria dei sistemi a due stati è l'azione di un campo elettromagnetico laser su un atomo alcalino, per il quale calcoleremo la probabilità di una transizione elettronica dallo stato fondamentale al primo stato eccitato.

In seguito studieremo l'effetto del passaggio di uno ione in prossimità di un atomo alcalino modellizzato come sistema a due livelli utilizzando la teoria perturbativa dipendente dal tempo per una perturbazione di tipo impulsivo.

Infine accenneremo a qualche concetto di calcolo quantistico, parlando di come la Sfera di Bloch possa essere usata per descrivere ensemble statistici contenenti non solo stati puri o anche miscele statistiche, come è il caso che si ha per diversi qubit.

Capitolo 1

Generalità dei Sistemi a 2 Livelli

1.1 Formalismo di Pauli

[17] Lo spazio di Hilbert di un sistema a due stati è 2-dimensionale; dunque, l'algebra operatoriale sarà 4-dimensionale e una base di operatori consisterà di quattro operatori distinti, di cui uno sarà l'operatore identità $\hat{1}$.

Ogni operatore \hat{A} potrà avr̀ allora un'opportuna espansione

$$\hat{A} = a_m \hat{1} + \mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (1.1)$$

dove $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ è un operatore vettoriale tale che $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^\dagger$ e che

$$\mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \hat{1} + i \mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (1.2)$$

per cui, presi due operatori $\hat{A} = a_m \hat{1} + \mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ e $\hat{B} = b_m \hat{1} + \mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$, il loro prodotto sarà $\hat{A}\hat{B} = (a_m b_m + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \hat{1} + (a_m \mathbf{b} + b_m \mathbf{a} + i \mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$; si noti che l'equazione 1.2 è perfettamente naturale, in quanto si avrebbe in ogni caso che

$$\mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = f(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \hat{1} + \mathbf{g}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (1.3)$$

dove sia $f(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ che $\mathbf{g}(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ sono lineari in (\mathbf{a}, \mathbf{b}) e dove il prodotto scalare e il prodotto vettoriale sono le piú semplici funzioni lineari in (\mathbf{a}, \mathbf{b}) , con l'unit` immaginaria inserita affinché $(\mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^\dagger = \mathbf{b}^* \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{a}^* \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$.

Un operatore vettoriale per cui vale la condizione 1.2 è detto **Operatore di Pauli**; si noti che la condizione 1.2 pu` anche essere riscritta come segue:

$$[\mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}] = 2i \mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (1.4)$$

$$\mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{a} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2 \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \hat{1} \quad (1.5)$$

che si deducono in maniera ovvia dalla 1.2.

Si noti che, presi due operatori $\widehat{A} = a_m \widehat{1} + \mathbf{a} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ e $\widehat{B} = b_m \widehat{1} + \mathbf{b} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$, il loro commutatore sarà $[\widehat{A}, \widehat{B}] = 2i\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$; di conseguenza, la relazione

$$[\widehat{q}, \widehat{p}] = i\hbar \widehat{1} \quad (1.6)$$

è impossibile. [16]

Ci interessa ora risolvere il problema agli autovalori di un generico operatore autoaggiunto \widehat{A} (che in seguito applicheremo all'Hamiltoniana \widehat{H}).

Sia:

$$\widehat{A} = a_m \widehat{1} + |\mathbf{a}| \mathbf{a}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (1.7)$$

dove \mathbf{a}_1 è il versore unitario di \mathbf{a} ; visto che ogni vettore non nullo è autovettore dell'identità, il problema si riduce al trovare gli autovalori di $\mathbf{a}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$.

Consideriamo un vettore \mathbf{n} reale tale che $|\mathbf{n}| = 1$; l'operatore $\mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ sarà allora un operatore autoaggiunto, e dunque esiste una base ortonormale $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$ per la quale valgono le relazioni

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}, \pm 1 | \mathbf{n}, \pm 1 \rangle &= 1 \\ \langle \mathbf{n}, \mp 1 | \mathbf{n}, \pm 1 \rangle &= 0 \\ \widehat{1} &= |\mathbf{n}, +1\rangle \langle \mathbf{n}, +1| + |\mathbf{n}, -1\rangle \langle \mathbf{n}, -1| \end{aligned} \quad (1.8)$$

Possiamo chiamare λ_{\pm} gli autovalori di $\mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ e scrivere quest'ultimo come

$$\mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} = |\mathbf{n}, +1\rangle \lambda_+ \langle \mathbf{n}, +1| + |\mathbf{n}, -1\rangle \lambda_- \langle \mathbf{n}, -1| \quad (1.9)$$

Allo stesso tempo però l'operatore $(\mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}})^2$ avrà, per il teorema spettrale, espansione come segue:

$$(\mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = |\mathbf{n}, +1\rangle \lambda_+^2 \langle \mathbf{n}, +1| + |\mathbf{n}, -1\rangle \lambda_-^2 \langle \mathbf{n}, -1| \quad (1.10)$$

ma per la relazione 1.2, si avrà che:

$$(\mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \widehat{1} + i\mathbf{n} \times \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} = \widehat{1} \quad (1.11)$$

che, essendo $|\mathbf{n}| = 1$, ci dice che necessariamente $\lambda_{\pm} = -1, +1$. Si noti però che non può accadere che $\lambda_+ = \lambda_- = \lambda$, perché questo significherebbe che $(\mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}) = \lambda(|\mathbf{n}, +1\rangle \langle \mathbf{n}, +1| + |\mathbf{n}, -1\rangle \langle \mathbf{n}, -1|)$ e dunque l'operatore $\mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ commuterebbe con ogni altro operatore della forma $\mathbf{n}' \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$, che è però in disaccordo con la 1.4.

Per questo motivo, si avrà che gli autovalori di un operatore come quello descritto sono $\lambda_{\pm} = \pm 1$.

E' allora chiaro che

$$\widehat{A} |\mathbf{a}_1, \pm 1\rangle = |\mathbf{a}_1, \pm 1\rangle (a_m \pm |\mathbf{a}|) \quad (1.12)$$

A questo punto è ovvio che oltre allo spazio di Hilbert 2-dimensionale è necessario studiare lo spazio vettoriale 3-dimensionale dei coefficienti vettoriali \mathbf{a} dalla relazione

1.1; partiamo quindi dal descrivere una **base orientata ortonormale**, una tripla \mathbf{e}_i (con $i=1,2,3$) di vettori che soddisfano le relazioni:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j &= \delta_{ij} \\ \mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j &= \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \mathbf{e}_k\end{aligned}\tag{1.13}$$

Possiamo espandere ogni vettore \mathbf{a} dello spazio 3-dimensionale come:

$$\mathbf{a} = \sum_{k=1}^3 (\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{a}) \mathbf{e}_k = \sum_{k=1}^3 a_k \mathbf{e}_k\tag{1.14}$$

e possiamo scrivere gli operatori di Pauli come espansione $\hat{\sigma}_i = \sum_{m,m'=\pm 1} |\mathbf{e}_3, m\rangle \sigma_{imm'} \langle \mathbf{e}_3, m'|$, dove $\sigma_{imm'}$ è l'elemento di una matrice 2x2 come segue:

$$\begin{aligned}\sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{1.15}$$

Si dice invece una **base orientata sferica** una tripla \mathbf{e}_α (con $\alpha = -1, 0, 1$) di vettori dello spazio 3-dimensionale tale che $\mathbf{e}_\alpha^* = \mathbf{e}_{-\alpha}$ e che:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_\alpha \cdot \mathbf{e}_\beta &= 2^{|\alpha|} \delta_{-\alpha\beta} \\ \mathbf{e}_\alpha \times \mathbf{e}_\beta &= -i\delta_{\alpha 0} \beta \mathbf{e}_\beta + i\delta_{\beta 0} \alpha \mathbf{e}_\alpha - i\delta_{-\alpha\beta} (\alpha - \beta) \mathbf{e}_0\end{aligned}\tag{1.16}$$

Anche in questo caso è possibile scrivere un qualsiasi vettore \mathbf{a} dello spazio 3-dimensionale come espansione di questi tre vettori, e si possono scrivere gli operatori di Pauli come espansione di tre matrici:

$$\begin{aligned}\sigma_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \sigma_{+1} &= \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_{-1} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{1.17}$$

Si può passare da una base all'altra come segue:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_0 &= \mathbf{e}_3 \\ \mathbf{e}_{\pm 1} &= \mathbf{e}_1 + i\mathbf{e}_2\end{aligned}\tag{1.18}$$

per passare dalla base orientata ortonormale alla base orientata sferica e

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_3 &= \mathbf{e}_0 \\ \mathbf{e}_2 &= \frac{1}{2i}(\mathbf{e}_{+1} - \mathbf{e}_{-1}) \\ \mathbf{e}_1 &= \frac{1}{2}(\mathbf{e}_{+1} + \mathbf{e}_{-1}) \end{aligned} \quad (1.19)$$

per passare dalla base orientata sferica alla base orientata ortonormale. In molte situazioni è molto utile la seguente formula esponenziale:

$$e^{i\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\hat{1} + i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (1.20)$$

Infatti, si può vedere che:

$$\begin{aligned} |\mathbf{k}, \pm 1\rangle\langle\mathbf{k}, \pm 1| &= \frac{1}{2}(|\mathbf{k}, +1\rangle\langle\mathbf{k}, +1| + |\mathbf{k}, -1\rangle\langle\mathbf{k}, -1| \pm \\ &(|\mathbf{k}, +1\rangle\langle\mathbf{k}, +1| - |\mathbf{k}, -1\rangle\langle\mathbf{k}, -1|)) = \frac{\hat{1} \pm \mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2} \end{aligned} \quad (1.21)$$

e, per il teorema spettrale:

$$e^{i\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = |\mathbf{k}, +1\rangle e^{i\frac{\theta}{2}}\langle\mathbf{k}, +1| + |\mathbf{k}, -1\rangle e^{-i\frac{\theta}{2}}\langle\mathbf{k}, -1| = e^{i\frac{\theta}{2}}\frac{\hat{1} + \mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2} + e^{-i\frac{\theta}{2}}\frac{\hat{1} - \mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2} \quad (1.22)$$

dal quale si arriva al risultato atteso $e^{i\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\hat{1} + i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$.

Siano ora \mathbf{u}, \mathbf{v} due vettori unitari tali che

$$\begin{aligned} \cos(\theta) &= \mathbf{v}\cdot\mathbf{u} \\ \mathbf{k} &= \frac{\mathbf{v}\times\mathbf{u}}{|\mathbf{v}\times\mathbf{u}|} \end{aligned} \quad (1.23)$$

siano rispettivamente l'angolo compreso tra \mathbf{u} e \mathbf{v} e il versore ortogonale al piano da essi formato; allora si può usare l'esponenziale di Pauli come segue:

$$e^{i\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}\mathbf{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}e^{-i\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \mathbf{v}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (1.24)$$

ovvero l'operatore esponenziale di Pauli può essere usato per ruotare gli operatori di Pauli.

In aggiunta si può anche scrivere che:

$$|\mathbf{v}, \pm 1\rangle = e^{i\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}|\mathbf{u}, \pm 1\rangle \quad (1.25)$$

ovvero si può usare l'operatore di Pauli anche per ruotare dei ket dello spazio 2-dimensionale.

Infine sia \mathbf{e}_α una base orientata sferica; è allora possibile scrivere:

$$\begin{aligned} |\mathbf{n}, +1\rangle &= |\mathbf{e}_0, +1\rangle \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + |\mathbf{e}_0, -1\rangle \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} \\ |\mathbf{n}, -1\rangle &= -|\mathbf{e}_0, +1\rangle \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} + |\mathbf{e}_0, -1\rangle \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned} \quad (1.26)$$

dove l'angolo θ e la fase ϕ sono definiti come:

$$\begin{aligned} \cos\theta &= \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 = n_0 \\ e^{\pm i\phi} &= \frac{n_{\pm 1}}{|n_{\pm 1}|} \end{aligned} \quad (1.27)$$

1.2 Notazione Matriciale

Essendo in due dimensioni, trarremo grande vantaggio da una rappresentazione degli operatori in forma di matrici hermitiane 2x2 con componenti indicate come segue:

$$A_{ij} = \langle i | \hat{A} | j \rangle \quad (1.28)$$

dove A_{ij} è l'elemento di matrice ij-esimo dell'operatore \hat{A} .

La matrice hermitiana 2x2 A più generale possibile potrà essere scritta come

$$A = \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_0 - a_3 \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

che avrà quindi $TrA = 2a_0$ e $detA = a_0^2 - a_1^2 - a_2^2 - a_3^2$; l'equazione agli autovalori di una tale matrice sarà data da:

$$det(A - \lambda I) = \lambda^2 - (trA)\lambda + detA \quad (1.30)$$

Per il teorema di Hamilton-Cayley vale però che:

$$A^2 - (trA)A + (detA)I = 0 \quad (1.31)$$

dal quale segue che:

$$A^{-1} = (detA)^{-1}((trA)I - A) \quad (1.32)$$

Dalle matrici di Pauli (1.15) è possibile scrivere che:

$$A = a_0 I + a_1 \sigma_1 + a_2 \sigma_2 + a_3 \sigma_3 = a_0 I + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (1.33)$$

che è l'analogo matriciale dell'equazione 1.1. Gli autovalori di una tale matrice saranno:

$$a_{\pm} = a_0 \pm |\mathbf{a}| \quad (1.34)$$

si noti che, affinché i due autovalori siano identici, $|\mathbf{a}| = 0$ e quindi $A \simeq I$ (questo tornerà utile in seguito, quando considereremo problemi con un Hamiltoniana con un solo livello energetico doppiamente degenere).

Supponiamo di avere una base di autoket di A che indicheremo come $|a_{\pm}\rangle$, allora:

$$A|a_{\pm}\rangle = |a_{\pm}\rangle(a_0 \pm |\mathbf{a}|) \quad (1.35)$$

Come fatto in precedenza, risolviamo l'equazione agli autovalori solo per la parte $\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ dove \mathbf{a} sarà da ora un vettore unitario; otteniamo allora:

$$\begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_3 \end{pmatrix} |a_{\pm}\rangle = |a_{\pm}\rangle(\pm 1) \quad (1.36)$$

Se assumiamo che $1 \pm a_3 \neq 0$ possiamo allora ottenere i ket normalizzati:

$$|a_{\pm}\rangle = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1 \pm a_3}{2}} \\ \pm \sqrt{\frac{1}{2(1 \pm a_3)}}(a_1 + ia_2) \end{pmatrix} e^{i\alpha} \quad (1.37)$$

con α arbitrario.

Essendo il vettore \mathbf{a} unitario varrà la condizione $a_3^2 + a_1^2 + a_2^2 = 1$ e potremo porre

$$\begin{aligned} a_1 &= \sqrt{1 - a_3^2} \cos \phi \\ a_2 &= \sqrt{1 - a_3^2} \sin \phi \end{aligned} \quad (1.38)$$

da cui allora è possibile scrivere, moltiplicando per l'opportuno fattore di fase:

$$|a_{\pm}\rangle = \begin{pmatrix} \pm \sqrt{\frac{1 \pm a_3}{2}} e^{\frac{i}{2}(\phi \mp \phi)} \\ \sqrt{\frac{1 \mp a_3}{2}} e^{\frac{i}{2}(\phi \pm \phi)} \end{pmatrix} \quad (1.39)$$

Ponendo $a_3 = \cos \theta$ otteniamo infine:

$$\begin{aligned} |a_{+}\rangle &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ |a_{-}\rangle &= \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.40)$$

che è l'equivalente della 1.26.

1.3 Spettro Energetico di un Sistema a 2 Livelli

Sia un sistema a due livelli (o con diversi livelli di cui solo due accessibili) il cui Hamiltoniano è \widehat{H}_0 e siano $h_{0,\pm 1}$ e $|0, \pm 1\rangle$ rispettivamente gli autovalori e autostati energetici del sistema, con $h_{0,+1} > h_{0,-1}$ e tali che valgano le relazioni 1.8. Varrà allora l'equazione agli autovalori che segue:

$$\widehat{H}_0|0, \pm 1\rangle = |0, \pm 1\rangle h_{0,\pm 1} \quad (1.41)$$

Essendo i sistemi a due livelli i più semplici in assoluto sarà possibile ottenere analiticamente la soluzione di diversi problemi perturbati dove \widehat{H}_0 sarà l'hamiltoniano imperturbato; sia dunque una perturbazione \widehat{W} tale che l'Hamiltoniano perturbato del sistema sia:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{W} \quad (1.42)$$

Gli autovalori energetici perturbati saranno $h_{\pm 1}$ (anche qui $h_{+1} > h_{-1}$) e i corrispondenti autostati perturbati $|\pm 1\rangle$, che saranno una base ortonormale per cui valgono le relazioni 1.8 e che soddisfano l'equazione agli autovalori

$$\widehat{H}|\pm 1\rangle = |\pm 1\rangle h_{\pm 1} \quad (1.43)$$

Sia una base orientata sferica \mathbf{e}_α tale che $|0, \pm 1\rangle = |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle$ e che gli operatori di Pauli siano definiti in forma matriciale come 1.17, allora definiamo l'energia media imperturbata e il gap energetico imperturbato come rispettivamente:

$$\begin{aligned} h_{0m} &= \frac{(h_{0,+1} + h_{0,-1})}{2} \\ \Delta h_0 &= h_{0,+1} - h_{0,-1} \end{aligned} \quad (1.44)$$

che ci consentirà di scrivere

$$\widehat{H}_0 = h_{0m}\widehat{1} + \frac{\Delta h_0}{2}\widehat{\sigma}_0 \quad (1.45)$$

Questa ultima relazione può essere facilmente dimostrata usando il teorema spettrale, infatti:

$$\begin{aligned} \widehat{H}_0 &= |0, +1\rangle h_{0,+1} \langle 0, +1| + |0, -1\rangle h_{0,-1} \langle 0, -1| = \\ &= |0, +1\rangle (h_{0m} + \frac{\Delta h_0}{2}) \langle 0, +1| + |0, -1\rangle (h_{0m} - \frac{\Delta h_0}{2}) \langle 0, -1| = \\ &= h_{0m}(|0, +1\rangle \langle 0, +1| + |0, -1\rangle \langle 0, -1|) + \\ &+ \frac{\Delta h_0}{2}(|0, +1\rangle \langle 0, +1| - |0, -1\rangle \langle 0, -1|) \end{aligned} \quad (1.46)$$

dove si ha da 1.17 che $\widehat{\sigma}_0 = |0, +1\rangle \langle 0, +1| - |0, -1\rangle \langle 0, -1|$. La perturbazione invece potrà essere scritta, seguendo la 1.1, come:

$$\widehat{W} = w_m \widehat{1} + \mathbf{w} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (1.47)$$

così che risulti:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{W} = (h_{0m} + w_m)\widehat{1} + \left(\frac{\Delta h_0}{2} \mathbf{e}_0 + \mathbf{w} \right) \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (1.48)$$

Allora, seguendo il risultato dato dalla 1.12 avremo che:

$$h_{\pm 1} = h_{0m} + w_m \pm \left| \frac{\Delta h_0}{2} \mathbf{e}_0 + \mathbf{w} \right| \quad (1.49)$$

Dalla relazione 1.26 avremo:

$$\begin{aligned} | + 1 \rangle &= |0, +1\rangle \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + |0, -1\rangle \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} \\ | - 1 \rangle &= -|0, +1\rangle \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} + |0, -1\rangle \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned} \quad (1.50)$$

con

$$\begin{aligned} \cos\theta &= \frac{\frac{\Delta h_0}{2} \mathbf{e}_0 + \mathbf{w}}{\left| \frac{\Delta h_0}{2} \mathbf{e}_0 + \mathbf{w} \right|} \cdot \mathbf{e}_0 \\ e^{\pm i\phi} &= \frac{w_{\pm 1}}{|w_{\pm 1}|} \end{aligned} \quad (1.51)$$

Accade spesso che la perturbazione \widehat{W} sia molto piccola rispetto all'Hamiltoniano imperturbato \widehat{H}_0 , ovvero:

$$|\mathbf{w}| \ll h_{0m}, \Delta h_0 \quad (1.52)$$

in questo caso possiamo allora espandere le relazioni 1.49 e 1.50 in serie di Taylor e ottenere che:

$$h_{\pm 1} = h_{0m} + w_m \pm \left(\frac{\Delta h_0}{2} + w_0 + \frac{|w_{\pm 1}|^2}{\Delta h_0} \right) + o\left(\frac{|\mathbf{w}|^3}{\Delta h_0^2}\right) \quad (1.53)$$

$$\begin{aligned} | + 1 \rangle &= |0, +1\rangle + |0, -1\rangle \frac{w_{-1}}{\Delta h_0} + o\left(\frac{|\mathbf{w}|^2}{\Delta h_0^2}\right) \\ | - 1 \rangle &= -|0, +1\rangle \frac{w_{-1}}{\Delta h_0} e^{-i\phi} + |0, -1\rangle + o\left(\frac{|\mathbf{w}|^2}{\Delta h_0^2}\right) \end{aligned} \quad (1.54)$$

Infatti, ricordando gli sviluppi in serie di Taylor

$$\begin{aligned} (1+x)^{1/2} &= 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + o(x^3) \\ (1+x)^{-1} &= 1 - x + x^2 + o(x^3) \end{aligned} \quad (1.55)$$

possiamo vedere che:

$$\begin{aligned}
\left| \frac{\Delta h_0}{2} \mathbf{e}_0 + \mathbf{w} \right| &= \sqrt{\left(\frac{\Delta h_0}{2} \right)^2 + |\mathbf{w}|^2 + \Delta h_0 w_0} = \\
&= \frac{\Delta h_0}{2} \sqrt{1 + \left(\frac{4w_0}{\Delta h_0} + \left(\frac{2|\mathbf{w}|}{\Delta h_0} \right)^2 \right)} = \\
&= \frac{\Delta h_0}{2} \left(1 + \frac{2w_0}{h_0} + \frac{2w_{+1}w_{-1}}{\Delta h_0^2} + o\left(\frac{|\mathbf{w}|^3}{\Delta h_0^3} \right) \right)
\end{aligned} \tag{1.56}$$

che possiamo inserire nella 1.49 per ottenere la 1.53.

Per quanto riguarda il calcolo delle relazioni 1.54, bisogna calcolare

$$\cos \theta = \frac{\frac{\Delta h_0}{2} + w_0}{\left| \frac{\Delta h_0}{2} \mathbf{e}_0 + \mathbf{w} \right|} = 1 - \frac{2|w_{\pm 1}|^2}{\Delta h_0^2} + o\left(\frac{|\mathbf{w}|^3}{\Delta h_0^3} \right) \tag{1.57}$$

con cui poi calcoliamo $\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$ e $\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ usando le formule di bisezione.

Ora che abbiamo fatto questo, è bene spiegare il senso fisico di quanto abbiamo appena descritto: il sistema imperturbato avrà una energia media h_{0m} e una differenza energetica Δh_0 tra essi (che potrà essere nulla se e solo se l'Hamiltoniano coincide con l'identità moltiplicata per una costante); una volta "accesa" la perturbazione, essa cambierà l'energia media di un fattore w_m , ma cambierà anche la separazione tra i livelli energetici precedenti (anche dividendo due livelli energetici che prima erano coincidenti).

Capitolo 2

Esempi di Sistemi a 2 Stati nel Caso Statico

2.1 Molecola di Idrogeno Ionizzata

Consideriamo ora una molecola di idrogeno H_2^+ , costituita da due protoni a cui è legato un solo elettrone; se i due protoni sono molto distanti, ci aspettiamo che l'elettrone possa essere osservato in uno stato legato con uno o con l'altro nucleo, dove questo stato legato corrisponderà allo stato fondamentale di un atomo idrogenoide.

Siano allora i due stati $|0, \pm 1\rangle$ che rappresentano i due stati legati appena detti, la cui combinazione lineare (con pesi uguali per ragioni di simmetria) ci fornisce lo stato $|-1\rangle$ effettivo della molecola; i due stati $|0, \pm 1\rangle$ saranno gli stati fondamentali di un atomo idrogenoide ed in prima approssimazione possiamo dire che hanno entrambi energia h_0 , che corrisponde agli elementi di matrice $H_{++} = H_{--}$, con

$$h_0 = \langle 0, +1 | \hat{H} | 0, +1 \rangle = \langle 0, -1 | \hat{H} | 0, -1 \rangle \quad (2.1)$$

Si noti però che questa è solo una prima approssimazione e dobbiamo infatti considerare gli elementi di matrice H_{+-} e H_{-+} , i quali sono le "ampiezze" con cui l'elettrone si muove tra uno stato e l'altro; scegliamo allora una base ortonormale orientata e_α così che possiamo scrivere \hat{H} come:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \quad (2.2)$$

dove avremo

$$\hat{H}_0 = h_0 \hat{1} \quad (2.3)$$

e

$$\hat{W} = \frac{1}{2}(w^* \hat{\sigma}_{+1} + w \hat{\sigma}_{-1}) \quad (2.4)$$

dove w è l'elemento di matrice $H_{-+} = \langle 0, -1 | \hat{H} | 0, +1 \rangle$ detto prima, mentre w^* è il suo coniugato H_{+-} .

In accordo con la formula 1.49, troviamo allora che l'energia del sistema sarà:

$$h_{\pm 1} = h_0 \pm |w| \quad (2.5)$$

ovvero lo stato effettivo $| - 1 \rangle$ non avrà l'energia di uno stato fondamentale di un atomo idrogenoide, bensì avrà una correzione data dal fatto che può andare da uno stato all'altro, che ci fornirà due possibili stati $| \pm 1 \rangle$:

$$\begin{aligned} | + 1 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, +1\rangle + |0, -1\rangle \frac{w}{|w|}) \\ | - 1 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-|0, +1\rangle \frac{w^*}{|w|} + |0, -1\rangle) \end{aligned} \quad (2.6)$$

che rappresentano rispettivamente il primo stato eccitato della molecola e il suo stato fondamentale.

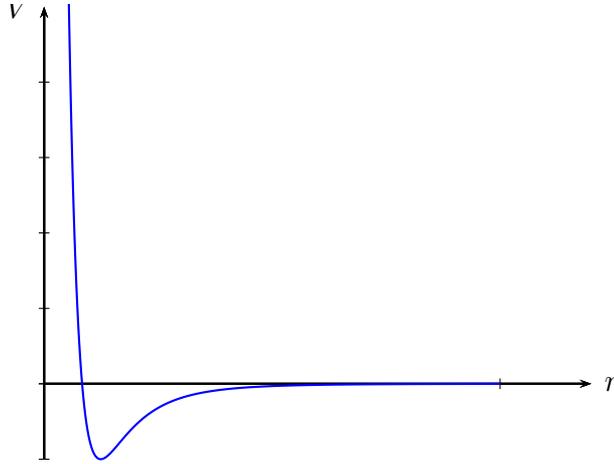
Si noti che l'energia $|w|$ dipenderà dalla distanza internucleare dei due protoni, aumentando all'avvicinarsi dei due nuclei, il che significa che all'avvicinarsi dei nuclei il livello energetico h_{-1} si abbassa rispetto al livello energetico idrogenoide h_0 .

2.1.1 Affidabilità del Modello a 2 Stati della Molecola di Idrogeno Ionizzata

Dalla nostra soluzione, noi abbiamo visto che se un protone ed un atomo di idrogeno vengono avvicinati, l'elettrone non rimarrà legato al nucleo di idrogeno, ma potrà trovarsi sia in uno stato legato con esso che in uno stato legato all'altro protone; la combinazione lineare di questi stati ci fornirà lo stato fondamentale della molecola di idrogeno ionizzata.

Si noti una cosa però: nel nostro modello, l'elemento di matrice H_{+-} (che ci forniva l'energia w) aumenta mano a mano che avviciniamo i due protoni, aumentando sempre di più la separazione dei livelli energetici; avvicinando i due nuclei, avremo che lo stato fondamentale cala la propria energia (e avremo quindi una forza attrattiva) mentre il primo stato eccitato aumenta la propria energia (e avremo quindi una forza repulsiva): abbiamo fornito, in maniera molto semplificata, una spiegazione della forza di legame che mantiene unita la molecola di H_2^+ .

Ciò che però non abbiamo previsto è che, avvicinando i nuclei, si attivi anche una grande forza repulsiva nucleare, la quale aumenta l'energia dello stato fondamentale; avremo quindi un minimo dell'energia dello stato fondamentale al quale corrisponderà una distanza tra i nuclei tale da minimizzare l'energia del sistema e renderlo il più stabile possibile.[4]



Effetto della Repulsione Nucleare sul Potenziale

2.2 Effetto Stark

L'effetto Stark è un fenomeno che fu scoperto nel 1913 dall'omonimo scienziato (talvolta è anche chiamato "Effetto Stark-Lo Surdo" dal nome di un altro fisico italiano, che lo scoprì anch'egli indipendentemente nello stesso anno), il quale osservò come la presenza di un campo elettrico esterno fosse capace di produrre uno spostamento e una divisione delle righe spettrali [13]; intuitivamente è possibile pensare che questo campo esterno possa allontanare elettroni e nuclei, essendo questi carichi in maniera opposta, e avrà un effetto maggiore più lontani gli elettroni sono dal nucleo.

In un atomo a molti elettroni infatti, gli elettroni tendono a organizzarsi in gusci sferici a distanze differenti dai nuclei, dove gli elettroni delle shell più interne hanno un effetto schermante che porta gli elettroni più esterni ad essere meno legati al nucleo; gli elettroni più esterni saranno detti "elettroni di valenza", e regoleranno la formazione di molecole o l'azione di campi elettromagnetici esterni sull'atomo.

Per gli atomi alcalini, ovvero gli atomi appartenenti al primo gruppo della tavola periodica, la shell più esterna ha un solo elettrone di valenza, detto **elettrone ottico**, che ci consente di trattarli come se fossero atomi con un solo elettrone immerso in un campo centrale (che però sarà non coulombiano a causa dell'effetto schermante delle shell più interne); per questi atomi alcalini sarà possibile un'analisi dell'effetto Stark come sistema a due livelli come segue.

Sia un campo elettrico esterno \mathbf{E} che interagisce con un atomo alcalino perturbandolo con

$$\widehat{W} = -e\mathbf{E} \cdot \widehat{\mathbf{q}} \quad (2.7)$$

dove $\hat{\mathbf{q}}$ è l'operatore posizione; come già detto, gli elettroni più interni saranno spostati di poco dalle loro posizioni di equilibrio e daranno quindi un contributo trascurabile a questa perturbazione.

Per poter continuare, è necessario introdurre l'operatore di parità \hat{P} , il quale agisce sugli autoket $|\mathbf{x}\rangle$ dell'operatore $\hat{\mathbf{q}}$ come segue:

$$\hat{P}|\mathbf{x}\rangle = |-\mathbf{x}\rangle \quad (2.8)$$

Questo operatore agisce sugli autoket $|\mathbf{y}\rangle$ dell'impulso in maniera analoga a quanto visto prima, ovvero:

$$\hat{P}|\mathbf{y}\rangle = |-\mathbf{y}\rangle \quad (2.9)$$

Tra le sue proprietà, l'operatore di parità è autoaggiunto e unitario

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P}^{-1} = \hat{P} \quad (2.10)$$

e ha spettro che coincide con ± 1 . Ciò può essere facilmente dimostrato poiché:

$$\langle \mathbf{x}' | \hat{P}^\dagger | \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x} | \hat{P} | \mathbf{x}' \rangle^* = \langle \mathbf{x} | -\mathbf{x}' \rangle^* = \delta(\mathbf{x} + \mathbf{x}')^* = \langle \mathbf{x}' | -\mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}' | \hat{P} | \mathbf{x} \rangle \quad (2.11)$$

che dimostra che $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$. In aggiunta, vediamo che:

$$\hat{P}^2|\mathbf{x}\rangle = \hat{P}|-\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x}\rangle = \hat{1}|\mathbf{x}\rangle \quad (2.12)$$

che ci dice che $\hat{P} = \hat{P}^{-1}$. Per dimostrare che lo spettro di \hat{P} è ± 1 prendiamo un generico $|\phi\rangle$, per il quale definiamo

$$|\phi, \pm 1\rangle = \frac{1}{2}(\hat{1} \pm \hat{P})|\phi\rangle \quad (2.13)$$

Usando la relazione $\hat{P}^2 = \hat{1}$ vediamo allora che:

$$\hat{P}|\phi, \pm 1\rangle = \frac{1}{2}(\hat{P} \pm \hat{P}^2)|\phi\rangle = \frac{1}{2}(\hat{P} \pm \hat{1})|\phi\rangle = |\phi, \pm 1\rangle(\pm 1) \quad (2.14)$$

Un'altra coppia di relazioni (la cui dimostrazione è ovvia e non sarà trattata) è la seguente:

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{\mathbf{q}}\hat{P} &= -\hat{\mathbf{q}} \\ \hat{P}\hat{\mathbf{p}}\hat{P} &= -\hat{\mathbf{p}} \end{aligned} \quad (2.15)$$

A questo punto, sia l'Hamiltoniano per un elettrone esterno debolmente legato al nucleo $\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{q}})$ dove il potenziale $U(\mathbf{x})$ è un potenziale centrale di natura elettrostatica (ma non è il potenziale Coulombiano) per cui vale che $U(\mathbf{x}) = U(-\mathbf{x})$; per questo hamiltoniano varrà la relazione di commutazione

$$[\hat{H}_0, \hat{P}] = 0 \quad (2.16)$$

ciò può essere facilmente dimostrato poiché:

$$\widehat{P}\widehat{H}_0\widehat{P} = \frac{(\widehat{P}\widehat{\mathbf{p}}\widehat{P})^2}{2m} + U(\widehat{P}\widehat{\mathbf{q}}\widehat{P}) = \frac{-\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(-\widehat{\mathbf{q}}) = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\widehat{\mathbf{q}}) = \widehat{H}_0 \quad (2.17)$$

dal quale si deduce che $\widehat{H}_0\widehat{P} = \widehat{P}\widehat{H}_0$.

Visto quanto appena detto, possiamo allora dire che \widehat{H}_0 e \widehat{P} sono due operatori autoaggiunti e commutanti, che saranno dunque dotati di una base ortonormale di autoket che chiameremo $|0, \pm 1\rangle$ tali che

$$\begin{aligned} \widehat{P}|0, \pm 1\rangle &= |0, \pm 1\rangle(\mp 1) \\ \widehat{H}_0|0, \pm 1\rangle &= |0, \pm 1\rangle h_{0, \pm 1} \end{aligned} \quad (2.18)$$

con $h_{0, -1} < h_{0, +1}$ autovalori energetici tali che allora $|0, -1\rangle$ rappresenta lo stato fondamentale e $|0, +1\rangle$ rappresenta il primo stato eccitato.

Si noti a questo punto che gli elementi di matrice diagonali dell'operatore $\widehat{\mathbf{q}}$ sono nulli, poiché

$$\langle 0, \pm 1 | \widehat{\mathbf{q}} | 0, \pm 1 \rangle = (\mp 1) \langle 0, \pm 1 | \widehat{P} \widehat{\mathbf{q}} \widehat{P} | 0, \pm 1 \rangle (\mp 1) = -\langle 0, \pm 1 | \widehat{\mathbf{q}} | 0, \pm 1 \rangle \quad (2.19)$$

dal quale si arriva allora a dire che

$$\langle 0, \pm 1 | \widehat{\mathbf{q}} | 0, \pm 1 \rangle = 0 \quad (2.20)$$

Definiamo ora il momento di dipolo di transizione come l'elemento di matrice

$$\mathbf{d} = -e \langle 0, -1 | \widehat{\mathbf{q}} | 0, +1 \rangle \quad (2.21)$$

Se ora scegliamo una base sferica orientata \mathbf{e}_α tale che $|\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle = |0, \pm 1\rangle$ allora la perturbazione \widehat{W} diventa:

$$\widehat{W} = \frac{1}{2} \mathbf{d}^* \cdot \mathbf{E} \widehat{\sigma}_{+1} + \frac{1}{2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{E} \widehat{\sigma}_{-1} \quad (2.22)$$

Infatti possiamo vedere che l'operatore posizione avrà:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{q}} &= \widehat{\mathbf{1}} \widehat{\mathbf{q}} \widehat{\mathbf{1}} = \\ &= (|0, +1\rangle \langle 0, +1| + |0, -1\rangle \langle 0, -1|) \widehat{\mathbf{q}} (|0, +1\rangle \langle 0, +1| + |0, -1\rangle \langle 0, -1|) = \\ &= |0, +1\rangle \langle 0, +1 | \widehat{\mathbf{q}} | 0, -1\rangle \langle 0, -1| + |0, -1\rangle \langle 0, -1 | \widehat{\mathbf{q}} | 0, +1\rangle \langle 0, +1| = \\ &= \frac{1}{e} (|0, +1\rangle \mathbf{d} \langle 0, -1| + |0, -1\rangle \mathbf{d}^* \langle 0, +1|) \end{aligned} \quad (2.23)$$

dove si è usata la relazione 2.20 per eliminare gli elementi di matrice diagonali; ricordando che nella base ortonormale sferica gli operatori $\sigma_{\pm 1}$ sono dati dalla relazione 1.17, possiamo inserire quanto visto in \widehat{W} e ottenere il risultato atteso.

Dalla relazione 1.52 vediamo che, se vale

$$a_B |e\mathbf{E}| \ll h_{0m}, \Delta h_0 \quad (2.24)$$

(dove $\mathbf{w} = \frac{1}{2}\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$, per il quale si usa come momento di dipolo di transizione $|\mathbf{d}| = ea_B$, con a_B raggio di Bohr, che fa da lunghezza di scala per i sistemi atomici) potremo usare le relazioni 1.53 e 1.54 per ottenere di conseguenza che:

$$h_{\pm 1} = h_{0m} \pm \left(\frac{\Delta h_0}{2} + \frac{|\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}|^2}{\Delta h_0} \right) + o \left(\frac{a_B^3 |e\mathbf{E}|^3}{\Delta h_0^2} \right) \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} | + 1 \rangle &= |0, +1\rangle + |0, -1\rangle \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}}{\Delta h_0} + o \left(\frac{a_B^2 |e\mathbf{E}|^2}{\Delta h_0^2} \right) \\ | - 1 \rangle &= -|0, +1\rangle \frac{\mathbf{d}^* \cdot \mathbf{E}}{\Delta h_0} + |0, -1\rangle + o \left(\frac{a_B^2 |e\mathbf{E}|^2}{\Delta h_0^2} \right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Possiamo allora calcolare l'energia media e lo splitting energetico, ottenendo:

$$\begin{aligned} h_m &= h_{0m} \\ \Delta h &= \Delta h_{0m} + 2 \frac{|\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}|^2}{\Delta h_0} + o \left(\frac{a_B^3 |e\mathbf{E}|^3}{\Delta h_0^2} \right) \end{aligned} \quad (2.27)$$

che ci dice che avremo solo un effetto di separazione delle righe spettrali, ma non uno di spostamento.

Capitolo 3

Evoluzione Temporale di un Sistema a due Stati

3.1 Operatore Evoluzione per un Sistema a Due Stati

Iniziamo questo capitolo descrivendo in breve l'evoluzione temporale di un sistema, che parte da uno stato iniziale $|\psi(s)\rangle$ indipendente dal tempo. L'equazione di Schroedinger per un tale sistema sarà

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \quad (3.1)$$

Possiamo esprimere la soluzione di tale equazione utilizzando un opportuno operatore lineare $\hat{U}(t, s)$ tale che

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, s)|\psi(s)\rangle \quad (3.2)$$

Questo operatore, detto **operatore evoluzione**, è un operatore unitario che soddisfa le seguenti equazioni

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, s)}{\partial t} &= \hat{H}(t)\hat{U}(t, s) \\ i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, s)}{\partial s} &= -\hat{U}(t, s)\hat{H}(s) \end{aligned} \quad (3.3)$$

e valgono le seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} \hat{U}(s, s) &= \hat{1} \\ \hat{U}(t, s)^{-1} &= \hat{U}(t, s)^\dagger \\ \hat{U}(t, u)\hat{U}(u, s) &= \hat{U}(t, s) \\ \hat{U}(s, t) &= \hat{U}(t, s)^{-1} \end{aligned} \quad (3.4)$$

le cui dimostrazioni sono semplici e non saranno trattate.

Ciò che a noi interessa maggiormente dell'operatore evoluzione però è il caso particolare in cui l'hamiltoniano del sistema è indipendente dal tempo, ovvero se $\widehat{H}(t) = \widehat{H}_0$; in questo caso, dalla prima equazione delle 3.3 è possibile verificare che

$$\widehat{U}(t, s) = e^{-i\hbar^{-1}(t-s)\widehat{H}_0} \quad (3.5)$$

che chiameremo $\widehat{U}_0(t, s)$ e che ora applicheremo al caso di un sistema a due stati.

Sia un sistema a due livelli con Hamiltoniano della forma

$$\widehat{H} = h_m \widehat{1} - \hbar\omega \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (3.6)$$

dove h_m è l'energia media del sistema, ω è una frequenza e \mathbf{n} è un vettore con norma unitaria.

Scegliendo opportunamente lo zero dell'energia possiamo porre $h_m = 0$ così da avere $\widehat{H} = -\hbar\omega \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$, il quale avrà autovalori

$$h_{\pm 1} = \pm \hbar\omega \quad (3.7)$$

e autoket

$$|\pm 1\rangle = |-\mathbf{n}, \pm 1\rangle \quad (3.8)$$

Scriviamo ora l'equazione di Schroedinger del sistema

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = -\hbar\omega \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} |\psi(t)\rangle \quad (3.9)$$

dove avremo dall'equazione 3.5 che

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\omega t \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}} |\psi_0\rangle \quad (3.10)$$

Si noti però che $e^{i\omega t \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}}$ è l'esponenziale di Pauli, per cui avevamo già visto che esiste un'espansione data come 1.20 (dove in questo caso $\theta = 2\omega t$ e $\mathbf{k} = \mathbf{n}$), allora:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_0\rangle \cos(\omega t) + \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} |\psi_0\rangle i \sin(\omega t) \quad (3.11)$$

In un sistema a due stati, un oggetto fisico può trovarsi in soli due stati indipendenti $|\mathbf{e}_3, \pm 1\rangle$ a qualsiasi istante temporale la cui probabilità sarà data da $|\langle \mathbf{e}_3, \pm 1 | \psi(t) \rangle|^2$; supponiamo ora che il sistema inizi nello stato $|\psi_0\rangle = |\mathbf{e}_3, +1\rangle$, allora la probabilità che il sistema si trovi nello stato $|\mathbf{e}_3, -1\rangle$ al tempo t sarà data da

$$P_{flip} = |\mathbf{n} \times \mathbf{e}_3|^2 \sin^2(\omega t) \quad (3.12)$$

Ciò deriva infatti dal fatto che

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{e}_3, -1 | \psi(t) \rangle &= \langle \mathbf{e}_3, -1 | (|\mathbf{e}_3, +1\rangle \cos(\omega t) + \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_3, +1\rangle i \sin(\omega t)) = \\ &= \langle \mathbf{e}_3, -1 | \mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} | \mathbf{e}_3, +1 \rangle \end{aligned} \quad (3.13)$$

dove però abbiamo che $\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = n_1 \hat{\sigma}_1 + n_2 \hat{\sigma}_2 + n_3 \hat{\sigma}_3$; grazie alle espansioni 1.15 è possibile vedere che

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{e}_3, -1 | \mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \mathbf{e}_3, +1 \rangle &= n_1 \langle \mathbf{e}_3, -1 | \hat{\sigma}_1 | \mathbf{e}_3, +1 \rangle + n_2 \langle \mathbf{e}_3, -1 | \hat{\sigma}_2 | \mathbf{e}_3, +1 \rangle + \\ &+ n_3 \langle \mathbf{e}_3, -1 | \hat{\sigma}_3 | \mathbf{e}_3, +1 \rangle = n_1 + in_2 \end{aligned} \quad (3.14)$$

il cui modulo quadrato ci da $n_1^2 + n_2^2 = 1 - n_3^2 = |\mathbf{n} \times \mathbf{e}_3|^2$ come volevasi dimostrare.

3.2 Spin 1/2

Sia una base orientata ortonormale \mathbf{e}_i , tale che gli operatori di Pauli $\hat{\sigma}_i$ sono dati dalla relazione 1.15 e consideriamo l'operatore

$$\hat{S}_k = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_k \quad (3.15)$$

dalle relazioni 1.4, possiamo vedere che varranno le regole di commutazione

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{S}_k \quad (3.16)$$

che sono relazioni di commutazione analoghe a quelle valide per gli operatori di momento angolare; l'operatore così descritto è infatti la componente k-esima dell'operatore vettoriale di spin

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (3.17)$$

Si noti inoltre che questo operatore soddisferà la relazione

$$\hat{S}_k^\dagger = \hat{S}_k \quad (3.18)$$

ovvero sarà autoaggiunto, che è ovvio visto che gli operatori di Pauli sono autoaggiunti. Nella teoria dei momenti angolari, è sempre possibile costruire l'operatore

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \quad (3.19)$$

ma, sapendo che $\hat{\sigma}_k^2 = \hat{1}$, vedremo allora che

$$\hat{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \hat{1} \quad (3.20)$$

allora, preso un generico stato $|\psi\rangle$, vedrò che:

$$\hat{S}^2 |\psi\rangle = |\psi\rangle \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \quad (3.21)$$

che, dalla teoria del momento angolare, ci dice che tutti gli stati $|\psi\rangle$ di due sole componenti saranno autovettori dell'operatore \widehat{S}^2 con spin $s = \frac{1}{2}$. Siano due ket $|0, \pm 1\rangle$ tali che $|\mathbf{e}_3, \pm 1\rangle = |0, \pm 1\rangle$ e che

$$\widehat{S}_3|0, \pm 1\rangle = |0, \pm 1\rangle \left(\pm \frac{\hbar}{2} \right) \quad (3.22)$$

dove l'operatore $\widehat{S}_3 = \frac{\hbar}{2}\widehat{\sigma}_3$ sarà la componente dell'operatore di spin relativa all'asse z. Dalla relazione 1.26, possiamo vedere ogni stato $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$ come:

$$\begin{aligned} |\mathbf{n}, +1\rangle &= |0, +1\rangle \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + |0, -1\rangle \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} \\ |\mathbf{n}, -1\rangle &= -|0, +1\rangle \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} + |0, -1\rangle \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

con gli angoli θ e ϕ definiti dalla relazione 1.27.

Attraverso la rappresentazione descritta dalla relazione 1.26 uno stato arbitrario puro può essere rappresentato sulla superficie di una sfera di raggio unitario, detta **Sfera di Bloch**, che sarà trattata a parte in seguito, ma di cui si preannunciano qui alcune caratteristiche.

Infatti, oltre che una rappresentazione cartesiana di un vettore è possibile darne una rappresentazione in coordinate sferiche, che sono:

$$\begin{aligned} x &= \sin\theta \cos\phi \\ y &= \sin\theta \sin\phi \\ z &= \cos\theta \end{aligned} \quad (3.24)$$

e definiremo un vettore unitario di questo tipo un **vettore di Bloch**[15].

Sia ora l'operatore di Spin totale dato dalla relazione 3.17, il quale ha valor medio

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \sum_{i=1}^3 \langle S_i \rangle \mathbf{e}_i \quad (3.25)$$

con $\langle S_i \rangle$ valor medio di \widehat{S}_i . Possiamo dimostrare che questo valor medio è un vettore di Bloch, infatti vediamo i valori medi dei tre operatori di Spin nella base $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$ (useremo solo $|\mathbf{n}, +1\rangle$ per il conto); dalla relazione 1.15 possiamo esplicitare gli operatori di Pauli come:

$$\begin{aligned} \widehat{\sigma}_1 &= |\mathbf{e}_3, +1\rangle \langle \mathbf{e}_3, -1| + |\mathbf{e}_3, -1\rangle \langle \mathbf{e}_3, +1| \\ \widehat{\sigma}_2 &= -i|\mathbf{e}_3, +1\rangle \langle \mathbf{e}_3, -1| + i|\mathbf{e}_3, -1\rangle \langle \mathbf{e}_3, +1| \\ \widehat{\sigma}_3 &= |\mathbf{e}_3, +1\rangle \langle \mathbf{e}_3, +1| - |\mathbf{e}_3, -1\rangle \langle \mathbf{e}_3, -1| \end{aligned} \quad (3.26)$$

dove d'ora in poi sostituiamo $|0, \pm 1\rangle$ a $|\mathbf{e}_3, \pm 1\rangle$. Allora, calcoliamo i valori medi

$$\begin{aligned}
\langle S_1 \rangle &= \langle \mathbf{n}, +1 | \widehat{S}_1 | \mathbf{n}, +1 \rangle = \frac{\hbar}{2} (\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle 0, +1 | + \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i\phi} \langle 0, -1 |) \widehat{\sigma}_1 (|0, +1\rangle \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) + \\
&+ |0, -1\rangle \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{i\phi}) = \frac{\hbar}{2} (\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle 0, +1 | + \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i\phi} \langle 0, -1 |) (|0, +1\rangle \langle 0, -1 | + \\
&+ |0, -1\rangle \langle 0, +1 |) (|0, +1\rangle \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) + |0, -1\rangle \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{i\phi}) = \\
&= \frac{\hbar}{2} (\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle 0, -1 | + \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i\phi} \langle 0, +1 |) (|0, +1\rangle \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) + |0, -1\rangle \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{i\phi}) = \\
&= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \phi
\end{aligned} \tag{3.27}$$

$$\begin{aligned}
\langle S_2 \rangle &= \frac{\hbar}{2} \langle \mathbf{n}, +1 | \widehat{\sigma}_2 | \mathbf{n}, +1 \rangle = \\
&= \frac{\hbar}{2} (\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle 0, +1 | + \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i\phi} \langle 0, -1 |) (-i|0, +1\rangle \langle 0, -1 | + \\
&+ i|0, -1\rangle \langle 0, +1 |) (|0, +1\rangle \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) + |0, -1\rangle \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{i\phi}) = \\
&= \frac{\hbar}{2} (\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle 0, +1 | + \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i\phi} \langle 0, -1 |) (i|0, -1\rangle \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) - i|0, +1\rangle \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{i\phi}) = \\
&= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \phi
\end{aligned} \tag{3.28}$$

$$\begin{aligned}
\langle S_3 \rangle &= \frac{\hbar}{2} \langle \mathbf{n}, +1 | \widehat{\sigma}_3 | \mathbf{n}, +1 \rangle = \frac{\hbar}{2} (\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle 0, +1 | + \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i\phi} \langle 0, -1 |) \widehat{\sigma}_3 (|0, +1\rangle \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) + \\
&+ |0, -1\rangle \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{i\phi}) = \frac{\hbar}{2} (\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle 0, +1 | + \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i\phi} \langle 0, -1 |) (|0, +1\rangle \langle 0, +1 | - \\
&- |0, -1\rangle \langle 0, -1 |) (|0, +1\rangle \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) + |0, -1\rangle \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{i\phi}) = \\
&= \frac{\hbar}{2} (\cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \langle 0, +1 | + \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i\phi} \langle 0, -1 |) (|0, +1\rangle \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) - |0, -1\rangle \sin \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{i\phi}) = \\
&= \frac{\hbar}{2} \cos \theta
\end{aligned} \tag{3.29}$$

E abbiamo quindi dimostrato che il valor medio dell'operatore di Spin è un vettore di Bloch.

3.3 Equazioni di Bloch

Le equazioni ottiche di Bloch, talvolta dette anche "equazioni di Maxwell-Bloch", sono equazioni che descrivono la dinamica di un sistema a due stati immerso in un campo elettromagnetico; sia allora un campo magnetico \mathbf{B} , per il quale si ha Hamiltoniano

$$\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} \quad (3.30)$$

dove $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ è l'operatore di momento magnetico

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = 2\frac{\mu_b}{\hbar}\hat{\mathbf{S}} = \mu_b\hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (3.31)$$

dove μ_b indica il magnetone di Bohr.

Sia l'equazione di Schroedinger correlata a questo problema

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = -\mu_b\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}|\psi(t)\rangle \quad (3.32)$$

Per semplicità useremo ora la notazione di Einstein, così che l'equazione appena descritta diventi:

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = i\frac{\mu_b}{\hbar}\hat{\sigma}_k B_k |\psi(t)\rangle \quad (3.33)$$

Moltiplichiamo ora per l'operatore di Pauli $\hat{\sigma}_j$ e per $\langle\psi(t)|$ entrambi i membri, così da ottenere che

$$\langle\psi(t)|\hat{\sigma}_j\left(\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}\right) = i\frac{\mu_b}{\hbar}B_k\langle\psi(t)|\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_k|\psi(t)\rangle \quad (3.34)$$

Dalla relazione 1.2 avremo però che $\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_k = \mathbf{e}_j \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{e}_k \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \delta_{ij}\hat{1} + i\epsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l$; inoltre, possiamo vedere che:

$$\frac{d(\langle\psi(t)|\hat{\sigma}_k|\psi(t)\rangle)}{dt} = \langle\psi(t)|\hat{\sigma}_j\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} + \frac{d\langle\psi(t)|}{dt}\hat{\sigma}_j|\psi(t)\rangle \quad (3.35)$$

Allora, aggiungendo all'equazione 3.34 il suo trasposto, otteniamo

$$\begin{aligned} \frac{d(\langle\psi(t)|\hat{\sigma}_j|\psi(t)\rangle)}{dt} &= \frac{\mu_b}{\hbar}B_k\langle\psi(t)|(i\delta_{ij}\hat{1} - \epsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l - i\delta_{ij}\hat{1} - \epsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l)|\psi(t)\rangle = \\ &= -\frac{2\mu_b}{\hbar}B_k\langle\psi(t)|\hat{\sigma}_l|\psi(t)\rangle\epsilon_{jkl} \end{aligned} \quad (3.36)$$

a questo punto moltiplichiamo entrambi i membri per $\frac{\hbar}{2}$ e sostituiamo $\langle\psi(t)|\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i|\psi(t)\rangle = \langle S_i \rangle$ e $\frac{2\mu_b}{\hbar} = \gamma$ così da ottenere infine l'equazione

$$\frac{d\langle S_j \rangle}{dt} = -\gamma\langle S_l \rangle B_k \epsilon_{jkl} \quad (3.37)$$

oppure, in forma vettoriale

$$\frac{d\langle \mathbf{S} \rangle}{dt} = \gamma \langle \mathbf{S} \rangle \times \mathbf{B} \quad (3.38)$$

che è la formulazione vettoriale delle equazioni ottiche di Bloch.

Nella fisica classica un analogo macroscopico di queste equazioni (che valuta la magnetizzazione nucleare) è usato per descrivere la Risonanza Magnetica Nucleare, che noi invece descriveremo tramite la meccanica quantistica come sistema a due livelli.

Si tenga inoltre presente che quanto fornito in precedenza non tiene in considerazione i possibili scambi di energia e impulso che possono avvenire tra il sistema e l'ambiente ed è necessario introdurre degli opportuni termini di rilassamento se intendiamo usare queste equazioni per studiare fenomeni reali.

Capitolo 4

Esempi di Sistemi a 2 Stati nel Caso Dinamico

4.1 Risonanza Magnetica Nucleare

La risonanza magnetica nucleare è un fenomeno che avviene quando i nuclei di alcuni atomi immersi in un campo magnetico costante \mathbf{B}_0 sono esposti successivamente ad un campo magnetico \mathbf{B}_1 di frequenza ω_f per un certo intervallo temporale Δt ; se consideriamo i nuclei come allineati al campo magnetico \mathbf{B}_0 all'inizio osserveremo che una frazione P di essi sarà anti-allineata verso la fine.

Consideriamo il caso in cui i nuclei siano particelle con spin $s = \frac{1}{2}$, così che si possa usare quanto introdotto nella sezione 3.2 e considerare il sistema come un sistema a due livelli; in tal caso avremo Hamiltoniano dato come 3.30, mentre il momento di dipolo seguirà una convenzione lievemente differente dalla 3.31 e sarà infatti scritto come

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = 2\gamma\hat{\mathbf{S}} = \hbar\gamma\hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (4.1)$$

dove si noti che γ non è analogo a quanto era stato fornito per l'equazione 3.31 ed è in questo caso una costante nucleare.

Consideriamo ora il campo magnetico totale che agisce sul sistema, che sarà dato come $\mathbf{B}(t) = \mathbf{B}_1(t) + \mathbf{B}_0$; presa una base ortonormale orientata \mathbf{e}_i con operatori di Pauli rappresentati dall'espansione delle matrici 1.15 e scritti esplicitamente nelle relazioni 1.26 possiamo scrivere il campo magnetico totale come [6]:

$$\mathbf{B}(t) = B_1(\cos(\omega_f t)\mathbf{e}_1 + \sin(\omega_f t)\mathbf{e}_2) + B_0\mathbf{e}_3 \quad (4.2)$$

Avremo allora un Hamiltoniano della forma

$$\hat{H}(t) = -\hbar(\omega_1(\cos(\omega_f t)\hat{\sigma}_1 + \sin(\omega_f t)\hat{\sigma}_2) + \omega_0\hat{\sigma}_3) \quad (4.3)$$

dove $\omega_1 = \gamma B_1$ e $\omega_0 = \gamma B_0$.

Scritto questo hamiltoniano capiamo però che vi è un problema non da poco: l'operatore evoluzione di un Hamiltoniano scritto in questo modo non è semplice da dedurre e non vale la formula per l'evoluzione temporale di un generico $|\psi\rangle$ data nella 3.11; possiamo provare però a cambiare la rappresentazione in uso.

Sia allora l'operatore

$$\widehat{K}(t) = \frac{\hbar\omega_f}{2}\widehat{\sigma}_3 \quad (4.4)$$

a cui sarà allora collegato un operatore unitario \widehat{T} , il quale segue le equazioni 3.3 (dove $\widehat{T}(t, s)$ prende il posto di $\widehat{U}(t, s)$ e $\widehat{K}(t)$ al posto di $\widehat{H}(t)$); essendo \widehat{K} un operatore indipendente dal tempo, l'operatore $\widehat{T}(t, s)$ può essere scritto secondo 3.5, ovvero:

$$\widehat{T}(t, s) = e^{-\frac{i\omega_f(t-s)}{2}\widehat{\sigma}_3} \quad (4.5)$$

Preso uno stato $|\psi(t)\rangle$ esso cambierà in questa rappresentazione come $|\psi(t)\rangle_N = \widehat{T}(t, 0)^{-1}|\psi(t)\rangle = e^{\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_3}|\psi(t)\rangle$, mentre l'Hamiltoniano cambierà come

$$\widehat{H}^N(t) = \widehat{T}(t, 0)^\dagger(\widehat{H}(t) - \widehat{K}(t))\widehat{T}(t, 0) \quad (4.6)$$

Per semplicità sarà conveniente scrivere tutto usando una base orientata sferica \mathbf{e}_α con operatori di Pauli dati come espansioni delle matrici 1.17, dove allora avremo dalle formule 1.18 per passare dalla base \mathbf{e}_i alla base \mathbf{e}_α .

Scriviamo ora:

$$\widehat{H}(t) - \widehat{K} = -\frac{\hbar\omega_1}{2}(e^{-i\omega_f t}\widehat{\sigma}_{+1} + e^{i\omega_f t}\widehat{\sigma}_{-1}) - \hbar\left(\omega_0 + \frac{\omega_f}{2}\right)\widehat{\sigma}_0 \quad (4.7)$$

per cui ora applichiamo la formula 4.6 ottenendo

$$\begin{aligned} \widehat{H}^N(t) &= -\hbar e^{\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} \left(\frac{\omega_1}{2}(e^{-i\omega_f t}\widehat{\sigma}_{+1} + e^{i\omega_f t}\widehat{\sigma}_{-1}) + \left(\omega_0 + \frac{\omega_f}{2}\right)\widehat{\sigma}_0 \right) e^{-\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} = \\ &= -\hbar \left(\frac{\omega_1}{2}(e^{-i\omega_f t}\widehat{\sigma}_{+1}(t) + e^{i\omega_f t}\widehat{\sigma}_{-1}(t)) + \left(\omega_0 + \frac{\omega_f}{2}\right)\widehat{\sigma}_0 \right) \end{aligned} \quad (4.8)$$

dove si è definito $\widehat{\sigma}_{\pm 1}(t) = e^{\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0}\widehat{\sigma}_{\pm 1}e^{-\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0}$; questi operatori possono essere descritti esplicitamente derivandoli rispetto al tempo, con

$$\begin{aligned} \frac{d\widehat{\sigma}_{\pm 1}(t)}{dt} &= e^{\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} \left(\frac{i\omega_f}{2} \right) \widehat{\sigma}_0 \widehat{\sigma}_{\pm 1} e^{-\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} + e^{\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} \widehat{\sigma}_{\pm 1} \widehat{\sigma}_0 \left(-\frac{i\omega_f}{2} \right) e^{-\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} = \\ &= e^{\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} \left(\frac{i\omega_f}{2} \right) (\widehat{\sigma}_0 \widehat{\sigma}_{\pm 1} - \widehat{\sigma}_{\pm 1} \widehat{\sigma}_0) e^{-\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} = \\ &= \frac{i\omega_f}{2} e^{\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} [\widehat{\sigma}_0, \widehat{\sigma}_{\pm 1}] e^{-\frac{i\omega_f t}{2}\widehat{\sigma}_0} = \\ &= \pm i\omega_f \widehat{\sigma}_{\pm 1}(t) \end{aligned} \quad (4.9)$$

dove l'ultima uguaglianza deriva dalle relazioni di commutazione per gli operatori di Pauli per basi ortonormali sferiche (quindi si prendono 1.16 e 1.4).

Quanto abbiamo appena visto ci consente di vedere che

$$\hat{\sigma}_{\pm 1}(t) = e^{\pm i\omega_f t} \hat{\sigma}_{\pm 1} \quad (4.10)$$

che possiamo inserire in 4.8 così da ottenere infine, riportando nella base ortonormale orientata che

$$\hat{H}^N(t) = -\hbar(\omega_1 \hat{\sigma}_1 + \left(\omega_0 + \frac{\omega_f}{2}\right) \hat{\sigma}_3) \quad (4.11)$$

che è indipendente dal tempo.

A questo punto ci conviene portare l'Hamiltoniano così ottenuto in una forma simile a quella data per 3.6 nel caso in cui $h_m = 0$; ciò è immediato e otteniamo di conseguenza la frequenza ed il vettore unitario

$$\begin{aligned} \omega &= \sqrt{\omega_1^2 + \left(\omega_0 + \frac{\omega_f}{2}\right)^2} \\ \mathbf{n} &= \frac{\omega_1 \mathbf{e}_1 + \left(\omega_0 + \frac{\omega_f}{2}\right) \mathbf{e}_3}{\omega} \end{aligned} \quad (4.12)$$

A questo punto supponiamo che il sistema sia preparato inizialmente nello stato $|\psi_0\rangle = |0, +1\rangle$ (che rappresenta i nuclei allineati col campo magnetico \mathbf{B}_0); la probabilità che al tempo t il sistema si trovi nello stato $|0, -1\rangle$ anti-allineato rispetto al campo magnetico \mathbf{B}_0 sarà data dalla 3.12; si noti che, essendo gli stati $|\psi(t)\rangle$ e $|\psi(t)\rangle_N$ diversi solo per un fattore di fase, avremo che

$$P_{flip}(t) = |\langle 0, -1 | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle 0, -1 | \psi(t) \rangle_N|^2 \quad (4.13)$$

Visto che $n_1^2 + n_2^2 = 1 - n_3^2 = |\mathbf{n} \times \mathbf{e}_3|^2$ potremo però scrivere anche che

$$P_{flip}(t) = \omega_1^2 \left(\omega_1^2 + \left(\omega_0 + \frac{\omega_f}{2}\right)^2 \right)^{-1} \sin^2 \left(t \sqrt{\omega_1^2 + \left(\omega_0 + \frac{\omega_f}{2}\right)^2} \right) \quad (4.14)$$

dove si può vedere che il massimo si ha quando l'argomento del seno è uguale a $\frac{\pi}{2} + n\pi$ (con n intero), ovvero quando

$$\left(\omega_1^2 + \left(\omega_0 + \frac{\omega_f}{2}\right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \Delta t = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \quad (4.15)$$

Una volta che si ha risolto questa equazione si ottiene la frequenza di risonanza del sistema.

Si noti che la soluzione di questo sistema avrà vettore di Bloch che precede attorno ad \mathbf{n} (ottenuto nella seconda delle relazioni 4.12) con una frequenza pari al doppio del suo modulo, che è dato da ω (ottenuto nella prima delle relazioni 4.12).

4.1.1 Applicazioni della Risonanza Magnetica Nucleare

La precessione dello spin dei nuclei dotati di momenti magnetico durante questo effetto consente l'osservazione di tessuti e materiali grazie alla radiazione di risposta che essi emettono; si noti però che le tecniche di indagine che si basano su questo fenomeno non analizzano i singoli nuclei, ma si limitano invece ad osservare statisticamente l'effetto complessivo di una popolazione di nuclei sotto esame.

Possiamo definire un vettore magnetizzazione $\mathbf{M} = \frac{\sum_i \mu_i}{V}$, somma di tutti i momenti magnetici dei nuclei, il quale rappresenterà l'orientazione complessiva degli spin.

All'inizio, siamo in presenza di un solo campo magnetico \mathbf{B}_0 (che chiameremo ora "campo di polarizzazione") e avremo quindi che la maggior parte dei nuclei si troveranno allineati con esso.

L'introduzione di un campo variabile nel tempo \mathbf{B}_1 (che chiameremo ora "campo di eccitazione") perpendicolare al campo \mathbf{B}_0 per un tempo e con una frequenza opportuni può portare a far cambiare direzione al vettore di magnetizzazione; quando il campo di eccitazione sarà rimosso, il sistema ricomincerà a riallinearsi con il campo di polarizzazione ed emetterà nel processo l'energia che aveva assorbito in precedenza sotto forma di fotoni, che forniranno informazioni sulla materia da cui provengono.

L'evoluzione temporale del vettore di magnetizzazione, che dipende dallo spin, sarà descritta dalle equazioni di Bloch, già fornite nell'equazione 3.38, con l'aggiunta degli opportuni termini di rilassamento di cui si è già accennato in precedenza.

La risonanza magnetica nucleare vede molti usi in diversi settori, come in campo medico, dove l'**imaging a risonanza magnetica** è una tecnica diagnostica che consente di osservare i tessuti molli e di distinguerli tra loro, utile per la rilevazione di malattie come il cancro [3][7], la quale non costituisce alcun rischio per la salute del paziente; in questo particolare caso, si eccitano gli atomi di idrogeno delle molecole di acqua nei tessuti del paziente [11].

In campo chimico, dove la spettroscopia di risonanza magnetica nucleare è usata per comprendere la struttura di una molecola o i campi magnetici locali attorno ad un atomo; quando piazzati in un campo magnetico, alcuni nuclei assorbono la radiazione elettromagnetica alla frequenza caratteristica dell'isotopo in esame[7].

Visto che la maggioranza delle molecole usate in una soluzione sono solventi idrocarburi essi hanno idrogeni, che appartengono ai nuclei appena detti che assorbono radiazione elettromagnetica; per questo motivo, si usano come solventi molecole dove l'idrogeno è stato quasi totalmente rimpiazzato con del deuterio.

4.2 Atomo Alcalino Immerso in un Campo Elettromagnetico Laser

Consideriamo ora il caso di un atomo alcalino, ovvero un atomo con un solo elettrone sulla shell più esterna, immerso in un campo elettromagnetico Laser; come già detto nella sezione 2.2 solo l'elettrone più esterno sarà influenzato.

Un campo elettrico laser sarà monocromatico e armonico, generalmente della forma

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega_f t} + \mathbf{E}_0^* e^{i\omega_f t} \quad (4.16)$$

Sia allora l'hamiltoniano imperturbato \widehat{H}_0 con autostati $|0, \pm 1\rangle$ a cui corrispondono i due autovalori $h_{0, \pm 1}$ (con $h_{0, +1} > h_{0, -1}$, così che lo stato $|0, -1\rangle$ sia lo stato fondamentale e lo stato $|0, +1\rangle$ sia il primo stato eccitato).

In questa situazione, consideriamo la perturbazione dipendente dal tempo in modo simile a 2.7

$$\widehat{W}(t) = -e\mathbf{E}(t) \cdot \widehat{\mathbf{q}} \quad (4.17)$$

Possiamo ora riesprimere questa perturbazione in maniera analoga a quanto fatto nella sezione 2.2, poiché i calcoli si mantengono totalmente analoghi che il campo elettrico sia statico o dipendente dal tempo come nella relazione 4.16; riscriviamo la perturbazione allora come nell'equazione 2.22 con momento di dipolo di transizione dato dalla relazione 2.21.

A questo punto, definiamo le **Frequenze di Rabi** come le frequenze di fluttuazioni nelle transizioni tra due livelli energetici e saranno scritte come:

$$\begin{aligned} \Omega &= \frac{\mathbf{d}^* \cdot \mathbf{E}_0}{\hbar} \\ \tilde{\Omega} &= \frac{\mathbf{d}^* \cdot \mathbf{E}_0^*}{\hbar} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Con le quali è possibile riscrivere $\widehat{W}(t)$ come

$$\widehat{W}(t) = \frac{\hbar}{2} ((\Omega e^{-i\omega_f t} + \tilde{\Omega} e^{i\omega_f t}) \widehat{\sigma}_{+1}) + (\tilde{\Omega}^* e^{-i\omega_f t} + \Omega^* e^{i\omega_f t}) \widehat{\sigma}_{-1} \quad (4.19)$$

A questo punto però sorge spontaneo un problema: l'hamiltoniano del sistema perturbato $\widehat{H}(t) = \widehat{H}_0 + \widehat{W}(t)$ è dipendente dal tempo, e dunque non possiamo utilizzare le equazioni fornite in precedenza per l'evoluzione temporale di un sistema a due livelli.

Se l'Hamiltoniano per l'atomo alcalino imperturbato è dato come

$$\widehat{H}_0 = h_{0m} \widehat{1} + \frac{\hbar \Delta\omega_0}{2} \widehat{\sigma}_0 \quad (4.20)$$

dove $\Delta\omega_0 = \frac{\Delta h_0}{\hbar}$, possiamo cambiare rappresentazione e utilizzare la **Rappresentazione di Dirac**; sia un operatore unitario $\widehat{T}(t, s)$ del tipo descritto nella sezione 4.1; poniamo

quindi un operatore $\widehat{K}(t) = \widehat{H}_0$ di cui \widehat{T} è l'operatore di evoluzione temporale, allora avremo:

$$\widehat{T}(t, 0) = \widehat{U}_0(t, 0) = e^{-i\hbar^{-1}t\hbar_0\widehat{1} - \frac{i\Delta\omega_0 t}{2}\widehat{\sigma}_0} \quad (4.21)$$

Riprendendo l'equazione 4.6, possiamo vedere che $\widehat{H}^D(t) = \widehat{U}_0(t, 0)^\dagger \widehat{W}(t) \widehat{U}_0(t, 0) = \widehat{W}^D(t)$, dove questo è uguale a

$$\widehat{W}^D(t) = \frac{\hbar}{2}((\Omega e^{-i\omega_f t} + \tilde{\Omega} e^{i\omega_f t})\widehat{\sigma}_{+1}(t)) + (\tilde{\Omega}^* e^{-i\omega_f t} + \Omega^* e^{i\omega_f t})\widehat{\sigma}_{-1}(t) \quad (4.22)$$

con $\widehat{\sigma}_{\pm 1}(t) = \widehat{U}_0(t, 0)^\dagger \widehat{\sigma}_{\pm 1} \widehat{U}_0(t, 0)$, che può essere risolto con gli stessi conti di 4.9 ottenendo una soluzione simile a 4.10 (ovvero $\widehat{\sigma}_{\pm 1}(t) = e^{i\Delta\omega_0 t} \widehat{\sigma}_{\pm 1}$); allora avremo infine che

$$\widehat{H}^D(t) = \frac{\hbar}{2}((\Omega e^{i(\Delta\omega_0 - \omega_f)t} + \tilde{\Omega} e^{i(\Delta\omega_0 + \omega_f)t})\widehat{\sigma}_{+1}) + (\tilde{\Omega}^* e^{-i(\Delta\omega_0 + \omega_f)t} + \Omega^* e^{-i(\Delta\omega_0 - \omega_f)t})\widehat{\sigma}_{-1} \quad (4.23)$$

A questo punto, consideriamo il caso in cui valga

$$|\Delta\omega_0 - \omega_f| \ll \Delta\omega_0, \omega_f \quad (4.24)$$

ovvero il caso in cui l'esponenziale $e^{i(\Delta\omega_0 + \omega_f)t}$ vari molto più rapidamente nel tempo dell'esponenziale $e^{i(\Delta\omega_0 - \omega_f)t}$; a causa dell'inerzia pregressa dell'atomo, esso non sarà in grado di rispondere ad un campo che vari troppo velocemente e potremo quindi trascurare i termini $e^{i(\Delta\omega_0 + \omega_f)t}$, riducendo l'equazione 4.23 come segue

$$\widehat{H}^D(t) = \frac{\hbar}{2}(\Omega e^{i(\Delta\omega_0 - \omega_f)t}\widehat{\sigma}_{+1} + \Omega^* e^{-i(\Delta\omega_0 - \omega_f)t}\widehat{\sigma}_{-1}) \quad (4.25)$$

dove questa situazione è detta **Approssimazione di Onda Rotante**.

L'equazione di Schroedinger può ora essere scritta come

$$\frac{d|\psi(t)\rangle_D}{dt} = -\frac{i}{2}(\Omega e^{i(\Delta\omega_0 - \omega_f)t}\widehat{\sigma}_{+1}) + \Omega^* e^{-i(\Delta\omega_0 - \omega_f)t}\widehat{\sigma}_{-1})|\psi(t)\rangle_D \quad (4.26)$$

e può essere risolta ponendo

$$|\psi(t)\rangle_D = e^{i\frac{(\Delta\omega_0 - \omega_f)t}{2}\widehat{\sigma}_0}|\phi(t)\rangle \quad (4.27)$$

che possiamo derivare rispetto al tempo ottenendo

$$\frac{d|\psi(t)\rangle_D}{dt} = e^{i\frac{(\Delta\omega_0 - \omega_f)t}{2}\widehat{\sigma}_0} \left(i\frac{\Delta\omega_0 - \omega_f}{2}\widehat{\sigma}_0|\phi(t)\rangle + \frac{d|\phi(t)\rangle}{dt} \right) \quad (4.28)$$

che è però uguale al secondo membro dell'equazione di Schroedinger

$$\begin{aligned}
& -\frac{i}{2}e^{i\frac{(\Delta\omega_0-\omega_f)t}{2}}\hat{\sigma}_0 e^{-i\frac{(\Delta\omega_0-\omega_f)t}{2}}\hat{\sigma}_0 (\Omega e^{i(\Delta\omega_0-\omega_f)t}\hat{\sigma}_{+1} + \\
& + \Omega^* e^{-i(\Delta\omega_0-\omega_f)t}\hat{\sigma}_{-1}) e^{+i\frac{(\Delta\omega_0-\omega_f)t}{2}}\hat{\sigma}_0 |\phi(t)\rangle = \\
& = -\frac{i}{2}e^{i\frac{(\Delta\omega_0-\omega_f)t}{2}}\hat{\sigma}_0 (\Omega e^{i(\Delta\omega_0-\omega_f)t}\hat{\sigma}_{+1}(t) + \Omega^* e^{-i(\Delta\omega_0-\omega_f)t}\hat{\sigma}_{-1}(t)) |\phi(t)\rangle
\end{aligned} \tag{4.29}$$

dove abbiamo moltiplicato per l'operatore identità in modo da poter scrivere di nuovo $\hat{\sigma}_{\pm 1}(t) = e^{-i\frac{(\Delta\omega_0-\omega_f)t}{2}}\hat{\sigma}_0\hat{\sigma}_{\pm 1}e^{i\frac{(\Delta\omega_0-\omega_f)t}{2}}\hat{\sigma}_0$, che si risolve come

$$\hat{\sigma}_{\pm 1} = e^{\mp i(\Delta\omega_0-\omega_f)t}\hat{\sigma}_{\pm 1} \tag{4.30}$$

che sostituiamo nel termine 4.29 per poi eguagliarlo a 4.28, ottenendo infine:

$$\frac{d|\phi(t)\rangle}{dt} = -\frac{i}{2}((\Delta\omega_0 - \omega_f)\hat{\sigma}_0 + \Omega\hat{\sigma}_{+1} + \Omega^*\hat{\sigma}_{-1})|\phi(t)\rangle \tag{4.31}$$

che è un'equazione di Schroedinger del tipo 3.9, dove avremo che

$$\begin{aligned}
\omega &= \sqrt{|\Omega|^2 + \left(\frac{\Delta\omega_0 - \omega_f}{2}\right)^2} \\
\mathbf{n} &= -\frac{1}{2\omega}((\Delta\omega_0 - \omega_f)\mathbf{e}_0 + \Omega\mathbf{e}_{+1} + \Omega^*\mathbf{e}_{-1})
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Analogamente a quanto fatto nel caso della risonanza magnetica, essendo gli stati $|\psi(t)\rangle_D$ e $|\psi(t)\rangle$ diversi solo per un fattore di fase, la probabilità che, dato uno stato iniziale $|\psi_0\rangle = |0, -1\rangle$, il sistema si trovi dopo un certo tempo t nello stato $|0, +1\rangle$ sarà data da

$$P_{flip}(t) = |\langle 0, +1|\psi(t)\rangle_D|^2 = |\langle 0, +1|\phi(t)\rangle|^2 \tag{4.33}$$

risolvendo il prodotto vettoriale dalle relazioni 3.12 usando le relazioni 1.16 otteniamo

$$P_{flip}(t) = |i\Omega\mathbf{e}_{+1} - i\Omega^*\mathbf{e}_{-1}|^2 \sin^2(\omega t) = 4\Omega^*\Omega \sin^2(\omega t) = 4|\Omega|^2 \sin^2(\omega t) \tag{4.34}$$

Capitolo 5

Perturbazioni Dipendenti dal Tempo per i Sistemi a due Stati

5.1 Generalità di un Sistema a due Stati Perturbato

[6] Consideriamo un sistema a due livelli, dove abbiamo due stati $|0, \pm 1\rangle$ autostati energetici dell'Hamiltoniano imperturbato \widehat{H}_0 con autovalori $h_{0,\pm 1}$ tali che $h_{0,+1} > h_{0,-1}$; consideriamo ora un generico stato

$$|\psi_0\rangle = |0, +1\rangle c_+ + |0, -1\rangle c_- \quad (5.1)$$

dove i coefficienti c_+ e c_- sono coefficienti di normalizzazione tali che $|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$. Dall'equazione 3.5 unita al teorema spettrale, possiamo vedere che l'evoluzione temporale dello stato $|\psi_0\rangle$ sarà

$$|\psi(t)\rangle = |0, +1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,+1}t} c_+(t) + |0, -1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,-1}t} c_-(t) \quad (5.2)$$

Consideriamo ora una perturbazione $\widehat{W}(t)$ del sistema, tale che l'hamiltoniano del sistema $\widehat{H}(t) = \widehat{H}_0 + \widehat{W}(t)$; calcoliamo allora come vengono entrambi i membri dell'equazione di Schroedinger:

$$\begin{aligned} & i\hbar(|0, +1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,+1}t} \frac{dc_+(t)}{dt} + |0, -1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,-1}t} \frac{dc_-(t)}{dt}) + \\ & + |0, +1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,+1}t} \left(-\frac{i\hbar_{0,+1}}{\hbar}\right) c_+(t) + |0, -1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,-1}t} \left(-\frac{i\hbar_{0,-1}}{\hbar}\right) c_-(t) = \quad (5.3) \\ & = (\widehat{H}_0 + \widehat{W}(t))(|0, +1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,+1}t} c_+(t) + |0, -1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,-1}t} c_-(t)) \end{aligned}$$

A questo punto, moltiplicando per $\langle 0, +1|$ entrambi i membri possiamo semplificare entrambi i membri e ottenere

$$c_+ \langle 0, +1| \widehat{W}(t) |0, +1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,+1}t} + c_- \langle 0, +1| \widehat{W}(t) |0, -1\rangle e^{-i\hbar^{-1}h_{0,-1}t} = i\hbar \frac{dc_+(t)}{dt} e^{-i\hbar^{-1}h_{0,+1}t} \quad (5.4)$$

e analogamente si può fare moltiplicando per $\langle 0, -1|$.

Otterremo allora due equazioni per i coefficienti dipendenti dagli elementi di matrice della perturbazione $\widehat{W}(t)$ che saranno

$$\begin{aligned}\frac{dc_+}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left(c_+ W_{++} + c_- W_{+-} e^{i\hbar^{-1}(h_{0,+1}-h_{0,-1})t} \right) \\ \frac{dc_-}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \left(c_- W_{--} + c_+ W_{-+} e^{-i\hbar^{-1}(h_{0,+1}-h_{0,-1})t} \right)\end{aligned}\quad (5.5)$$

dove in molte situazioni nei sistemi a due stati gli elementi di matrice $W_{--} = W_{++} = 0$, e allora le equazioni si semplificano e, posto $\omega_0 = (h_{0,+1} - h_{0,-1})/\hbar$ diventano

$$\begin{aligned}\frac{dc_+}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} (c_- W_{+-} e^{i\omega_0 t}) \\ \frac{dc_-}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} (c_+ W_{-+} e^{-i\omega_0 t})\end{aligned}\quad (5.6)$$

A questo punto potremmo iniziare a risolvere queste equazioni con diverse approssimazioni, che porterebbero a quanto sarà tra poco ottenuto con una trattazione più generale.

5.2 Teoria delle Perturbazioni Dipendente dal Tempo per Perturbazioni Impulsive

Se la perturbazione $\widehat{W}(t)$ dovesse essere impulsiva, ovvero nel caso in cui essa tenda ad annullarsi all'infinito temporale (cioè per $s \rightarrow -\infty$ e $t \rightarrow +\infty$), possiamo espandere $\widehat{W}(t)$ come integrale di Fourier

$$\widehat{W}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \widehat{W}^\sim \quad (5.7)$$

dove abbiamo il profilo di Fourier

$$\widehat{W}^\sim(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \widehat{W}(t) \quad (5.8)$$

Allora, riprendendo l'equazione A.7, è possibile vedere che

$$\begin{aligned}\langle n' | \widehat{U}^D(t, s) | n \rangle &\simeq -i\hbar^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega(n', n)u} \langle n' | \widehat{W}(u) | n \rangle = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle n' | \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{i\omega(n', n)u} \widehat{W}(u) | n \rangle\end{aligned}\quad (5.9)$$

da cui allora avremo

$$P(n \rightarrow n'; -\infty, +\infty) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle n' | \widehat{W}^\sim | n \rangle|^2 \quad (5.10)$$

Sia ora un sistema a due stati, dove abbiamo Hamiltoniano imperturbato dato come

$$\widehat{H}_0 = h_{0m} \widehat{1} + \frac{\Delta h_0}{2} \widehat{\sigma}_0 \quad (5.11)$$

con $h_{0,\pm 1}$ autovalori energetici di stati $|0, \pm 1\rangle = |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle$ (dove \mathbf{e}_0 è uno dei vettori di una base orientata sferica \mathbf{e}_α) tali che $h_{0,+1} > h_{0,-1}$ e che $h_{0m} = (h_{0,+1} + h_{0,-1})/2$ e $\Delta h_0 = h_{0,+1} - h_{0,-1}$.

Sia la perturbazione $\widehat{W}(t)$ che potrà essere scritta come da 1.1

$$\widehat{W}(t) = w_m \widehat{1} + \mathbf{w}(t) \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (5.12)$$

dove si ha che $w(t)$ e $\mathbf{w}(t)$ sono funzioni dipendenti da t impulsive; possiamo allora applicare quanto descritto in 5.10 per ottenere la probabilità di transizione tra i due stati possibili del sistema, dove però avremo che

$$\langle 0, +1 | \widehat{W}(t) | 0, -1 \rangle = (w_m \langle 0, -1 | 0, +1 \rangle + \langle 0, +1 | \mathbf{w}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma} | 0, -1 \rangle) \quad (5.13)$$

che si risolve in maniera simile a quanto fatto per 3.14, ottenendo quindi che

$$\langle 0, +1 | \widehat{W}(t) | 0, -1 \rangle = w_{-1}(t) \quad (5.14)$$

Allora possiamo ora vedere che

$$\langle 0, +1 | \widehat{W}^\sim(t) | 0, -1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega(n',n)t} w_{-1}(t) = \widetilde{w}_{-1}(\omega(n',n)) \quad (5.15)$$

ottenendo dunque che la probabilità che avvenga una tale transizione sarà

$$P(-1 \rightarrow +1; -\infty, +\infty) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \widetilde{w}_{-1} \left(\frac{\Delta h_0}{\hbar} \right) \right|^2 \quad (5.16)$$

dove $\omega(n',n) = \frac{\Delta h_0}{\hbar}$.

5.3 Atomo Alcalino Sfiato Da uno Ione

Riprendiamo nuovamente un atomo alcalino nel proprio stato fondamentale $|0, -1\rangle$, che interagisce con uno ione con carica $Z_i e^2$ di passaggio con velocità di movimento \mathbf{v} .

Definiremo \mathbf{b} come vettore d'impatto, ortogonale a \mathbf{v} , e \mathbf{x} come vettore posizione dell'elettrone ottico, allora la perturbazione sarà data come

$$W(t, \mathbf{x}) = -\frac{Z_i e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{b} - \mathbf{v}t|} \quad (5.17)$$

Assumendo che la distanza tra lo ione e l'atomo alcalino sia molto maggiore della distanza tra l'atomo alcalino e il proprio elettrone ottico (che avrà una distanza $|\mathbf{x}| \sim a_B$), ovvero assumendo che $b \gg a_B$, potremo sviluppare $W(t, \mathbf{x})$ in serie di Taylor rispetto a \mathbf{x} e ottenere un operatore

$$W(t, \hat{\mathbf{q}}) \simeq -\frac{Z_i e^2}{|\mathbf{b} + \mathbf{v}t|} \hat{1} - \frac{Z_i e^2 (\mathbf{b} + \mathbf{v}t)}{|\mathbf{b} + \mathbf{v}t|^3} \cdot \hat{\mathbf{q}} \quad (5.18)$$

Adesso, come fatto per la sezione 2.2, possiamo vedere il momento di dipolo di transizione 2.21 e, posto il campo elettrico $\mathbf{E}(t) = \frac{Z_i e (\mathbf{b} + \mathbf{v}t)}{|\mathbf{b} + \mathbf{v}t|^3}$ possiamo riscrivere $\widehat{W}(t, \mathbf{x})$ come

$$W(t, \hat{\mathbf{q}}) \simeq \frac{1}{2} \mathbf{d}^* \cdot \mathbf{E}(t) \hat{\sigma}_{+1} + \frac{1}{2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(t) \hat{\sigma}_{-1} - \frac{Z_i e^2}{|\mathbf{b} + \mathbf{v}t|} \hat{1} \quad (5.19)$$

dove abbiamo $w_{-1} = \frac{1}{2} \mathbf{d}^* \cdot \mathbf{E}(t) = \frac{Z_i e}{2} \mathbf{d}^* \cdot \frac{\mathbf{b} + \mathbf{v}t}{|\mathbf{b} + \mathbf{v}t|^3}$.

Rifacendoci all'equazione 5.15 vediamo che

$$\begin{aligned} w_{-1}^{\sim}(\omega(+1, -1)) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega(+1, -1)t} \frac{Z_i e}{2} \mathbf{d}^* \cdot \frac{\mathbf{b} + \mathbf{v}t}{|\mathbf{b} + \mathbf{v}t|^3} = \\ &= \frac{Z_i e}{2bv} \mathbf{d}^* \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i\omega(+1, -1)\frac{bx}{v}} \frac{\mathbf{b}_1 + \mathbf{v}_1 x}{(1+x^2)^{3/2}} \end{aligned} \quad (5.20)$$

nella quale abbiamo posto $x = vt/b$.

L'integrale così ottenuto ha come soluzioni le **funzioni di Bessel modificate** del secondo tipo, infatti

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iax}}{(1+x^2)^{3/2}} &= 2|a|K_1(|a|) \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x e^{iax}}{(1+x^2)^{3/2}} &= 2iaK_0(|a|) \end{aligned} \quad (5.21)$$

e allora otteniamo

$$\begin{aligned} w_{-1}^{\sim}(\omega(+1, -1)) &= \frac{Z_i e}{v^2} \mathbf{d}^* \cdot \omega(+1, -1) \left(\text{sgn } \omega(+1, -1) K_1 \left(\frac{|\omega(+1, -1)b|}{v} \right) \mathbf{b}_1 + \right. \\ &\quad \left. + iK_0 \left(\frac{|\omega(+1, -1)b|}{v} \right) \mathbf{v}_1 \right) \end{aligned} \quad (5.22)$$

e, rifacendoci a 5.16, troviamo una soluzione del tipo

$$P(-1 \rightarrow +1; -\infty \rightarrow +\infty) = \left(\frac{Z_i e}{\hbar v^2} \omega(+1, -1) \right)^2 \left| \mathbf{d}^* \cdot \left(\operatorname{sgn} \omega(+1, -1) K_1 \left(\frac{|\omega(+1, -1) b|}{v} \right) \mathbf{b}_1 + i K_0 \left(\frac{|\omega(+1, -1) b|}{v} \right) \mathbf{v}_1 \right) \right|^2 \quad (5.23)$$

Per semplificare il problema ulteriormente, consideriamo ora due grandezze, che sono il **tempo efficace di collisione** $t_c = b/v$ e il **periodo di Bohr** $\tau(+1, -1) = 2\pi\hbar/\Delta h_0$; il primo tempo rappresenta la durata dell'interazione tra ione e atomo alcalino, mentre il secondo rappresenta il tempo necessario affinché un elettrone compia un'orbita attorno al nucleo nel modello semiclassico di Bohr.

Posto il parametro adimensionale $z = 2\pi t_c/\tau(+1, -1)$ possiamo definire **regime istantaneo** il caso in cui $z \ll 1$, dove il tempo di interazione è molto più grande del tempo richiesto ad un elettrone per completare un moto attorno al nucleo, mentre per $z \gg 1$ possiamo definire il **regime adiabatico** come il regime nel quale l'elettrone riesce a completare durante questo tempo molti giri.

Questi regimi modificano enormemente le funzioni di Bessel modificate e con esse anche la probabilità che avvenga una transizione; nel caso in cui siamo nel regime istantaneo avremo che

$$\begin{aligned} K_0(z) &= -\log(z/2) + o(1) \\ K_1(z) &= 1/z + o(z \log z) \end{aligned} \quad (5.24)$$

mentre nel regime adiabatico avremo

$$\begin{aligned} K_0(z) &= \left(\frac{\pi}{2z} \right)^{1/2} e^{-z} (1 + o(1/z)) \\ K_1(z) &= \left(\frac{\pi}{2z} \right)^{1/2} e^{-z} (1 + o(1/z)) \end{aligned} \quad (5.25)$$

semplificando enormemente il problema descritto fino ad ora.

Capitolo 6

Breve Trattazione sulla Sfera di Bloch

6.1 Sfera di Bloch

Come abbiamo già accennato in 3.2, la Sfera di Bloch è una rappresentazione geometrica degli stati puri di un sistema a 2 livelli che prende il nome dal suo omonimo scopritore Felix Bloch [2].

Abbiamo già visto dalla relazione 1.26 che è possibile rappresentare ogni stato $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$ come un'opportuna combinazione lineare di due stati $|\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle$ in quanto è possibile vedere \mathbf{n} come una opportuna rotazione del vettore \mathbf{e}_0 tramite due angoli θ e ϕ ; avevamo inoltre visto dalla relazione 3.24 come si definisce un vettore di Bloch, ovvero un vettore di dimensione unitaria espresso in coordinate sferiche come rotazione del vettore \mathbf{e}_0 tramite l'operatore di rotazione 1.20.

Fino ad ora abbiamo descritto sistemi isolati, descrivibili attraverso stati puri (ovvero il caso ensemble dove tutti gli oggetti del sistema sono rappresentati dallo stesso stato), ma grazie alla sfera di Bloch è perfettamente possibile descrivere anche stati misti; dobbiamo però prima introdurre il concetto di operatore di densità.

Sia una base sferica orientata \mathbf{e}_α e sia una coppia di stati $|0, \pm 1\rangle = |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle$; sia poi una loro combinazione lineare $|\psi\rangle = c_+|0, +1\rangle + c_-|0, -1\rangle$, dove avremo che c_+ e c_- sono due numeri complesso tali che

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1 \quad (6.1)$$

e consideriamo l'operatore dato dall'equazione

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (6.2)$$

che rappresenta l'operatore densità per uno stato puro, citato da Neumann per la prima

volta nel 1927[10] e dotato delle seguenti proprietà:

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}^2 &= \hat{\rho} \\
\hat{\rho}^\dagger &= \hat{\rho} \\
\sum_n \langle n | \hat{\rho} | n \rangle &= 1 \\
\langle \phi | \hat{\rho} | \phi \rangle &\geq 0
\end{aligned} \tag{6.3}$$

varrà inoltre che il valor medio di un osservabile \hat{A} sarà dato da

$$\langle A \rangle = \sum_n \langle n | \hat{\rho} \hat{A} | n \rangle \tag{6.4}$$

Nel caso di uno stato misto (ovvero il caso dove l'ensemble non ha tutti gli elementi nello stesso stato), l'operatore densità assume la forma di

$$\hat{\rho}_{mix} = \sum_i p_i \rho_i \tag{6.5}$$

dove p_i rappresenta la probabilità che, estratto un elemento dell'ensemble a caso, esso sia nello stato i -esimo $|\psi_i\rangle$ che ha operatore di densità $\hat{\rho}_i$.

Per confrontare col caso di uno stato puro calcoliamo ora

$$\hat{\rho}_{mix}^2 = \sum_i \sum_j p_i p_j |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle \psi_j | = \sum_i \sum_j p_i p_j \delta_{ij} |\psi_i\rangle \langle \psi_j | = \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \tag{6.6}$$

che non è uguale a $\hat{\rho}_{mix}$, e avremo infatti che

$$\sum_j \langle \psi_j | \hat{\rho}_{mix}^2 | \psi_j \rangle = \sum_j \sum_i p_i p_j |\langle \psi_j | \psi_i \rangle|^2 = \sum_i p_i^2 \tag{6.7}$$

che è minore di 1. [1] Riscrivendo l'operatore in questione come da relazione 1.1, vedremo che il vettore \mathbf{n} associato a questo operatore ha modulo $|\mathbf{n}| \leq 1$, ovvero mentre la superficie della sfera di Bloch contiene sulla propria superficie gli stati puri, al suo interno sono contenuti gli stati misti.

Appendice A

Teoria delle Perturbazioni Dipendente dal Tempo

Consideriamo ora una situazione analoga a quella descritta in precedenza, dove abbiamo un Hamiltoniano perturbato

$$\widehat{H}(t) = \widehat{H}_0 + \widehat{W}(t) \quad (\text{A.1})$$

dove \widehat{H}_0 è l'Hamiltoniano imperturbato e $\widehat{W}(t)$ è la perturbazione dipendente dal tempo. Analogamente a quanto fatto nella sezione 4.2, ci mettiamo all'interno della rappresentazione di Heisenberg, dove allora, dalla prima equazione 3.3, possiamo scrivere che

$$i\hbar \frac{\partial \widehat{U}^D(t, s)}{\partial t} = \widehat{W}_D(t) \widehat{U}^D(t, s) \quad (\text{A.2})$$

dove abbiamo che $\widehat{U}^D(t, s) = \widehat{T}(t, 0)^\dagger \widehat{U}(t, s) \widehat{T}(t, 0)$ (con $\widehat{T}(t, s) = \widehat{U}_0(t, s)$).

Ciò può essere unito con la prima proprietà delle 3.4 per ottenere la seguente equazione integrale

$$\widehat{U}^D(t, s) = \widehat{1} - i\hbar^{-1} \int_s^t du \widehat{W}_D(u) \widehat{U}^D(u, s) \quad (\text{A.3})$$

la cui soluzione è data dalla **serie di Dyson**

$$\widehat{U}^D(t, s) = \sum_{k=0}^{+\infty} (-i\hbar^{-1})^k \int_s^t du_1 \int_s^{u_1} du_2 \dots \int_s^{u_{k-1}} du_k \widehat{W}_D(u_1) \widehat{W}_D(u_2) \dots \widehat{W}_D(u_k) \quad (\text{A.4})$$

Che di norma prenderemo solo fino al primo ordine $\widehat{U}^D(t, s) = \widehat{1} - i\hbar^{-1} \int_s^t du_1 \widehat{W}_D(u_1)$, dove però serve che

$$|\hbar^{-1} \int_s^t du w(u)| \ll 1 \quad (\text{A.5})$$

Visto quanto appena detto possiamo prendere una base $|n\rangle$ di autostati dell'Hamiltoniano e calcolare la probabilità che avvenga una transizione a causa della perturbazione

energetica appena descritta, che sarà

$$P(n \rightarrow n'; s, t) = |\langle n' | \widehat{U}^D(t, s) | n \rangle|^2 \quad (\text{A.6})$$

Visto che $\widehat{U}^D(t, s)$ soddisfa la serie di Dyson, possiamo sviluppare in serie anche $\langle n' | \widehat{U}^D(t, s) | n \rangle$, ottenendo al primo ordine, per $n' \neq n$, che

$$\langle n' | \widehat{U}^D(t, s) | n \rangle \simeq -i\hbar^{-1} \int_s^t du e^{i\omega(n', n)u} \langle n' | \widehat{W}(u) | n \rangle \quad (\text{A.7})$$

dove $\omega(n', n) = \frac{h(n') - h(n)}{\hbar}$ è la frequenza di Bohr, con $h(n')$ e $h(n)$ che sono gli autovalori energetici di $|n'\rangle$ e $|n\rangle$ rispettivamente.

Appendice B

Esperimento di Stern e Gerlach

Nel 1922 Stern e Gerlach pubblicarono uno studio che mostrava, per degli atomi di argento, come essi venissero deflessi passando attraverso una coppia di magneti [5].

Gli atomi di argento venivano fatti volare verso due magneti, che esercitavano un campo trasversale al moto dell'atomo di argento, alterandone la traiettoria.

Iteriamo ora una analisi di questo problema per atomi per i quali l'elettrone più esterno ha numero quantico di spin $s = \frac{1}{2}$.

Sia una base ortnormale orientata \mathbf{e}_i , tale che il campo magnetico $\mathbf{B}(z) = B(z)\mathbf{e}_3$.

Sia allora l'Hamiltoniano dell'atomo soggetto a campo magnetico

$$\hat{H}(z) = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}(z) = -\hbar\omega(z)\hat{\sigma}_3 \quad (\text{B.1})$$

dove abbiamo utilizzato la relazione 4.1 per scrivere il momento magnetico e abbiamo posto $\omega = \gamma B(z)$; si noti che abbiamo convenientemente posto lo zero energetico in modo da non dover considerare anche l'energia cinetica pregressa dell'atomo.

La presenza di un campo magnetico costante nel tempo ci porta ad avere due livelli energetici

$$h_{\pm 1} = \pm \hbar\omega \quad (\text{B.2})$$

e due stati $|\mathbf{e}_3, \pm 1\rangle = |\pm 1\rangle$ tali che questi sono gli autostati di \hat{H} di autovalori $h_{\pm 1}$.

Sia ora un atomo preparato inizialmente nello stato $|\psi_0\rangle = |\mathbf{n}, +1\rangle$ che, per la relazione 1.26, possiamo riscrivere come $|\psi_0\rangle = |\mathbf{e}_3, +1\rangle \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + |\mathbf{e}_3, -1\rangle \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi}$; sia poi l'operatore evoluzione associato all'Hamiltoniano indipendente dal tempo B.1, che sarà dato come

$$\hat{U}(t, 0) = e^{i\omega t \hat{\sigma}_3} \quad (\text{B.3})$$

allora avremo che lo stato $|\psi(t)\rangle$ evoluzione temporale dello stato iniziale $|\psi_0\rangle$ una volta che quest ultimo viene immerso nel campo magnetico costante sarà

$$|\psi(t)\rangle = |\mathbf{e}_3, +1\rangle \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\omega t} + |\mathbf{e}_3, -1\rangle \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i(\phi - \omega t)} \quad (\text{B.4})$$

Vogliamo ora calcolare la probabilità che, una volta uscito dal campo magnetico costante prodotto dai magneti di Stern e Gerlach, l'atomo sia in uno stato $|\mathbf{e}_3, +1\rangle$, allora dovremo calcolare

$$\langle \mathbf{e}_3, +1 | \psi(t) \rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\omega(z)t} \quad (\text{B.5})$$

il cui modulo quadro, rappresentante questa probabilità, sarà dato come

$$|\langle \mathbf{e}_3, +1 | \psi(t) \rangle|^2 = \cos^2(\theta/2) \quad (\text{B.6})$$

L'orientazione del vettore \mathbf{n} dipende però dal tipo di atomo e segue delle considerazioni di tipo termodinamico; assumendo per semplicità che la distribuzione dei vettori \mathbf{n} per il fascio di atomi sia una distribuzione uniforme, avremo che la probabilità media che l'atomo esca dai magneti in uno stato $|0, +1\rangle$ sarà:

$$\langle \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin(\theta) \cos^2(\theta/2) d\theta = \frac{1}{2} \quad (\text{B.7})$$

e si ottiene dunque lo stesso risultato ottenuto da Stern e Gerlach.

A questo punto con alcune considerazioni di natura dinamica e tenendo in considerazione il fatto che il campo magnetico è dipendente dalla posizione lungo l'asse z degli atomi del fascio è possibile ottenere la divisione in due bande tipica dell'esperimento di Stern e Gerlach.

L'esperimento venne successivamente riprodotto sia per atomi di idrogeno sia per atomi alcalini, provando le supposizioni iniziali con le quali abbiamo svolto la qui presente analisi [14][12].

Appendice C

Qubit

In questa sezione sarà fatto un breve accenno alla teoria del calcolo quantistico, senza però entrare troppo nel dettaglio, per mostrare fin dove la teoria dei sistemi a due livelli possa spingersi.

L'unità base di informazione usata nella teoria dell'informazione, che deriva dal termine "bit digitale" [8]; un bit può avere solo due possibili valori, che possono essere 0 o 1, e una sequenza di diversi bit possono fornire diverse informazioni, scrivendo numeri che possono poi essere convertiti dal binario al decimale o codificando parole tramite delle determinate convenzioni.

Nel corso di questo testo si è però trattato a lungo dei sistemi a due stati, ovvero sistemi che possono trovarsi in soli due stati indipendenti tra loro; sia allora una coppia di stati (che compongono una base ortonormale) $|0\rangle$ e $|1\rangle$ tali che

$$\begin{aligned}\langle 0|1\rangle &= \langle 1|0\rangle = 0 \\ \langle 1|1\rangle &= \langle 0|0\rangle = 1\end{aligned}\tag{C.1}$$

Sia allora uno stato descritto come

$$|\psi\rangle = |0\rangle\alpha + |1\rangle\beta\tag{C.2}$$

che descrive una combinazione lineare dei due stati definiti in precedenza, dove però avremo che

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1\tag{C.3}$$

Un qubit, o "Quantum Bits", è un sistema a due livelli che, a differenza del bit, può assumere una serie di valori continui che sono combinazioni lineari di 0 e 1, come indicato dallo stato C.2; la base $|0\rangle$ e $|1\rangle$ sarà detta **base computazionale**.

A differenza di un bit però, che ha sempre un valore fissato 0 o 1, un qubit assume un valore 0 o 1 solo una volta che viene misurato, e una volta misurato esso sarà alterato e crollerà in uno stato $|0\rangle$ o $|1\rangle$.

Essendo i qubit descritti dalla Sfera di Bloch, che ha infiniti punti sulla propria superficie, si potrebbe pensare che un singolo qubit possa contenere potenzialmente infinite informazioni, ma ciò è lontano dalla realtà, in quanto nel processo di misura e di osservazione, il qubit fornirà, come già detto, solo uno 0 e un 1 e perderà l'informazione che avevamo fornito ad esso; l'unico modo per determinare i coefficienti α e β che descrivono la posizione sulla sfera di Bloch del qubit sarebbe quello di osservare e misurare un numero infinito di qubit preparati inizialmente nello stesso stato.

Senza poter osservare il qubit viene difficile pensare di poter ottenere informazioni da esso, ma si tenga presente che l'evoluzione di un sistema quantistico chiuso dove non avvengono misure tiene conto di come varino i parametri α e β .

A questo punto sorge però spontanea la domanda su come dovremmo utilizzare questi qubit; a livello logico, come possiamo riprodurre l'algebra di Boole dei computer classici in sistemi di questo tipo?

E' possibile definire operazioni logiche come NOT, AND e OR pure in questo tipo di sistemi, ma esse funzioneranno in maniera diversa, che sarà descritta qui in breve.

Per una porta logica NOT ad esempio, essa ha l'effetto di trasformare uno 0 in un 1 nell'algebra di Boole classica, ma in questa teoria, esso avrà un effetto diverso:

$$|0\rangle\alpha + |1\rangle\beta \rightarrow |0\rangle\beta + |1\rangle\alpha \quad (\text{C.4})$$

Possiamo quindi descrivere il NOT quantistico con un operatore, che sarà dato come

$$\hat{X} = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \quad (\text{C.5})$$

che è unitario (come saranno tutti gli operatori dei gate quantistici) e corrisponde all'operatore di Pauli $\hat{\sigma}_x$ (presa una opportuna base ortonormale orientata e_i con operatori di Pauli descritti come da espansioni delle matrici 1.15).

In generale, saranno utili i gate rappresentati dagli operatori di Pauli e il gate di Hadamard, dato come

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 1|) \quad (\text{C.6})$$

che ha l'effetto di mandare β in $-\beta$ e corrisponde a una rotazione di un angolo di 90 rispetto all'asse y nella sfera di Bloch, seguita poi da una rotazione di 180 attorno all'asse x.[9]

Bibliografia

- [1] Reinhold A. Bertlmann. *Quantum Mechanics Lecture Notes*. 2008.
- [2] Felix Bloch. «Nuclear Induction. (English)». In: *Phys. Rev.* 70.7-8 (1946), pp. 460–474.
- [3] Raymond V. Damadian. «Apparatus and Method for Detecting Cancer in Tissue. (English)». In: *Singer, J. R., Journ. of Applied Physics* 31.1 (1960), pp. 125–127.
- [4] R. Feynman. *The Feynman Lectures on Physics: Volume III*. Basic Books, 1965. ISBN: 9780465024179.
- [5] O. Gerlach W.; Stern. «Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld. (German)». In: *Z. Phys* 9 (1922), pp. 349–352.
- [6] David J. Griffiths. *Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge Press, 2018. ISBN: 9781107189638.
- [7] Shah N; Sattar A; Benanti M; Hollander S; Cheuck L. «Magnetic resonance spectroscopy as an imaging tool for cancer: a review of the literature. (English)». In: *The Journal of the American Osteopathic Association* 106.1 (2013), pp. 23–27.
- [8] Charles E. Mackenzie. *Coded Character Sets, History and Development*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1980. ISBN: 978-0-201-14460-4.
- [9] Isaac L. Chuang Michael A. Nielsen. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2010. ISBN: 9781107002173.
- [10] John Von Neumann. «Wahrscheinlichkeitstheoretischer Aufbau der Quantenmechanik. (German)». In: *Göttinger Nachrichten* 1 (1927), pp. 245–272.
- [11] Brown RW Cheng YN Haacke EM Thompson MR Venkatesan R. *Magnetic Resonance Imaging: Physical Principles and Sequence Design*. John Wiley & Sons, 2014. ISBN: 978-1-118-63397-7.
- [12] I.I Rabi. «Zur Methode der Ablenkung von Molekularstrahlen». In: *Z. Phys.* 54 (1929), pp. 190–197.
- [13] J. Stark. «Observations of the effect of the electric field on spectral lines I. Transverse effect. (English)». In: *Annalen der Physik* 43.1 (1914), pp. 965–983.

- [14] John B. Taylor. «Magnetic Moments of the Alkali Metal Atoms». In: *Phys. Rev.* 28 (3 set. 1926), pp. 576–583.
- [15] F. Ticozzi. *Introduzione al Controllo Quantistico*. 2001.
- [16] Nicholas Wheeler. *Nicholas Wheeler's Lecture Notes*.
- [17] R. Zucchini. *Quantum Mecahnics: Lecture Notes*.