

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Corso di Laurea in Fisica
Tesi di Laurea in Metodi Matematici per la Fisica

LE RAPPRESENTAZIONI IN MECCANICA QUANTISTICA

Relatore:
Prof. Fabio Ortolani

Presentata da:
Ivano Colombaro

Sessione II
Anno Accademico 2012/2013

A Sara.

Sommario

A partire dal 1900, due nuove teorie sconvolsero l'intero mondo scientifico, provocando un profondo rinnovamento: la Teoria della Relatività di Albert Einstein e la Teoria dei Quanti, definita da George Gamow¹ come il risultato del lavoro creativo di diversi grandi scienziati, a cominciare da Max Planck [1]. Il fisico tedesco è infatti considerato da tutti come il padre fondatore della fisica quantistica, a partire dai suoi studi sui processi di assorbimento ed emissione della radiazione, in particolare da parte di un corpo nero. Molti altri nomi celebri segnano il percorso di questa nuova teoria, da Bohr a Pauli, da Compton a De Broglie, da Einstein a Fermi, ed altri ancora. Non solo nel campo della fisica, ma anche in ambito matematico furono compiuti notevoli progressi, pubblicati per la prima da John Von Neumann, nel 1932, con il suo *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*.

Sebbene tali teorie si differenzino dalle precedenti per una più rigida ed impegnativa struttura formale, la formazione delle loro fondamenta ha una origine prettamente sperimentale, nonostante l'apparente astrazione e la comprensione, alle volte, controintuitiva. Infatti, uno dei postulati basilari della relatività è l'impossibilità di un oggetto fisico di superare la velocità della luce, mentre uno dei principali fondamenti della fisica dei quanti è il famoso **Principio di indeterminazione** (vedi Appendice A.1) di Heisenberg, secondo il quale non esiste un apparato sperimentale reale in grado di rilevare la posizione e la velocità di una particella quantistica entrambe in maniera accurata.

La maggior parte dei libri di testo, per quanto riguarda la fisica quantistica, riportano maggiore attenzione sulla meccanica ondulatoria, trattando la meccanica matriciale in maniera più marginale, o comunque introducendola in un secondo momento.

Lo scopo di questo elaborato è compiere un viaggio virtuale attraverso le tappe principali dello sviluppo della teoria dei quanti e approfondirla nelle sue diverse rappresentazioni, quella di Erwin Schrödinger, quella di Werner Karl Heisenberg e quella di Paul Adrien Maurice Dirac, fino ad arrivare, nella fase conclusiva, a diverse applicazioni delle rappresentazioni, sfiorando marginalmente la Teoria dei Campi e, di conseguenza, introducendo un parziale superamento della stessa Teoria Quantistica.

¹George Gamow (Odessa, Ucraina, 1904 - Boulder, Colorado, U.S.A., 1968). Fisico noto in tutto il mondo per i suoi meriti di divulgatore scientifico, anche con libri di carattere storico ricchi di notizie biografiche, nonché di curiosità e aneddoti sui fisici suoi contemporanei.

Indice

Introduzione	1
1 Struttura formale della meccanica quantistica	3
1.1 Osservabili	4
1.2 Operatore di evoluzione	6
1.3 Evoluzione temporale	7
2 Le rappresentazioni o <i>pictures</i>	10
2.1 La rappresentazione di Schrödinger	10
2.2 La rappresentazione di Heisenberg	11
2.3 La rappresentazione di Dirac o di interazione	13
3 Applicazioni	16
3.1 Il teorema di Ehrenfest	17
3.1.1 Derivazione in rappresentazione di Schrödinger	17
3.1.2 Derivazione in rappresentazione di Heisenberg	18
3.2 Teoria perturbativa dipendente dal tempo	18
3.2.1 Trattazione generale del problema perturbativo	19
3.2.2 Teoria perturbativa in rappresentazione di Dirac	19
3.3 La matrice di scattering	23
Conclusioni	25
A Principi e Teoremi	26
A.1 Principio di Indeterminazione	26
A.2 Principio di Corrispondenza	26
A.3 Teorema Spettrale	27
Bibliografia	28

Introduzione

La meccanica quantistica, sin dalla sua nascita, ha sempre destato alcune perplessità, se non addirittura polemiche, anche tra gli addetti ai lavori, come testimoniato da celeberrimi aforismi:

- *I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics.* Richard Feynman [2], tradotto:
Penso si possa tranquillamente affermare che nessuno capisce la meccanica quantistica.
- *God does not play dice*, ovvero il celebre aforisma di Albert Einstein [3],
Dio non gioca a dadi.
- *Stop telling God what to do with his dice*, Niels Bohr, rispondendo ad Einstein [4],
Piantala di dire a Dio che cosa fare con i suoi dadi.

Lo stesso sviluppo della teoria non fu univoco, ma ebbe diverse sfaccettature.

Schrödinger si impegnò a formalizzare la meccanica ondulatoria, presentando un'equazione d'onda basata su una proposta avanzata da De Broglie [5], ovvero l'associazione, attraverso la costante di Planck h , di una lunghezza d'onda λ anche a particelle puntiformi, come gli elettroni, caratterizzate da un momento lineare p , secondo la relazione

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

considerando, dal punto di vista concettuale, le particelle microscopiche come onde di materia.

Nel contempo, separatamente, un giovane ed ambizioso Heisenberg, con la collaborazione di Max Born e Pascual Jordan [6], creò un formalismo basato sulla matematica astratta del calcolo delle matrici per la meccanica quantistica, considerando esclusivamente transizioni osservabili, senza presunte traiettorie e sostenendo l'esistenza di entità essenziali, quali salti quantici e discontinuità all'interno dell'atomo. Nonostante il fascino di quest'ultima formulazione, la maggioranza dei fisici accolse favorevolmente l'impostazione di Schrödinger, muovendo critiche verso l'algebra trascendente delle matrici e dalla mancanza di *Anschaulichkeit*, cioè di visualizzabilità.

Dopo qualche mese di accese discussioni lo stesso Schrödinger dimostrò l'equivalenza formale delle teorie [7], ma ciò non contribuì a spegnere la disputa in atto, poiché la posta in palio era maggiore. Heisenberg ed i suoi colleghi della "scuola delle matrici" stavano indirizzando la loro carriera sulla descrizione matriciale di proprietà della natura che sostenevano esistere, mentre Schrödinger aveva impegnato la propria reputazione

per tentare di eliminare l'apparente irrazionalità delle discontinuità e dei salti quantici, sostituendola con una fisica di moti ondulatori continui, causali, razionali. Nessuna delle due parti era disposta a concedere all'altra una sorta di predominio professionale [8].

La meccanica quantistica fornisce, pertanto, una spiegazione, concettuale e matematica, del dualismo onda-particella, attraverso la quantizzazione delle grandezze dinamiche che caratterizzano lo stato della materia su una scala di grandezza dell'ordine della costante di Planck

$$h = 6.62606896(33) \cdot 10^{-34} J \cdot s$$

o, in alternativa, si suole fare anche uso della costante di Planck ridotta, largamente presente nei capitoli successivi

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054571628(53) \cdot 10^{-34} J \cdot s \quad [9],$$

come ben espresso dalle relazioni di Planck-Einstein

$$E = \hbar\omega$$

$$p = \hbar k$$

che legano l'energia alla pulsazione e il momento lineare al numero d'onda.

La teoria, nonostante contenga al proprio interno la meccanica newtoniana, come ben espresso dal **Principio di Corrispondenza**, riportato in Appendice A.2, si rivela tutt'altro che completa. Infatti essa è solo il limite non relativistico della Teoria dei Campi, ovvero della teoria che si sviluppa combinando la Meccanica Quantistica con la Relatività.

Capitolo 1

Struttura formale della meccanica quantistica

In meccanica quantistica conviene indicare in maniera alternativa, rispetto alla fisica classica, i vettori connessi allo stato di un sistema, siano essi in uno spazio finito o infinito dimensionale. Introducendo il formalismo di Dirac [10], essi sono i *vettori ket*, o semplicemente *ket*, si indicano con il simbolo $|\ \rangle$, e corrispondono agli oggetti matematici conosciuti come vettori colonna. Vi sono poi i *vettori bra*, detti sinteticamente *bra*, indicati con il simbolo $\langle \ |$, che corrispondono a vettori riga in cui si è eseguita l'operazione di coniugazione complessa, poiché lo spazio preso in considerazione è uno spazio di Hilbert separabile \mathcal{H} di dimensioni infinite.

Il prodotto scalare indotto si indicherà quindi con il prodotto *bra-ket*

$$\langle \varphi, \varphi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle. \quad (1.1)$$

L'espressione più comune per legare la notazione di Schrödinger a quella di Dirac è

$$\psi(q) = \langle q | \psi \rangle \quad (1.2)$$

nella quale $\psi(q)$ è definita, in senso distribuzionale, attraverso la delta di Dirac

$$\langle \delta_q, \psi \rangle = \psi(q). \quad (1.3)$$

Fisicamente l'equazione (1.2) ha un significato molto profondo ed descrive lo stato fisico ψ nello spazio delle posizioni q . L'espressione, formalmente uguale,

$$\langle p | \psi \rangle$$

avrebbe descritto l'analogia funzione d'onda nel medesimo stato, ma attraverso lo spazio degli impulsi.

Esiste ovviamente anche il modo di scrivere, attraverso questo nuovo formalismo, il cosiddetto prodotto diadico, o prodotto tensoriale, che sarà, a rigor di logica, il prodotto *ket-bra*.

Convenzionalmente, nei paragrafi successivi, porremo gli operatori alla sinistra di un ket, ed alla sua destra gli scalari, mentre, in maniera del tutto speculare, gli operatori saranno scritti alla destra dei bra ed i numeri scalari alla sinistra di essi.

Tutti i riferimenti riguardanti notazione e contenuti nel prosieguo dell'elaborato sono riportati alla nota [11].

1.1 Osservabili

Gli osservabili di un sistema fisico sono proprietà numericamente quantificabili del sistema. Le quantità osservabili sono espresse, nel formalismo della meccanica quantistica, attraverso operatori lineari hermitiani, oppure matrici hermitiane, tali che $\hat{\chi}^\dagger = \hat{\chi}$, poiché gli autovalori λ che soddisfano l'equazione

$$\hat{\chi}|\phi\rangle = |\phi\rangle\lambda \quad (1.4)$$

sono reali, $\lambda \in \mathbb{R}$, e corrispondono allo spettro delle grandezze fisiche misurabili. Gli autoket $|\phi\rangle$ dell'equazione (1.4) formano un insieme ortonormale completo di funzioni d'onda, compongono la base di \mathcal{H} , e soddisfano quindi le relazioni

$$\langle\phi'|\phi\rangle = \delta_{\phi',\phi_D} \delta(\phi'_C - \phi_C) \quad (1.5)$$

$$\hat{1} = \sum_{\phi_D} \int d\phi_C |\phi\rangle\langle\phi| \quad (1.6)$$

eseguendo la somma sugli autostati discreti di ϕ e l'integrale sugli autostati continui nella formula della relazione di completezza. La formula della relazione di ortonormalità è qui espressa nel caso più generale in cui è presente una parte discreta, che si annulla attraverso il simbolo di Kronecker, ed una parte continua, il cui annullamento è dettato dalla delta di Dirac.

Lo spettro di un osservabile χ è l'insieme di tutti i possibili risultati λ di un processo di misura per tutti i possibili stati di $|\phi\rangle$.

Se la misura di un determinato osservabile χ , mentre il sistema si trova nello stato $|\phi\rangle$ viene eseguita un numero considerevolmente elevato di volte, la media di tutti i risultati è definita il valore d'aspettazione dell'osservabile

$$\langle\chi\rangle = \langle\phi|\hat{\chi}|\phi\rangle = \int_{\mathcal{H}} d^3x \bar{\phi} \hat{\chi} \phi \quad (1.7)$$

dalla quale, se ϕ è autofunzione di $\hat{\chi}$, posto $\langle\phi,\phi\rangle = 1$ per l'ortonormalità, si dimostra subito che lo spettro dei valori di aspettazione di un osservabile sono gli autovalori dell'operatore associato, nonché i valori della matrice diagonale che lo rappresenta, risultato noto dal **Teorema spettrale**, approfondito nell'Appendice A.3, sintetizzato nella formula

$$\hat{\chi} = \sum_{\iota} \int dk |\iota, k\rangle \lambda_{\iota k} \langle\iota, k|, \quad (1.8)$$

nella quale $|\phi\rangle = |\iota, k\rangle$, con ι indice continuo e k indice discreto.

Da notare come nell'equazione (1.7) la notazione di Dirac sia più concisa rispetto all'equivalente "classica", non solo per l'impatto visivo, ma anche dal punto di vista dei calcoli, che sono spesso più agevoli. È possibile anche vedere, inoltre, come la relazione di completezza non è altro che il teorema spettrale nel caso particolare in cui l'osservabile è l'operatore identico.

Un problema inesistente nella fisica classica, che viene però fuori operando misure a livello quantistico, è proprio la misura di un osservabile. Affinché valga la relazione agli autovalori (1.4) c'è bisogno che il sistema si trovi in un autostato $|\phi\rangle$, o *eigenstate*, adeguato per

la misura dell'osservabile, ed in tal caso l'autovalore λ , o *eigenvalue*, è unico. Iterando il processo per tutti gli eigenstates si trova lo intero insieme degli eigenvalues, giungendo al fenomeno detto *saturazione dello spettro*. Esistono tuttavia molte circostanze nelle quali questo non avviene e sia ha una *degenerazione dello spettro*, ovvero una situazione nella quale, preparato il sistema fisico in diversi stati iniziali, eseguendo il procedimento di misura esso riporta più volte lo stesso valore numerico, cioè si dice che λ è degenere e viene a decadere la validità di una relazione agli autovalori.

Un insieme di operatori autoaggiunti associati a quantità osservabili fisiche definisce un sistema completo di osservabili se gli operatori commutano tra di loro, quindi corrispondono ad osservabili compatibili, e se ogni altro operatore che commuta con loro è una funzione degli operatori stessi.

Ovvero, formalmente, secondo il principio di indeterminazione di Heisenberg, non tutti gli osservabili possono essere misurati contemporaneamente, bensì solo quelli il cui commutatore, equivalente quantistico delle parentesi di Poisson, si annulla.

Presi infatti due osservabili non compatibili A e B, e definito C tale che $C = C^\dagger$, il cui commutatore è

$$[A, B] = iC \quad (1.9)$$

le indeterminazioni sulle misure di A e di B soddisfano la disuguaglianza

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\langle C \rangle|}{2} = \frac{|\langle [A, B] \rangle|}{2}. \quad (1.10)$$

Per verificare la veridicità di quest'ultima disequazione definiamo gli operatori

$$\hat{A} = A - \langle A \rangle, \quad \hat{B} = B - \langle B \rangle$$

tali che

$$[\hat{A}, \hat{B}] = iC \quad (\Delta A)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle \quad (\Delta B)^2 = \langle \hat{B}^2 \rangle$$

e calcoliamo la norma del vettore $(\hat{A} - i\lambda\hat{B})\psi$, con $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} \left\| (\hat{A} - i\lambda\hat{B})\psi \right\|^2 &= \langle (\hat{A} - i\lambda\hat{B})\psi | (\hat{A} - i\lambda\hat{B})\psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A} + i\lambda\hat{B}) (\hat{A} - i\lambda\hat{B}) \psi \rangle = \\ &= \langle \psi | \hat{A}^2 \psi \rangle + \langle \psi | \lambda^2 \hat{B}^2 \psi \rangle + \langle \psi | -i\lambda [\hat{A}, \hat{B}] \psi \rangle = \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle + \langle \hat{B}^2 \rangle + \lambda \langle C \rangle \geq 0. \end{aligned}$$

Minimizzata quest'ultima rispetto al parametro λ si ottiene

$$\lambda = -\frac{\langle C \rangle}{2\langle \hat{B}^2 \rangle}$$

che sostituita prova l'espressione (1.10).

Gli esempi più evidenti, ed anche più noti, di operatori non compatibili sono la posizione e l'impulso, così come l'energia ed il tempo

$$[\hat{q}, \hat{p}] = [\hat{E}, t] = i\hbar\hat{1}, \quad (1.11)$$

e valgono le note espressioni di indeterminazione

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.12)$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (1.13)$$

Per verificare l'equazione (1.11) consideriamo per semplicità lo spazio delle posizioni unidimensionale, ove

$$\hat{q} \rightarrow x, \quad \hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad \hat{E} \rightarrow i\hbar \frac{d}{dt},$$

e vediamo che, agendo su una funzione di prova $\psi(x, t)$, si giunge al risultato illustrato

$$[\hat{q}, \hat{p}] \psi(x, t) = \hat{q} (\hat{p}\psi(x, t)) - \hat{p} (\hat{q}\psi(x, t)) = -i\hbar x \frac{d\psi}{dx}(x, t) + i\hbar \frac{d(x\psi(x, t))}{dx} = i\hbar \psi(x, t)$$

$$[\hat{E}, t] \psi(x, t) = i\hbar \frac{d(t\psi(x, t))}{dt} - i\hbar t \frac{d\psi(x, t)}{dt} = i\hbar \psi(x, t).$$

1.2 Operatore di evoluzione

La maggior parte dei problemi fisici evolve nel tempo, pertanto considerando l'hamiltoniana del sistema $\hat{H}(t)$ dipendente da tempo nulla vieta di constatare che l'evoluzione del ket $|\psi(t)\rangle$ è governata dall'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.14)$$

con un'opportuna condizione iniziale $|\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle$.

L'evoluzione temporale del ket $|\psi(t)\rangle$ è descritta dal cosiddetto operatore d'evoluzione $\hat{U}(\hat{t}, s)$ dipendente dal tempo iniziale s e dal tempo finale t e soddisfacente le seguenti equazioni dell'operatore d'evoluzione

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, s)}{\partial t} = \hat{H}(t) \hat{U}(t, s) \quad (1.15)$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, s)}{\partial s} = -\hat{U}(t, s) \hat{H}(t) \quad (1.16)$$

con la condizione iniziale $\hat{U}(s, s) = \hat{1}$.

La proprietà principale di $\hat{U}(t, s)$ è legare lo stato iniziale s ad ogni generico stato t

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, s) |\psi(s)\rangle \quad (1.17)$$

dalla quale è praticamente immediato trovare la soluzione al problema di Schrödinger

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, 0) |\psi_0\rangle. \quad (1.18)$$

L'operatore di evoluzione ha diverse proprietà algebriche derivanti dalla sua stessa definizione, tra le quali l'unitarietà

$$\hat{U}(t, s)^\dagger = \hat{U}(t, s)^{-1} \quad (1.19)$$

in maniera tale da permettere anche la conservazione della probabilità $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$ per ogni istante di tempo t . È subito visibile questo fatto considerando l'uguaglianza tra l'espressione all'istante t e quella all'istante iniziale, dovuta alla linearità dei ket $|\psi(t)\rangle$ e $|\phi(t)\rangle$

$$\langle \phi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \phi(0) | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi(0) \rangle = \langle \phi(0) | \psi(0) \rangle$$

che implica $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}$.

L'operatore risponde anche alla seguente uguaglianza per la composizione dell'evoluzione temporale

$$\hat{U}(t, v) \hat{U}(v, s) = \hat{U}(t, s). \quad (1.20)$$

La dipendenza temporale di un operatore, però, può non essere dovuta solo alla dinamica interna del sistema, ma anche a dei fattori esterni, ed in tal caso non segue né un'equazione differenziale, come quella di Schrödinger, né soddisfa le equazioni dell'operatore d'evoluzione associato.

Un importante caso particolare, considerato successivamente, è il caso in cui l'hamiltoniana non dipende dal tempo $\hat{H}(t) = \hat{H}_0$ ed in tal caso è possibile esprimere l'operatore di evoluzione attraverso l'espressione

$$\hat{U}(t, s) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-s)} = \hat{U}_0(t, s) \quad (1.21)$$

1.3 Evoluzione temporale

Lo studio dell'evoluzione nel tempo di un sistema è da sempre uno dei temi fondamentali della fisica, ed anche in meccanica quantistica svolge un ruolo centrale, nonostante le leggi che la regolano siano probabilistiche.

La probabilità che la misura di un osservabile $\hat{\chi}$ sia in un intervallo I , preso il sistema in uno stato iniziale $|\psi\rangle$, è

$$P(I) = \sum_{a_D} \int_{\chi(a) \text{ in } I} da_C \left| \langle a | \psi \rangle \right|^2, \quad (1.22)$$

supposto che i ket $|a\rangle$ formino una base ortonormale completa di autoket di $\hat{\chi}$ e $\chi(a)$ è l'autovalore di $\hat{\chi}$ a cui $|a\rangle$ appartiene, $\hat{\chi} |a\rangle = |a\rangle \chi(a)$. Il valor medio del risultato della misura dell'osservabile $\hat{\chi}$, come già visto, è

$$\langle \chi \rangle = \langle \psi | \hat{\chi} | \psi \rangle. \quad (1.23)$$

Queste quantità sono invarianti per la trasformazione

$$|\psi\rangle_T = \hat{T}^{-1} |\psi\rangle \quad (1.24)$$

e, preso arbitrariamente \hat{T} come operatore unitario, $\hat{T}^\dagger = \hat{T}^{-1}$, scriviamo la relazione

$$\hat{\chi}_T = \hat{T}^\dagger \hat{\chi} \hat{T}. \quad (1.25)$$

Considerando il termine invariante è una immediata conseguenza che

$$P(I) = \sum_{a_D} \int da_C \left| \int_{\chi(a) \text{ in } I} |_T \langle a|\psi\rangle_T \right|^2 \quad (1.26)$$

$$\langle \chi \rangle = {}_T \langle \psi | \hat{\chi}_T | \psi \rangle_T . \quad (1.27)$$

Ovviamente, nei problemi in cui il sistema evolve nel tempo, l'operatore \hat{T} sarà dipendente dalla variabile temporale, in particolare verrà preso un operatore $\hat{T}(t, s)$, ove è indicato con s il tempo iniziale e con t il tempo finale, come operatore di evoluzione temporale se soddisfa, preso un operatore autoaggiunto $\hat{K}(t)$, le equazioni di evoluzione

$$i\hbar \frac{\partial \hat{T}(t, s)}{\partial t} = \hat{K}(t) \hat{T}(t, s) \quad (1.28)$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{T}(t, s)}{\partial s} = -\hat{T}(t, s) \hat{K}(t) \quad (1.29)$$

con la condizione iniziale $\hat{T}(s, s) = \hat{1}$.

Formalmente $\hat{T}(t, s)$ è l'operatore d'evoluzione, e $\hat{K}(t)$ si comporta come l'hamiltoniana ad esso associata. Conseguenze immediata di questo fatto sono le proprietà di unitarietà e soddisfacimento della uguaglianza a catena

$$\hat{T}(t, s)^\dagger = \hat{T}(t, s)^{-1} \quad (1.30)$$

$$\hat{T}(t, z) \hat{T}(z, s) = \hat{T}(t, s) \quad (1.31)$$

come un vero e proprio operatore d'evoluzione.

Posso procedere definendo la rappresentazione K eseguendo la trasformazione inversa \hat{T}^{-1} sui ket, usando ad ogni tempo t la trasformazione unitaria $\hat{T}(t, 0)$ ed ottenendo i ket di sistema $\psi(t)$ nella formulazione K

$$|\psi(t)\rangle_K = \hat{T}(t, 0)^{-1} |\psi(t)\rangle . \quad (1.32)$$

L'evoluzione temporale di un sistema fisico, nella generica rappresentazione K , in meccanica quantistica, è descritta dalla equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_K = \hat{H}^{(K)}(t) |\psi(t)\rangle_K \quad (1.33)$$

dove il ket è determinato dalla condizione iniziale $|\psi(0)\rangle_K = |\psi_0\rangle_K$ e

$$\hat{H}^{(K)}(t) = \hat{T}(t, 0)^\dagger \left(\hat{H}(t) - \hat{K}(t) \right) \hat{T}(t, 0) . \quad (1.34)$$

Il problema di Schrödinger con tale formalismo non è diverso da quello standard, tuttavia una scelta oculata della rappresentazione può semplificare considerevolmente la risoluzione.

La stessa scelta va operata per la soluzione del problema dell'operatore d'evoluzione nella rappresentazione K , $\hat{U}^{(K)}(t, s)$, legato all'operatore d'evoluzione standard attraverso il "sandwich unitario"

$$\hat{U}^{(K)}(t, s) = \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{U}(t, s) \hat{T}(s, 0) . \quad (1.35)$$

Possiamo verificare agevolmente che quest'ultima definizione è ben posta attraverso la stessa equazione di Schrödinger

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \hat{U}^{(K)}(t, s)}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{U}(t, s) \hat{T}(s, 0) \right) = \\
&= i\hbar \frac{\partial \hat{T}(t, 0)^\dagger}{\partial t} \hat{U}(t, s) \hat{T}(s, 0) + i\hbar \hat{T}(t, 0)^\dagger \frac{\partial \hat{U}(t, s)}{\partial t} \hat{T}(s, 0) = \\
&= -\hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{K}(t) \hat{U}(t, s) \hat{T}(s, 0) + \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{H}(t) \hat{U}(t, s) \hat{T}(s, 0) = \\
&= \hat{T}(t, 0)^\dagger \left(-\hat{K}(t) + \hat{H}(t) \right) \hat{T}(t, 0) \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{U}(t, s) \hat{T}(t, 0) = \\
&= \hat{H}^{(K)}(t) \hat{U}^{(K)}(t, s)
\end{aligned}$$

corrispondente alla prima equazione di evoluzione, e

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \hat{U}^{(K)}(t, s)}{\partial s} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \left(\hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{U}(t, s) \hat{T}(s, 0) \right) = \\
&= i\hbar \hat{T}(t, 0)^\dagger \frac{\partial \hat{U}(t, s)}{\partial s} \hat{T}(s, 0) + i\hbar \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{U}(t, s) \frac{\partial \hat{T}(s, 0)}{\partial s} = \\
&= -\hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{H}(t) \hat{U}(t, s) \hat{T}(s, 0) + \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{U}(t, s) \hat{K}(s) \hat{T}(s, 0) = \\
&= \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{U}(t, s) \hat{T}(s, 0) \hat{T}(s, 0)^\dagger \left(-\hat{H}(s) + \hat{K}(s) \right) \hat{T}(t, 0) = \\
&= -\hat{U}^{(K)}(t, s) \hat{H}^{(K)}(s)
\end{aligned}$$

corrispondente alla seconda equazione di evoluzione, con condizione iniziale

$$\hat{U}^{(K)}(s, s) = \hat{T}(s, 0)^\dagger \hat{U}(s, s) \hat{T}(s, 0) = \hat{T}(s, 0)^\dagger \hat{1} \hat{T}(s, 0) = \hat{1}.$$

Similmente, nella generica *K-picture* un operatore del tipo $\hat{A}(t)$ lo si scrive come

$$\hat{A}_K(t) = \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{A}(t) \hat{T}(t, 0) \quad (1.36)$$

ed obbedisce ad una equazione differente dall'equazione di Schrödinger, la cosiddetta **equazione di Heisenberg**

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_K(t)}{dt} = \left[\hat{A}_K(t), \hat{\mathcal{H}}^{(K)} \right] + i\hbar \left(\frac{d\hat{A}}{dt} \right)_K(t) \quad (1.37)$$

nella quale l'operatore $\hat{\mathcal{H}}^{(K)}$ è conosciuto come **hamiltoniana di Heisenberg**

$$\hat{\mathcal{H}}^{(K)}(t) = \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{K}(t) \hat{T}(t, 0). \quad (1.38)$$

L'equazione di Heisenberg è utilizzata, in un considerevole numero di casi, ed anche nelle pagine successive, quando l'osservabile A non è dipendente dal tempo, trovandosi quindi nella forma semplificata

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_K(t)}{dt} = \left[\hat{A}_K(t), \hat{\mathcal{H}}^{(K)} \right] \quad (1.39)$$

con l'elisione dell'ultimo termine.

Capitolo 2

Le rappresentazioni o *pictures*

Le rappresentazioni, in meccanica quantistica, come già introdotto, sono tre modi diversi di descrivere l'evoluzione temporale di un sistema fisico.

Rispetto a quanto esposto nel capitolo precedente, le grandezze prima indicate in forma generale, attraverso l'indice arbitrario K , saranno contraddistinte dalle etichette S , H , D , che corrispondono alle iniziali dei fisici che maggiormente hanno contribuito allo sviluppo della *picture*, nella fattispecie Schrödinger, Heisenberg e Dirac.

2.1 La rappresentazione di Schrödinger

Nella rappresentazione di Schrödinger viene operata la scelta $\hat{K}(t) = \hat{0}$, da cui si deduce banalmente la famiglia di operatori unitari

$$\hat{T}(t, s) = \hat{1}, \quad (2.1)$$

mentre l'insieme dei ket si riduce a quelli usuali

$$|\psi(t)\rangle_S = |\psi(t)\rangle. \quad (2.2)$$

La rappresentazione di Schrödinger dell'hamiltoniana non è altro che l'hamiltoniana stessa

$$\hat{H}^{(S)}(t) = \hat{H}(t) \quad (2.3)$$

La dipendenza temporale è esplicitata attraverso l'omonima, ormai conosciuta, equazione

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (2.4)$$

che rimane invariata nella formulazione scritta prima così come l'operatore di evoluzione

$$\hat{U}^{(S)}(t, s) = \hat{U}(t, s) \quad (2.5)$$

ed anche l'operatore

$$\hat{A}_S(t) = \hat{A}(t). \quad (2.6)$$

A causa della scelta $\hat{K}(t) = \hat{0}$ è immediato notare anche che l'hamiltoniana di Heisenberg si annulla

$$\hat{\mathcal{H}}^{(S)}(t) = \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{K}(t) \hat{T}(t, 0) = \hat{0} \quad (2.7)$$

riducendo di conseguenza l'equazione di Heisenberg alla triviale uguaglianza

$$\frac{d\hat{A}}{dt}(t) = \frac{d\hat{A}}{dt}(t).$$

Come appena scritto in precedenza elencando, dal punto di vista prettamente matematico, le equazioni caratterizzanti la S -picture, la forma di Schrödinger per l'equazione del moto è proprio l'equazione di Schrödinger

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

nella quale l'operatore $\hat{H}(t)$ è, in generale, la caratteristica dinamica del sistema. Ipotizzando $\hat{H}(t)$ come energia totale del sistema, possiamo giustificare la nostra ipotesi in due soli modi differenti: ovviamente può essere fatta una analogia con la meccanica classica, che vedremo in dettaglio nella rappresentazione di Heisenberg trattata nel paragrafo successivo; oppure $\hat{H}(t)$ risulta essere $i\hbar$ volte un operatore di traslazione lungo l'asse temporale, similmente agli operatori di traslazione lungo gli assi cartesiani x , y e z . Quindi, in corrispondenza con le relazioni

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{d}{dy}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{d}{dz}$$

potremo affermare che $\hat{H}(t)$ è l'energia totale, poiché in teoria della relatività permane tra energia e tempo la stessa relazione che vi è tra impulso e posizione.

Per ragioni fisiche poniamo anche, per ipotesi, che l'energia totale sia sempre un osservabile. Se ora il sistema considerato è isolato allora indicheremo l'energia semplicemente con H , in quanto essa risulta costante. Se, invece, dipende da t allora il sistema è sottoposto all'azione di forze esterne. È fondamentale, in tal caso, distinguere tale forza da una perturbazione causata da un processo di misura, poiché quest'ultima, a differenza della prima, non è compatibile con il principio di causalità e con le equazioni del moto. Pertanto, possiamo usare la rappresentazione di Schrödinger per un sistema fisico che possa essere descritto attraverso coordinate canoniche ed annessi momenti coniugati, e considerare quindi \hat{H} come un operatore di derivazione, in accordo con la relazione

$$[f, p_i] = \alpha \frac{\partial f}{\partial q_i},$$

nota fin dalla meccanica analitica, a meno della costante $\alpha = i\hbar$.

2.2 La rappresentazione di Heisenberg

Per quanto riguarda la rappresentazione di Heisenberg è stato scelto di far coincidere l'operatore $\hat{K}(t)$ con l'hamiltoniana

$$\hat{K}(t) = \hat{H}(t), \tag{2.8}$$

per cui la famiglia unitaria associata $\hat{T}(t, s)$ non è altro che l'operatore di evoluzione

$$\hat{T}(t, s) = \hat{U}(t, s). \tag{2.9}$$

A differenza della Schrödinger picture i ket stavolta diventano

$$|\psi(t)\rangle_H = \hat{U}(t, 0)^{-1} |\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle, \quad (2.10)$$

mentre l'hamiltoniana nella rappresentazione di Heisenberg assume valore nullo

$$\hat{H}^{(H)}(t) = \hat{0} \quad (2.11)$$

e l'operatore d'evoluzione associato riconduce all'identità

$$\hat{U}^{(H)}(t, s) = \hat{1}. \quad (2.12)$$

Il moto non è più regolato, quindi, dall'equazione di Schrödinger, che dimostra semplicemente l'annullamento della derivata di una costante

$$i\hbar \frac{d|\psi(0)\rangle}{dt} = 0.$$

L'operatore $\hat{A}(t)$ è espresso attraverso la trasformazione

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}(t, 0), \quad (2.13)$$

un esempio del quale si ritrova anche nell'hamiltoniana di Heisenberg

$$\hat{\mathcal{H}}^{(H)}(t) = \hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{H}(t) \hat{U}(t, 0) = \hat{H}_H(t). \quad (2.14)$$

L'equazione del moto è, stavolta, l'equazione di Heisenberg, come dimostrato qui di seguito differenziando l'espressione (2.13), e moltiplicando per la costante $i\hbar$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} &= i\hbar \frac{d}{dt} \left(\hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}(t, 0) \right) = \underbrace{\hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}(t, 0)}_{\hat{A}_H(t)} \underbrace{\hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{H}(t) \hat{U}(t, 0)}_{\hat{H}_H(t)} \\ &\quad - \underbrace{\hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{H}(t) \hat{U}(t, 0)}_{\hat{H}_H(t)} \underbrace{\hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}(t, 0)}_{\hat{A}_H(t)} + i\hbar \hat{U}(t, 0)^\dagger \frac{d\hat{A}(t)}{dt} \hat{U}(t, 0) = \\ &= \hat{A}_H(t) \hat{H}_H(t) - \hat{H}_H(t) \hat{A}_H(t) + i\hbar \left(\frac{d\hat{A}}{dt} \right)_H(t) = \left[\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t) \right] + i\hbar \left(\frac{d\hat{A}}{dt} \right)_H(t) \end{aligned}$$

nella quale, come già accennato in precedenza, si annulla l'ultimo termine allorché l'operatore \hat{A} non abbia esplicita dipendenza temporale.

La trasformazione (2.10) è dipendente dal tempo a causa dell'operatore $\hat{T}(t, 0) = \hat{U}(t, 0)$. Pertanto, può essere immaginata come l'applicazione di un continuo movimento all'intero spazio dei ket. Un ket in quiete diviene così un ket in movimento e, come è visibile, $|\psi(t)\rangle_H = |\psi(0)\rangle$ diventa indipendente da t . D'altronde, un ket inizialmente in movimento, in uno stato di moto indisturbato, diviene un ket in quiete, poiché sostituendo

$$|\psi(t)\rangle = \hat{T}(t, 0) |\psi(0)\rangle$$

all'interno di

$$|\psi(t)\rangle_H = \hat{T}(t, 0)^{-1} |\psi(t)\rangle .$$

si ottiene che $|\psi\rangle_H$ non dipende da t , dunque la trasformazione riduce alla quiete i ket corrispondenti a stati di moto indisturbato.

La rappresentazione di Heisenberg degli operatori, mostrata dall'equazione (2.13), fa sì che un operatore lineare in quiete si trasforma, in generale, in un operatore lineare in movimento. La trasformazione porta così ad un nuovo schema del moto, in cui gli stati corrispondono a vettori in quiete mentre le variabili dinamiche corrispondono ad operatori lineari in movimento, al contrario di quanto visto nella formulazione di Schrödinger, nella quale permaneva la costanza delle quantità osservabili e si aveva la dipendenza temporale degli stati.

Nel contesto della teoria dei campi quantizzati è solitamente preferita l'applicazione di questa rappresentazione.

2.3 La rappresentazione di Dirac o di interazione

È anche possibile costruire una rappresentazione intermedia rispetto alle due precedenti. Supponiamo di conoscere una soluzione approssimata $\hat{U}_0(t, s)$ dell'operatore di evoluzione unitario $\hat{U}(t, s) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-s)}$ ed impostiamo

$$\hat{U} = \hat{U}_0 \hat{U}' . \quad (2.15)$$

Tale operatore, inserito nell'equazione (1.15), porta alla seguente uguaglianza

$$i\hbar \frac{d\hat{U}'}{dt} = \hat{U}_0^\dagger \left(\hat{H}\hat{U}_0 - i\hbar \frac{d\hat{U}_0}{dt} \right) \hat{U}' , \quad (2.16)$$

come è agevolmente verificato qui di seguito

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_0 \hat{U}'}{dt} = i\hbar \hat{U}_0 \frac{d\hat{U}'}{dt} + i\hbar \frac{d\hat{U}_0}{dt} \hat{U}' = \hat{H}\hat{U}_0 \hat{U}' ,$$

considerata l'ultima uguaglianza, moltiplicando entrambi i termini per \hat{U}_0^\dagger , tenendo conto che $\hat{U}_0^\dagger \hat{U}_0$ per unitarietà, e sottraendo ad entrambi $i\hbar \hat{U}_0^\dagger \left(\frac{d\hat{U}_0}{dt} \right) \hat{U}'$.

Con la condizione iniziale $\hat{U}'(s, s) = \hat{1}$, \hat{U}' è soluzione di tale equazione. Come già detto, però, \hat{U}_0 è una soluzione approssimata del problema d'evoluzione, quindi \hat{U}' cambierà lentamente in funzione del tempo, facendo sì che l'equazione (2.16) all'annullamento. Di conseguenza l'operatore $\left(\hat{H}\hat{U}_0 - i\hbar \frac{d\hat{U}_0}{dt} \right)$ si annulla anch'esso.

È ora vantaggioso, oltre che rigoroso, risolvere il problema di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_0}{dt} = \hat{H}_0 \hat{U}_0 , \quad \hat{H}_0(s, s) = \hat{1} \quad (2.17)$$

per \hat{U}_0 , con

$$\hat{H}_0(t) = i\hbar \left(\frac{d}{dt} \hat{U}_0(t, s) \right) \hat{U}_0^\dagger(t, s) \quad (2.18)$$

operatore hermitiano.

Si supponga che \hat{H}_0 sia l'hamiltoniana di un sistema isolato; applicando una piccola perturbazione dipendente dal tempo $\hat{W}(t)$ si ottiene una hamiltoniana totale separabile

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t) \quad (2.19)$$

data dalla somma di due operatori hermitiani, e quindi anch'essa hermitiana.

La scelta

$$\hat{K}(t) = \hat{H}_0 \quad (2.20)$$

definisce una rappresentazione di interazione.

Pertanto, la famiglia unitaria $\hat{T}(t, s)$ è definita attraverso l'operatore di evoluzione

$$\hat{T}(t, s) = \hat{U}_0(t, s) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-s)}. \quad (2.21)$$

La rappresentazione di Dirac dell'insieme dei ket la si scrive quindi

$$|\psi(t)\rangle_D = \hat{U}_0(t, 0)^{-1} |\psi(t)\rangle \quad (2.22)$$

e nella nuova hamiltoniana compare solamente il termine della perturbazione

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(D)}(t) &= \hat{T}(t, 0)^\dagger \left(\hat{H}(t) - \hat{K}(t) \right) \hat{T}(t, 0) = \\ &= \hat{U}_0(t, 0)^\dagger \hat{W}(t) \hat{U}_0(t, 0) = \hat{W}_D(t). \end{aligned} \quad (2.23)$$

L'operatore d'evoluzione associato si può trovare attraverso la relazione non banale

$$\hat{U}^{(D)}(t, s) = \hat{U}_0(t, 0)^\dagger \hat{U}(t, s) \hat{U}_0(s, 0). \quad (2.24)$$

L'equazione di Schrödinger differisce parzialmente da quella usuale. Il sistema di operatori si scrive nell'ormai nota formula

$$\hat{A}_D(t) = \hat{U}_0(t, 0)^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}_0(t, 0), \quad (2.25)$$

invece l'hamiltoniana di Heisenberg equivale alla parte imperturbata dell'hamiltoniana

$$\hat{\mathcal{H}}^{(D)}(t) = \hat{U}_0(t, 0)^\dagger \hat{H}_0 \hat{U}_0(t, 0) = \hat{H}_0 \quad (2.26)$$

dal momento che \hat{H}_0 commuta con $\hat{U}_0(t, s)$.

In generale, possiamo quindi affermare che la rappresentazione di interazione è un ibrido tra le due viste in precedenza, nella quale la parte imperturbata dell'hamiltoniana H_0 , indipendente dal tempo, segue l'equazione di Heisenberg come legge che regola la dinamica, e la perturbazione $\hat{W}(t)$ agisce attraverso l'equazione di Schrödinger, poiché dipende dalla variazione temporale. Le equazioni del moto saranno quindi

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_D = \hat{W}_D(t) |\psi(t)\rangle_D \quad (2.27)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_D(t) = \left[\hat{A}_D(t), \hat{H}_0 \right] + i\hbar \left(\frac{d\hat{A}}{dt} \right)_D (t) \quad (2.28)$$

Proviamo la prima relazione attraverso semplici passaggi algebrici

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_D &= i\hbar \frac{d}{dt} \left(\hat{U}(t, 0)^\dagger |\psi(t)\rangle_S \right) = \\
&= i\hbar \left(\frac{d\hat{U}(t, 0)^\dagger}{dt} |\psi(t)\rangle_S + \hat{U}(t, 0)^\dagger \frac{d|\psi(t)\rangle_S}{dt} \right) = \\
&= -\hat{H}_0 \hat{U}(t, 0)^\dagger |\psi(t)\rangle_S + \hat{U}(t, 0)^\dagger \left(\hat{H}_0 + \hat{W}(t) \right) |\psi(t)\rangle_S = \\
&= \hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{W}(t) \hat{U}(t, 0) \hat{U}(t, 0)^\dagger |\psi(t)\rangle_S = \\
&= \hat{W}_D(t) |\psi(t)\rangle_D .
\end{aligned}$$

La verifica della formula per l'andamento temporale degli operatori è eseguibile con la semplice sostituzione della rappresentazione di Dirac della hamiltoniana di Heisenberg $\hat{\mathcal{H}}^D(t)$ con l'hamiltoniana imperturbata \hat{H}_0 nell'equazione di Heisenberg (1.37), nella quale il ket generico $|\psi(t)\rangle_K = |\psi(t)\rangle_D = \hat{U}_0(t, 0)^{-1} |\psi(t)\rangle_S$.

Capitolo 3

Applicazioni

A prescindere dalla scelta della rappresentazione, vediamo come, anche scegliendo le due formulazioni estreme quali quelle di Schrödinger e di Heisenberg, l'unitarietà della trasformazione assicura l'invarianza degli elementi di matrice

$$\begin{aligned} {}_S\langle\beta, t|\hat{A}_S|\alpha, t\rangle_S &= {}_H\langle\beta|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_H(t)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\alpha\rangle_H = \\ &= {}_H\langle\beta|\hat{A}_H(t)|\alpha\rangle_H, \end{aligned}$$

ed anche per quanto riguarda la rappresentazione di interazione

$$\begin{aligned} {}_D\langle\gamma, t|\hat{A}_D(t)|\epsilon, t\rangle_D &= {}_S\langle\gamma, t|\hat{U}_0(t, 0)\hat{U}_0(t, 0)^\dagger\hat{A}_S\hat{U}_0(t, 0)\hat{U}_0(t, 0)^\dagger|\epsilon, t\rangle_S = \\ &= {}_S\langle\gamma, t|\hat{A}_S|\epsilon, t\rangle_S \end{aligned}$$

gli elementi di matrice sono invariati.

È Inoltre possibile notare la congruenza degli stati fisici e degli operatori al tempo $t = 0$, indipendentemente dalla picture scelta per descrivere il problema

$$|\alpha, 0\rangle_S = |\alpha\rangle_H = |\alpha, 0\rangle_D \quad (3.1)$$

$$\hat{A}_S(0) = \hat{A}_H = \hat{A}_D(0). \quad (3.2)$$

La rappresentazione di Schrödinger è detta anche rappresentazione delle coordinate, poiché la funzione d'onda che descrive lo stato fisico dipende da esse e trasporta le informazioni dinamiche, mentre gli osservabili non influiscono sull'evoluzione nel tempo.

Diversamente, nella rappresentazione di Heisenberg, la dinamica del sistema è associata agli operatori, in quanto sono essi ad essere osservabili e nei problemi considerati spesso non si ha la possibilità di trarre alcuna informazione riguardo agli stati, che risultano quindi "immobili".

La rappresentazione di Dirac, invece, associando la dinamica sia agli operatori, sia ai vettori di stato, è usata soprattutto per la sua convenienza, poiché è statisticamente più improbabile che un problema sia posto in maniera particolare a tal punto da poter considerare una delle due precedenti formulazioni, nonostante a volte si cerchi comunque di ricondurvisi. Operativamente è quindi più duttile la rappresentazione di Dirac, ammesso che l'hamiltoniana del sistema sia separabile.

3.1 Il teorema di Ehrenfest

Il teorema di Ehrenfest mette in relazione la derivata temporale del valore di aspettazione di un osservabile Q al commutatore dell'operatore associato \hat{Q} , per definizione formale autoaggiunto e dipendente dal tempo, con l'hamiltoniana H del sistema.

Tale asserzione è di fondamentale rilevanza dal momento che stabilisce un collegamento tra la meccanica classica e la meccanica quantistica, dimostrando che le leggi del moto seguite dai valori di aspettazione degli operatori, in fisica quantistica, sono le stesse leggi del moto classiche.

L'espressione che sinteticamente esprime tutta l'importanza del teorema è la seguente

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{Q}\rangle = \left\langle \psi \left| \left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{Q} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] \right) \psi \right. \right\rangle. \quad (3.3)$$

È già visibile la somiglianza con l'equazione di Heisenberg, tuttavia, qui di seguito, verrà ricavato attraverso le rappresentazioni di Schrödinger e di Heisenberg, al solo scopo di dimostrare che il risultato non varia, ovviamente, al variare della picture, ma una scelta intelligente ed oculata di essa può rivelarsi uno strumento davvero potente per la semplificazione del problema dal punto di vista matematico.

3.1.1 Derivazione in rappresentazione di Schrödinger

Consideriamo lo stato quantico ψ e calcoliamo esplicitamente la derivata temporale del valore di aspettazione di Q

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\hat{Q}\rangle &= \frac{d}{dt} \int d^3x \psi^* \hat{Q} \psi = \int d^3x \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \hat{Q} \psi + \int d^3x \psi^* \left(\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right) \psi + \int d^3x \psi^* \hat{Q} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \\ &= \int d^3x \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \hat{Q} \psi + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle + \int d^3x \psi^* \hat{Q} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right), \end{aligned}$$

ove gli integrali sono ovviamente da calcolare su tutto \mathcal{H} . Sostituiamo quindi nell'espressione appena ricavata le seguenti relazioni derivanti dall'equazione di Schrödinger, ricordando che gli operatori associati a grandezze osservabili sono hermitiani, quindi $\hat{H}^* = \hat{H}$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi \\ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{H}^* = \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{H} \end{aligned}$$

ed otteniamo la forma definitiva del teorema di Ehrenfest

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{Q}\rangle = -\frac{i}{\hbar} \int d^3x \psi^* \left(\hat{Q} \hat{H} - \hat{H} \hat{Q} \right) \psi + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle,$$

nella quale, a differenza della formula (3.3), non è stato esplicitato il prodotto interno, ma ci si è limitati ad indicare il valore di aspettazione con le parentesi uncinate.

3.1.2 Derivazione in rappresentazione di Heisenberg

Verifichiamo ora, invece, come la rappresentazione di Heisenberg sia più idonea per ricavare il teorema di Ehrenfest attraverso pochi e semplici procedimenti algebrici. Presa l'equazione del moto, ovvero l'equazione di Heisenberg

$$i\hbar \frac{d\hat{Q}_H(t)}{dt} = [\hat{Q}_H(t), \hat{H}_H(t)] + i\hbar \left(\frac{d\hat{Q}}{dt} \right)_H(t)$$

nella quale, successivamente, saranno omissi i pedici indicanti la picture, iniziamo moltiplicando a sinistra per $\langle \psi |$ ed a destra per $|\psi\rangle$

$$i\hbar \langle \psi | \frac{d\hat{Q}(t)}{dt} | \psi \rangle = \langle \psi | [\hat{Q}(t), \hat{H}(t)] | \psi \rangle + i\hbar \langle \psi | \left(\frac{d\hat{Q}(t)}{dt} \right) | \psi \rangle .$$

Si proceda quindi dividendo per $i\hbar$ e portando fuori la derivata temporale dal primo termine, poiché in rappresentazione di Heisenberg gli stati sono indipendenti dal tempo, si ottiene la già citata formula

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{Q}(t) \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{Q}(t)}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{Q}(t), \hat{H}] \rangle$$

con una maggiore facilità rispetto al procedimento del paragrafo precedente.

In realtà, il teorema di Ehrenfest non è altro che il valore di aspettazione dell'equazione di Heisenberg, ed è uno dei supporti matematici al già citato principio di corrispondenza, per la grande somiglianza che intercorre con il Teorema di Liouville della meccanica hamiltoniana, il quale coinvolge le parentesi di Poisson al posto del commutatore.

3.2 Teoria perturbativa dipendente dal tempo

Come punto di partenza per sviluppare una teoria perturbativa si assuma che l'hamiltoniana del sistema preso in esame possa essere separata in due parti distinte

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t), \quad (3.4)$$

ed è quindi immediato riservare la descrizione di essa alla rappresentazione di Dirac, con hamiltoniana

$$\hat{H}^{(D)}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \hat{H}_1(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} = \left(\hat{H}_1 \right)_D(t) = \hat{H}_{1D}(t). \quad (3.5)$$

In questi contesti \hat{H}_0 è tipicamente l'hamiltoniana di un sistema di campi liberi, detta anche hamiltoniana imperturbata, mentre $\hat{H}_1(t)$ è l'energia di perturbazione, supposta dipendente esplicitamente dal tempo, in modo tale che per $\hat{H}_1 = 0$ si è in accordo con la rappresentazione di Heisenberg.

3.2.1 Trattazione generale del problema perturbativo

Come ogni problema evolutivo, indipendentemente dalla rappresentazione, consideriamo una funzione d'onda $\psi(t)$ scriviamo l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\psi(t). \quad (3.6)$$

Si integrino ora entrambi i membri nell'intervallo $[t_0; t]$

$$\int_{t_0}^t i\hbar \frac{\partial \psi(\tau)}{\partial \tau} d\tau = \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau)\psi(\tau) d\tau$$

e, risolvendo il primo termine si ottiene

$$\psi(t) = \psi(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(\tau)\psi(\tau) d\tau. \quad (3.7)$$

Proseguiamo ancora sviluppando ulteriormente il termine integrale

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \psi(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_1 H(\tau_1)\psi(t_0) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 H(\tau_2)\psi(\tau_2) = \\ &= \sum_n \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}(\tau_1) \dots \hat{H}(\tau_n) \psi(t_0). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Questa serie viene anche scritta attraverso il suo termine di convergenza, ovvero l'esponenziale,

$$\psi(t) = \hat{\mathcal{T}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau)} \psi(t_0), \quad (3.9)$$

nella quale l'operatore $\hat{\mathcal{T}}$ è comunemente chiamato operatore di "time ordering" ed ha l'utilità di ordinare gli integrali temporali secondo il corretto ordine d'integrazione, come esplicitato nella formula (3.8).

È subito visibile che la relazione (3.9) somiglia formalmente alla soluzione del problema di Schrödinger, con

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathcal{T}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau)} \quad (3.10)$$

ove possiamo sostituire ad $\hat{H}(t)$ la perturbazione dipendente dal tempo mettendoci quindi nella rappresentazione più idonea, come illustrato nel paragrafo successivo.

3.2.2 Teoria perturbativa in rappresentazione di Dirac

Chiamato $\hat{U}^{(D)}(t, t_0)$ l'operatore d'evoluzione della rappresentazione di Dirac, esso segue, come già visto, l'equazione differenziale

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}^{(D)}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}_{1D}(t) \hat{U}^{(D)}(t, t_0), \quad \hat{U}^{(D)}(t_0, t_0) = \hat{1}, \quad (3.11)$$

la quale equivale formalmente all'equazione integrale

$$\hat{U}^{(D)}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dz \hat{H}_{1D}(z) \hat{U}^{(D)}(z, t_0) \quad (3.12)$$

infatti, avvalendosi del teorema fondamentale del calcolo integrale, è subito visibile che

$$\begin{aligned}\hat{U}^{(D)}(t, t_0) - \hat{1} &= \hat{U}^{(D)}(t, t_0) - \hat{U}^{(D)}(t_0, t_0) = \int_{t_0}^t dz \frac{\partial \hat{U}^{(D)}(z, t_0)}{\partial z} = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dz \hat{H}_{1D}(z) \hat{U}^{(D)}(z, t_0)\end{aligned}$$

e tale definizione di $\hat{U}^{(D)}(t, t_0)$ soddisfa a sua volta l'equazione (3.11).
Assumendo che l'operatore di evoluzione sia espandibile in serie nella forma

$$\hat{U}^{(D)}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{U}_n^{(D)}(t, t_0) \quad (3.13)$$

è possibile approssimarlo soffermandosi ai primi termini dell'espansione. Tali termini, per mezzo dell'equazione integrale appena sviluppata, sono scritti

$$\hat{U}_0^{(D)}(t, t_0) = \hat{1} \quad (3.14)$$

$$\hat{U}_n^{(D)}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dz \hat{H}_{1D}(z) \hat{U}_{n-1}^{(D)}(z, t_0), \quad n \geq 1. \quad (3.15)$$

Più in generale, come già visto per la (3.8), scriviamo, in maniera più abbreviata

$$\hat{U}^{(D)}(t, t_0) = \sum_n \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dz_1 \int_{t_0}^{z_1} dz_2 \dots \int_{t_0}^{z_{n-1}} dz_n \hat{H}_{1D}(z_1) \hat{H}_{1D}(z_2) \dots \hat{H}_{1D}(z_n), \quad (3.16)$$

meglio nota come *serie di Dyson*.

Viene considerata accurata l'approssimazione nella quale

$$\left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dz h_1(z) \right| \ll 1, \quad (3.17)$$

presa una funzione numerica arbitraria $h_1(z)$ che caratterizzi l'ordine di grandezza della perturbazione $\hat{H}_1(t)$ ad ogni istante di tempo t .

Fatte le dovute premesse, è conveniente esprimere \hat{H}_0 in rappresentazione di Heisenberg, quindi, preso un $\{\hat{\alpha}_j\}$ insieme completo di operatori autoaggiunti commutanti con \hat{H}_0 , si può esprimere quest'ultimo come funzione degli $\{\hat{\alpha}_j\}$

$$\hat{H}_0 = h_0(\hat{\alpha}). \quad (3.18)$$

Inoltre è definita $|\alpha\rangle$ come una base ortonormale completa di autoket simultanei di un qualsivoglia $\hat{\alpha}_j$, tale che

$$\hat{\alpha}_j |\alpha\rangle = |\alpha\rangle \alpha_j, \quad (3.19)$$

e valgono le già citate relazioni di ortonormalità e completezza, che scriviamo

$$\langle \alpha' | \alpha \rangle = \delta_{\alpha'_d, \alpha_d} \delta(\alpha'_c - \alpha_c) \quad (3.20)$$

$$\hat{1} = \sum_{\alpha_d} \int d\alpha_c |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad (3.21)$$

oltre alla relazione agli autovalori

$$\hat{H}_0 |\alpha\rangle = |\alpha\rangle h_0(\alpha). \quad (3.22)$$

Uno degli obiettivi principali della meccanica quantistica è il calcolo delle probabilità di transizione di una particella ad uno stato energetico diverso da quello in cui si trova inizialmente. La probabilità che la misura degli osservabili corrispondente agli operatori $\hat{\alpha}_j$ dia, al tempo t il risultato α'_j è semplicemente

$$P(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) = \left| \mathcal{A}(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) \right|^2, \quad (3.23)$$

dove abbiamo chiamato $\mathcal{A}(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t)$ ampiezza di probabilità

$$\mathcal{A}(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) = {}_D\langle \alpha'(t) | \hat{U}^{(D)}(t, t_0) | \alpha(t_0) \rangle_D. \quad (3.24)$$

Fondamentalmente, sfruttando le caratteristiche della la Dirac-picture, possiamo esprimere più semplicemente tale probabilità

$$P(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) = \left| \mathcal{A}_D(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) \right|^2, \quad (3.25)$$

dove l'ampiezza di probabilità presa in esame è

$$\mathcal{A}_D(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) = \langle \alpha' | \hat{U}^{(D)}(t, t_0) | \alpha \rangle. \quad (3.26)$$

Potendo infatti esprimere gli stati come

$$\begin{aligned} |\alpha(t_0)\rangle_D &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_0} |\alpha\rangle = |\alpha\rangle e^{\frac{i}{\hbar}h_0(\alpha)t_0} \\ {}_D\langle \alpha'(t) | &= \langle \alpha' | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_0} = e^{-\frac{i}{\hbar}h_0(\alpha')t_0} \langle \alpha' | \end{aligned}$$

l'ampiezza $\mathcal{A}_D(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t)$, in modulo quadro, risulterà, come visto in precedenza

$$\begin{aligned} \left| {}_D\langle \alpha'(t) | \hat{U}^{(D)}(t, t_0) | \alpha(t_0) \rangle_D \right|^2 &= \left| e^{-\frac{i}{\hbar}h_0(\alpha')t_0} \langle \alpha' | \hat{U}^{(D)}(t, t_0) | \alpha \rangle e^{\frac{i}{\hbar}h_0(\alpha)t_0} \right|^2 = \\ &= \left| \langle \alpha' | \hat{U}^{(D)}(t, t_0) | \alpha \rangle \right|^2. \end{aligned}$$

Lo sviluppo perturbativo dell'operatore d'evoluzione, per la rappresentazione di interazione, produce un'ampiezza di transizione

$$\mathcal{A}_D(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{A}_{Dn}(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t), \quad (3.27)$$

nella quale

$$\mathcal{A}_{Dn}(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) = \langle \alpha' | \hat{U}_n^{(D)}(t, t_0) | \alpha \rangle \quad (3.28)$$

è l'elemento di matrice che indica l'ordine n dell'energia di perturbazione $\hat{H}_1(t)$.

Ricordando lo sviluppo dell'operatore d'evoluzione secondo le equazioni (3.14) e (3.15), e la relazione di completezza (3.21), oltre alla relazione agli autovalori (3.22), vediamo che,

dopo qualche iterazione, esprimiamo quest'ultima espansione dell'ampiezza di probabilità più apertamente

$$\mathcal{A}_{D_0}(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) = \langle \alpha' | \hat{1} | \alpha \rangle = \delta_{\alpha', \alpha} \delta(\alpha' - \alpha) \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{D_n}(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \sum_{\alpha_{d_1}} \int d\alpha_{c_1} \sum_{\alpha_{d_2}} \int d\alpha_{c_2} \cdots \sum_{\alpha_{d_{n-1}}} \int d\alpha_{c_{n-1}} \\ &\times \int_{t_0}^t dz_1 \int_{t_0}^{z_1} dz_2 \cdots \int_{t_0}^{z_{n-1}} dz_n e^{i\omega(\alpha', \alpha_1)z_1 + i\omega(\alpha_1, \alpha_2)z_2 + \cdots + i\omega(\alpha_{n-1}, \alpha)z_n} \\ &\times \langle \alpha' | \hat{H}_1(z_1) | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | \hat{H}_1(z_2) | \alpha_2 \rangle \cdots \langle \alpha_{n-1} | \hat{H}_1(z_n) | \alpha \rangle, \quad n \geq 1, \end{aligned} \quad (3.30)$$

ove abbiamo esplicitato la frequenza di Bohr per la transizione $\alpha \rightarrow \alpha'$

$$\omega(\alpha', \alpha) = \frac{h_0(\alpha') - h_0(\alpha)}{\hbar}, \quad (3.31)$$

corrispondente alla frequenza di vibrazione di una particella che passa da uno stato quantico $|\alpha\rangle$ di energia $h_0(\alpha)$ ad uno stato quantico $|\alpha'\rangle$ di energia $h_0(\alpha')$.

Di nuovo, come per la serie di Dyson, riscriviamo anche l'ampiezza di probabilità con un sviluppo del tutto generale

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{D_n}(\alpha \rightarrow \alpha'; t_0, t) &= \sum_n \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \sum_{\alpha_{d_1}} \int d\alpha_{c_1} \sum_{\alpha_{d_2}} \int d\alpha_{c_2} \cdots \sum_{\alpha_{d_{n-1}}} \int d\alpha_{c_{n-1}} \\ &\times \int_{t_0}^t dz_1 \int_{t_0}^{z_1} dz_2 \cdots \int_{t_0}^{z_{n-1}} dz_n e^{i\omega(\alpha', \alpha_1)z_1 + i\omega(\alpha_1, \alpha_2)z_2 + \cdots + i\omega(\alpha_{n-1}, \alpha)z_n} \\ &\times \langle \alpha' | \hat{H}_1(z_1) | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | \hat{H}_1(z_2) | \alpha_2 \rangle \cdots \langle \alpha_{n-1} | \hat{H}_1(z_n) | \alpha \rangle. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Attraverso un'applicazione accurata delle rappresentazioni più idonee al problema perturbativo, si è potuta ricavare una formula generale, approssimata all' n -esimo ordine perturbativo, per il calcolo della probabilità di transizione. Nulla vieta infatti di risolvere tale problema perturbativo attraverso la rappresentazione di Schrödinger, ponendo la dipendenza temporale in una funzione d'onda $\psi(q, t)$, rappresentata anch'essa attraverso un insieme completo di autofunzioni dell'energia, e sviluppandola in serie

$$\psi(q, t) = \sum_k a_k(t) \psi_k(q) e^{-\frac{i}{\hbar} h_{0k} t}, \quad (3.33)$$

da cui, brevemente, la probabilità di transizione è

$$P_{mn}(t) = |\langle \psi_m(q) | \psi(q, t) \rangle|^2 = |a_m(t)|^2, \quad (3.34)$$

nella quale non è stato esplicitato il termine $a_m(t)$, ricavabile attraverso lo sviluppo in ordini perturbativi.

La trattazione formale sarebbe differente, sebbene il problema sia il medesimo e porti ad una soluzione compatibile con le approssimazioni compiute.

3.3 La matrice di scattering

Nella teoria quantistica e nella teoria dei campi, si definisce matrice di scattering, o semplicemente matrice \mathcal{S} , l'insieme di tutte le ampiezze delle transizioni possibili fra stati iniziali $|i\rangle$ e stati finali $|f\rangle$ dei processi di diffusione.

Una definizione rigorosa della matrice \mathcal{S} è determinata attraverso la rappresentazione di interazione, in maniera simile a quanto già illustrato per quanto riguarda la teoria perturbativa.

Diciamo un generico stato $|\psi\rangle$ è legato allo stato imperturbato $|\psi_0\rangle$ attraverso la trasformazione unitaria

$$|\psi\rangle = \mathcal{S} |\psi_0\rangle . \quad (3.35)$$

Trattiamo dunque \mathcal{S} come una matrice di trasformazione canonica che diagonalizza l'hamiltoniana H . Deduciamo immediatamente che lo stato iniziale $|\psi_0\rangle$ è un autostato dell'hamiltoniana trasformata

$$\tilde{H} = \mathcal{S}^\dagger H \mathcal{S} = \mathcal{S}^\dagger (H_0 + H_1) \mathcal{S} . \quad (3.36)$$

Poiché abbiamo supposto che \mathcal{S} sia unitaria, allora possiamo scriverla nella forma

$$\mathcal{S} = e^{i\mathcal{W}} , \quad (3.37)$$

con l'operatore \mathcal{W} ancora ignoto. Contrariamente a quanto fatto prima, sviluppiamo in serie quest'ultima espressione esponenziale e reimmettiamola nella (3.36), ottenendo lo sviluppo

$$\tilde{H} = H_0 + H_1 + i [H_0, \mathcal{W}] + i [H_1, \mathcal{W}] + \frac{1}{2} i^2 [[H_0, \mathcal{W}], \mathcal{W}] + \frac{1}{2} i^2 [[H_1, \mathcal{W}], \mathcal{W}] + \dots$$

il quale verrà semplificato scegliendo \mathcal{W} in maniera tale che

$$H_1 + i [H_0, \mathcal{W}] = 0 . \quad (3.38)$$

Il risultato, approssimato all'ordine dei termini quadratici in H_1 , è il seguente operatore diagonale

$$\tilde{H} \approx H_0 + \frac{i}{2} [H_1, \mathcal{W}] . \quad (3.39)$$

Nei casi più elementari il problema è risolto semplicemente attraverso la serie ordinaria che, nella rappresentazione considerata con l'assunzione (3.38), porta all'equazione

$$\langle \psi_n | H_1 | \psi_m \rangle + i \langle \psi_n | (H_0 \mathcal{W} - \mathcal{W} H_0) | \psi_m \rangle = 0 \quad (3.40)$$

con la altrettanto semplice soluzione

$$i \langle \psi_n | \mathcal{W} | \psi_m \rangle = \frac{\langle \psi_n | H_1 | \psi_m \rangle}{h_n - h_m} \quad (3.41)$$

per gli elementi della matrice di trasformazione \mathcal{W} , e di conseguenza della matrice \mathcal{S} . Utilizzata nell'equazione approssimata (3.39) precedentemente trovata si trova una matrice i cui elementi diagonali sono le espressioni usuali per l'energia al secondo ordine perturbativo. Questa tecnica è particolarmente vantaggiosa quando serve diagonalizzare

solo una parte dell'hamiltoniana.

Operativamente è forse più applicata la cosiddetta matrice di transizione \mathcal{T} , definita

$$\mathcal{T} = 1 - \mathcal{S} \quad (3.42)$$

con la quale vengono rimossi dalla matrice \mathcal{S} gli stati non diffusi che avrebbero solamente portato ad una banale identità.

Gli elementi della matrice \mathcal{T} , nella fattispecie, corrispondono alla ampiezza di probabilità tra lo stato iniziale e finale dei sistemi. Simbolicamente

$$P(i \rightarrow f) = |\langle f | \mathcal{T} | i \rangle|^2 \delta(h_f - h_i) \quad (3.43)$$

indica la probabilità tra due stati, quello iniziale $|i\rangle$, di energia h_i , e quello finale $|f\rangle$, di energia h_f . Quest'ultima relazione è molto applicata a livello sperimentale per i problemi di collisione.

Conclusioni

Dopo aver analizzato le rappresentazioni sia storicamente, con la disputa all'alba della meccanica quantistica, sia matematicamente, con la trattazione dell'evoluzione temporale degli stati (Schrödinger picture), degli operatori (Heisenberg picture), o di entrambi (Dirac picture), sono state considerate alcune loro applicazioni collegate a problemi standard della teoria dei quanti, come, ad esempio, la teoria perturbativa.

Come già accennato nei capitoli precedenti, si trovano applicazioni anche negli sviluppi delle successive teorie fisiche.

Un esempio valido è dato dalla teoria dei campi, ovvero la teoria che, non solo cronologicamente, ma anche concettualmente, succede alla meccanica quantistica. In particolare, in elettrodinamica quantistica, abbreviata Q.E.D. (*quantum electrodynamics*), la prima teoria di campo sviluppata, nonché la più semplice, si trova perfetto accordo con gli esperimenti. I problemi di elettrodinamica quantistica sono sempre sviluppabili perturbativamente e la teoria può essere facilmente quantizzata.

L'operatore di evoluzione $U(t, t_0)$, in elettrodinamica quantistica, è ottenuto attraverso la rappresentazione di interazione, nella quale l'evoluzione è dettata dalla sola hamiltoniana di interazione, e si esprime come nella formula (3.10) con un procedimento del tutto analogo a quello della matrice di scattering \mathcal{S} . L'ampiezza di probabilità, sottintesa in rappresentazione di Dirac, sarà quindi espressa attraverso la già nota relazione

$$\mathcal{A}(\alpha_i \rightarrow \alpha_f; t_0, t) = \langle \alpha_f | \hat{U}(t, t_0) | \alpha_i \rangle .$$

Sebbene in meccanica quantistica sia utilizzata più frequentemente la meccanica ondulatoria, con la risoluzione del problema di Schrödinger per una funzione d'onda $\psi(\mathbf{q}, t)$, perlomeno finché non si inizia a dover compiere sviluppi perturbativi, la presenza della meccanica matriciale ha contribuito allo sviluppo, ed anche al parziale superamento, della teoria per la quale era stata creata, non solo dal punto di vista strettamente fisico-matematico, ma anche dal punto di vista concettuale, permettendo di potersi occupare anche dei problemi per i quali non si era tenuti a conoscere gli stati fisici.

Come tutta la storia della meccanica quantistica, a partire dall'astio tra gli scienziati che si sono impegnati per lo sviluppo della stessa fino all'incredibile accordo delle previsioni teoriche con i risultati sperimentali, così anche per le diverse formulazioni della teoria, nonostante le apparenti incompatibilità, non ne esiste una univoca applicabile in maniera del tutto generale, ma conviene, a seconda dei casi, sapere quale è maggiormente idonea, e le rappresentazioni stesse saranno poi il punto di partenza per nuove teorie fisiche.

Appendice A

Principi e Teoremi

Questa sezione ha lo scopo di riportare l'enunciato, ed eventuale dimostrazione, dei principi e dei teoremi citati nell'elaborato.

A.1 Principio di Indeterminazione

Il principio, enunciato nel 1927 dal fisico tedesco Werner Karl Heisenberg, esprime l'impossibilità di determinare contemporaneamente, vanificandone le incertezze, la posizione e la quantità di moto di una particella elementare, ovvero Δx e Δp non possono essere allo stesso tempo arbitrariamente piccoli. Di seguito è riportata una delle espressioni usata per formalizzarlo:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Nonostante la grande valenza teorica, il principio si basa su un presupposto essenzialmente sperimentale, quale l'impossibilità di misurare simultaneamente, con la dovuta precisione, due grandezze correlate.

La memoria in cui Heisenberg introduce tale principio è intitolata *Sul contenuto anschaulich della cinematica e della meccanica teoriche quantistiche*, e segue di un mese esatto una lettera scritta a Pauli il 23 febbraio 1927, nella quale esponeva con marcato entusiasmo i punti salienti del suo operato.

A.2 Principio di Corrispondenza

Principio la cui formulazione è attribuita a Bohr nel 1923:

la meccanica quantistica deve concordare con la meccanica classica nelle condizioni sotto le quali è risaputo che la fisica classica fornisce una descrizione accurata dei fenomeni fisici.

Tale affermazione consente, allo stesso tempo, un metodo per costruire la teoria quantistica e un modo per verificare la sua consistenza. La definizione è del tutto generale e quindi la applicabilità di esso non prettamente ristretta al contesto in cui è stata utilizzata. Il procedimento matematico più comune da considerarsi è, operativamente, $\lim \hbar \rightarrow 0$.

A.3 Teorema Spettrale

È qui di seguito enunciato il teorema in modo del tutto generale, mentre ove citato era presente una formulazione differente con l'ipotesi di uno spettro totalmente discreto.

È possibile definire la funzione $f(\hat{A})$ di un operatore autoaggiunto \hat{A} , per ogni funzione numerica $f(x)$, completamente caratterizzata come un operatore lineare tale che, per la base ortonormale generalizzata scelta $\{|\phi_{a\alpha}\rangle\}$ di autofunzioni di \hat{A} , $|\phi_{a\alpha}\rangle$ è autofunzione di $f(\hat{A})$ con autovalore $f(x_{a\alpha})$,

$$f(\hat{A}) |\phi_{a\alpha}\rangle = |\phi_{a\alpha}\rangle f(x_{a\alpha}).$$

Una volta fissata la base $\{|\phi_{a\alpha}\rangle\}$, possiamo esprimere il teorema spettrale, come l'espansione di $f(\hat{A})$ su di essa

$$f(\hat{A}) = \sum_a \int \frac{d\alpha}{K_a(\alpha)} |\phi_{a\alpha}\rangle f(x_{a\alpha}) \langle\phi_{a\alpha}|$$

con $K_a(\alpha)$ opportuna costante di normalizzazione.

Bibliografia

- [1] Gamow G., *Trent'anni che sconvolsero la fisica*, Bologna, Zanichelli, 1966
- [2] Feynman R. P., *The Character of Physics Law*, MIT Press, 1967
- [3] Fine A., *The Shaky Game: Einstein, Realism and Quantum Theory*, University of Chicago Press, 1986
- [4] Pais A., *Niels Bohr's Times: In Physics, Philosophy and Polity*, Oxford University Press, 1991
- [5] French A.P., *Principles of Modern Physics*, John Wiley & Sons, London-Sidney, 1966
- [6] Cassidy D. C., *Uncertainty: The Life and Science of Werner Heisenberg*, W. H. Freeman and Company, 1991
- [7] Moore W. J., *Schrödinger: Life and Thought*, Cambridge University Press, 1989
- [8] Cassidy D. C., *Le Scienze n. 287*, 70-78, luglio 1992
- [9] PDG, *Particle Physics Booklet*, July 2010
- [10] Dirac P.A.M., *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, 1958
- [11] I testi di riferimento considerati per la stesura del contenuto e degli approfondimenti dei Capitoli 1, 2, 3, e per i dettagli più tecnici, sono
 - Dirac P.A.M., *I principi della meccanica quantistica*, Bollati Boringhieri, 1976
 - Greiner W., *Quantum Mechanics - An Introduction*, Fourth Edition, Springer, 2001
 - Greiner W., Reinhardt J., *Field Quantization*, Springer, 1996
 - Mandl F., Shaw G., *Quantum Field Theory*, John Wiley & Sons, 1986
 - Messiah A., *Quantum Mechanics*, Vol. I-II, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1961
 - Ziman J., *Elements of Advanced Quantum Theory*, Cambridge University Press, 1969
 - Zucchini R., *Lectures Notes - Quantum Mechanics*, 2013

Ringraziamenti

Un particolare e sentito ringraziamento al mio relatore, il professor Fabio Ortolani, per la grande disponibilità che ha sempre dimostrato e per il tempo dedicatomi.

Ringrazio la mia famiglia, i miei genitori, Paola e Fulvio, le mie sorelle, Diana e Linda, la nonna Marisa, lo zio Davide, e tutti coloro che mi sono stati vicini.

Ringrazio tutti i miei compagni di corso, che mi hanno supportato e sopportato ogni giorno, durante le lezioni e lo studio.

Ringrazio Sara, la mia dolce metà.

Ringrazio tutti i professori che hanno saputo trasmettermi qualcosa con la loro passione e le loro competenze.