

Capitolo 1

Campi di spostamento e onde elastiche

1.1 Introduzione

La teoria dei campi nasce per sopprimere all'impossibilità tecnica della meccanica quantistica di gestire sistemi con un numero molto grande (o al limite, infinito) di gradi di libertà. Se consideriamo ad esempio sistemi costituiti da un numero di elementi interagenti dell'ordine del numero Avogadro, le eccitazioni di un singolo elemento può tradursi in eccitazioni collettive come onde elastiche e sonore, alle quali come vedremo sarà associato un campo, detto *campo di spostamento*. A basse temperature, dalla quantizzazione di questo campo, otterremo una descrizione particellare che darà luogo al concetto di *fonone*. Un discorso analogo verrà fatto per il campo elettromagnetico, la cui quantizzazione darà luogo al *fotone*.

1.2 Onde elastiche unidimensionali

Consideriamo una catena lineare, costituita da N atomi collegati da 'molle', e chiusa su se stessa con condizione di bordo periodica: l'atomo $(N + 1)$ -esimo coincide con il primo. Gli atomi hanno tutti massa m , le molle hanno tutte costante elastica c , e la distanza che separa due atomi con le molle a riposo è a (FIGURA). Le variabili del sistema saranno gli spostamenti dei singoli atomi dalla loro posizione di equilibrio x_0 , definiremo allora delle variabili $u_i = x_i(t) - x_0$. La lagrangiana del sistema è:

$$L = T - V = \frac{1}{2}m \sum_{i=1}^N \dot{u}_i^2 - \frac{1}{2}c \sum_{i=1}^N (u_i - u_{i+1})^2$$

Le equazioni del moto si ottengono dalle equazioni di Eulero-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_i} = \frac{\partial L}{\partial u_i}$$

che in questo caso restituiscono:

$$m\ddot{u}_i = -c(u_i - u_{i-1} + u_i - u_{i+1})$$

Il modello è molto particolare, date le ipotesi sotto le quali è costruito:

- **Armonicità del moto:** la lagrangiana è quadratica negli spostamenti, e le equazioni del moto sono lineari. Stiamo trascurando quindi tutti i termini di ordine maggiore di 3 (approssimazione di *piccoli spostamenti*)
- Stiamo trascurando eventuali **forze di richiamo**, ovvero un termine aggiuntivo della forma:

$$V_{richiamo} = -\frac{1}{2}m\omega_0^2 \sum_{i=1}^N u_i^2$$

Questo termine è tipico di particelle cariche in reticolo cristallino, poichè esse tendono a conservare la loro posizione. Il coefficiente ω_0 ha le dimensioni di una velocità angolare, ed è pari a zero nel caso di *onde longitudinali* o di onde di pressione, mentre è diverso da 0 nel caso di *onde di plasma*.

- Le forze agiscono solo tra atomi adiacenti (**interazione tra primi vicini**).

Il fatto che le equazioni di moto siano in numero elevato (N) e siano accoppiate tra loro, complica la risoluzione del sistema. Assumeremo per il generico spostamento u_j una forma del tipo:

$$u_j = \text{Re}[A(t)e^{i\chi j}] = A(t)e^{i\chi j} + c.c.$$

in questo modo si ha:

$$u_{j+1} = A(t)e^{i\chi(j+1)} = e^{i\chi}u_j$$

$$u_{j-1} = A(t)e^{i\chi(j-1)} = e^{-i\chi}u_j$$

Le equazioni di moto si riscrivono:

$$m\ddot{A}(t)e^{i\chi j}u_j = -c(1-e^{i\chi}+1-e^{-i\chi})A(t)e^{i\chi j}u_j \Rightarrow m\ddot{A}(t)e^{i\chi j} = -c(1-e^{i\chi}+1-e^{-i\chi})A(t)e^{i\chi j} = -2c(1-\cos(\chi))$$

dunque

$$\ddot{A}(t) = -\frac{2c}{m}(1-\cos(\chi))A(t) \Rightarrow A(t) = A(0)e^{-i\omega_\chi t}$$

Allora possiamo riscrivere lo spostamento u_j come:

$$u_j = \text{Re}[A(t)e^{i\chi j}] = A(0)e^{i\chi j}e^{-i\omega_\chi t} + c.c.$$

dove ω_χ è definito da:

$$\omega_\chi^2 = \frac{2c}{m}(1-\cos(\chi)) = 4\frac{c}{m}\sin^2\left(\frac{\chi}{2}\right)$$

La precedente relazione prende il nome di *relazione di dispersione* del sistema, e gli ω_k vengono detti *modi normali*. Osserviamo che la condizione di bordo periodica ha come conseguenza che $e^{i\chi N} = 1$, dunque χN deve essere un multiplo di 2π :

$$\chi N = 2\pi n \Rightarrow \chi = \frac{2\pi}{N}n$$

dunque supponendo il sistema come *circolare* abbiamo ottenuto la quantizzazione di χ . Atomi i cui χ differiscono per un multiplo di 2π coincidono, dunque alla fine avremo soltanto N soluzioni indipendenti. Possiamo quindi limitarci alla prima zona di Brillouin: nel caso N sia pari avremo $n = -\frac{N}{2}, -\frac{N-1}{2}, \dots, 0, \dots, \frac{N-1}{2}$, nel caso N sia dispari invece non abbiamo $n = 0$ e avremo $n = -\frac{N-1}{2}, -\frac{N-3}{2}, \dots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{N-3}{2}, \frac{N-1}{2}$, ovvero in entrambi i casi N interi diversi (N modi totali).

Per studiare l'evoluzione temporale del sistema è necessario sapere le condizioni iniziali $u_i(0)$, $\dot{u}_i(0)$, dalle quali è possibile ricavare le ampiezze iniziali dei modi propri, $A(0)$.

La trattazione eseguita finora è riferita al caso di onde elastiche longitudinali (\rightarrow *onde di pressione*), e ce ne possiamo accorgere facendo il **limite continuo**:

- $N \rightarrow \infty$
- $a \rightarrow 0$
- $Na = L$ (costante)

Nel limite continuo effettueremo i seguenti cambiamenti:

- definiamo una densità di massa $\mu = \frac{m}{a}$, e imponiamo che sia finita, dunque se $a \rightarrow 0$ anche $m \rightarrow 0$;
- sostituiamo la costante elastica c con il *parametro di compressibilità* $K = ca$, e imponiamo che $c \rightarrow \infty$ come $\frac{1}{a}$ in modo che anche K sia finito;
- riscriviamo lo spostamento del j -esimo atomo come (indichiamo con $x_j = ja$ la posizione): $u_j(t) \equiv u(x_j, t) \rightarrow u(x, t)$;
- $\lim_{a \rightarrow 0} \frac{u(x_{j+1}) - u(x_j)}{a} = \frac{\partial u}{\partial x}$;

Le equazioni del moto si trasformano in questo modo:

$$\begin{aligned} a\mu\ddot{u}(a_j) &= -\frac{K}{a}(u(x_j) - u(x_{j+1}) + u(x_j) - u(x_{j-1})) \\ \Rightarrow \mu\ddot{u}(a_j) &= \frac{K}{a}\left(\frac{\Delta u_{j+1}}{a} - \frac{\Delta u_j}{a}\right) \end{aligned}$$

Quando $a \rightarrow 0$, si ha

$$\mu\ddot{u}(x) = K \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}$$

che è un'equazione di d'Alembert unidimensionale, e descrive il moto di onde elastiche all'interno della catena, che si propagano con velocità $v = \sqrt{\frac{K}{\mu}}$. Il parametro χ nel

limite continuo e nella prima zona di Brillouin assume valori compresi tra $-\pi$ e π , e viene sostituito anch'esso dal parametro $k = \frac{\chi}{a}$ che assume il significato di *numero d'onda*. La relazione di dispersione si riscrive come:

$$\omega_\chi \rightarrow \omega_k = 4 \frac{K}{\mu a^2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

e nel limite $a \rightarrow 0$:

$$\omega_k = 4 \frac{K}{\mu a^2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \rightarrow 4 \frac{K}{\mu} \frac{k^2}{4a^2} a^2 = \frac{K}{\mu} k^2 \equiv v^2 k^2$$

Osserviamo dunque che nel limite continuo la relazione di dispersione è *non dispersiva*.

1.2.1 Formalismo lagrangiano ed equazioni di Eulero-Lagrange nel continuo

La lagrangiana nel limite continuo si scrive:

$$L = \frac{1}{2} \mu a \sum_j (\dot{u}(x_j, t))^2 - \frac{1}{2} \frac{K}{a} \sum_j (u(x_j + a, t) - u(x_j, t))^2 \rightarrow L = \frac{1}{2} \mu \int_0^L dx \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right]^2 - \frac{1}{2} K \int_0^L dx \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right]^2$$

Osserviamo che è possibile introdurre il concetto di *densità lagrangiana*, ovvero un oggetto della forma:

$$\mathfrak{L} = \frac{1}{2} \mu \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right]^2 - \frac{1}{2} K \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right]^2$$

tale che la lagrangiana vera e propria si ottiene integrando \mathfrak{L} sul volume del sistema:

$$L = \int_0^L dx \mathfrak{L}$$

Nel caso ci interessasse descrivere eccitazioni come onde di plasma, o fononi ottici, sarà necessario reintrodurre il termine ω_0 , e la lagrangiana dovrà essere modificata per contenere un termine di richiamo rispetto alle posizioni di equilibrio:

$$L \rightarrow L' = L - \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 \int_0^L dx (u(x, t))^2$$

Inoltre, nel limite continuo è necessario modificare le equazioni di Eulero-Lagrange per sistemi discreti che abbiamo usato finora, poichè nella lagrangiana non compaiono più soltanto le variabili u e le loro derivate temporali, ma compaiono anche derivate spaziali. Introduciamo l'azione:

$$A = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^L dx \mathfrak{L}(u, \dot{u}, \partial_x u, t)$$

Le equazioni di Eulero-Lagrange per il caso continuo sono ottenute come al solito imponendo la stazionarietà di A nella classe dei moti variati sincroni che conservano le configurazioni

del sistema all'istante iniziale e finale, e ai bordi del sistema: $\delta u(x, t) = 0$ per $t = t_1, t_2$ e $x = 0, L$. Per l'azione si può dunque scrivere:

$$0 = \delta A = \int_0^L \int_{t_1}^{t_2} dx dt \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} \delta u + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \delta(\dot{u}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_x u} \delta(\partial_x u) \right)$$

Possiamo scambiare l'ordine delle derivate nelle variazioni delle derivate di u :

$$\delta(\dot{u}) \equiv \partial_t(\delta u)$$

$$\delta(\partial_x u) \equiv \partial_x(\delta u)$$

dopodichè utilizziamo le seguenti uguaglianze:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \delta(\dot{u}) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \delta u \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \right) \delta u$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x u)} \delta(\partial_x u) = \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x u)} \delta u \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x u)} \right) \delta u$$

I termini $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \delta u \right)$ e $\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x u)} \delta u \right)$ si integrano immediatamente e non danno contributo, perchè δu si annulla agli estremi temporali e ai bordi. L'integrale si riscrive:

$$0 = \delta A = \int_0^L \int_{t_1}^{t_2} dx dt \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x u)} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} \right) \right] \delta u$$

per l'arbitrarietà di δu , affinché l'integrale si annulli è necessario che sia identicamente nullo il termine in parentesi quadra:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} - \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x u)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} = 0$$

Tale condizione ci permette di scrivere le equazioni di Eulero-Lagrange nel caso continuo:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} = \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_x u)} + \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}}$$

Esercizio: verificare che con le equazioni di Eulero-Lagrange nel caso continuo l'equazione del moto è l'equazione di d'Alembert

$$\mu \ddot{u} - K \partial_x^2 u = 0$$

Osservazioni:

- nel caso sia presente anche il termine di richiamo, l'equazione del moto diventa:

$$\ddot{u} = \omega_0^2 u + v^2 \partial_x^2 u$$

- In caso il sistema non sia unidimensionale, si può verificare che le equazioni di Eulero-Lagrange assumono la forma:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u^j} = \sum_i \frac{d}{dx^i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i u^j)} + \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}^j}$$

1.2.2 Sviluppo in modi propri

Cerchiamo adesso una soluzione più generale del sistema considerato. Il significato dei modi normali infatti è il seguente: se il sistema sta oscillando con una frequenza $\omega = \pm\omega_k = \pm 2\frac{v}{a} \sin(\frac{|k|a}{2})$, continuerà ad oscillare con tale frequenza per un tempo indefinito. In generale però, le oscillazioni del sistema saranno una sovrapposizione di più modi normali, dunque l'evoluzione sarà data da:

$$\vec{u}_N(t) = \sum_k (A_k e^{-i\omega_k t} + B_k e^{i\omega_k t}) \vec{u}^{(k)}$$

dove $\vec{u}^{(k)}$ è un vettore N -dimensionale le cui componenti sono date da:

$$u_j^{(k)} = C e^{ikx_j} = C e^{i\frac{2\pi n}{Na} x_j} \equiv e^{i\frac{2\pi n}{N} j}$$

Osservazioni:

- Nella scelta dei modi propri ci limitiamo a quelli nella prima zona di Brillouin ($k = \frac{2\pi}{L}n$, con $(n \leq \frac{N}{2})$, dunque $-\pi < ka < \pi$):

$$\sum_k \equiv \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}}$$

- Poichè lo spostamento $\vec{u}_N(t)$ deve essere reale, si deve avere

$$\vec{u}_N(t) = \vec{u}_N^*(t) \Rightarrow B_k = A_{-k}^*$$

Inoltre, poichè la prima zona di Brillouin è simmetrica, possiamo mandare A_{-k}^* in A_k^* .

- Lo sviluppo in serie è possibile poichè gli $u^{(k)}$ costituiscono un insieme ortonormale completo: scegliendo come costante di normalizzazione $C = \frac{1}{\sqrt{N}}$ si ottiene:

$$\vec{u}^{(k)} \cdot \vec{u}^{(k')} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(k-k')x_j} = \sum_{j=1}^N e^{i\frac{2\pi}{N}(n-n')j} = \delta_{n,n'}$$

La completezza segue dalla relazione:

$$\sum_k (u_j^{(k)})^* u_l^{(k)} \equiv \sum_n e^{i\frac{2\pi}{N}n(l-j)} = \delta_{j,l}$$

Nel limite continuo, il vettore N -dimensionale $\vec{u}_N(t)$ diventerà un vettore $|u(t)\rangle$ in uno spazio di Hilbert, e l'evoluzione temporale di ogni punto del sistema si otterrà dalla proiezione $u(x, t) = \langle x | u(t) \rangle$. Riscriveremo quindi lo spostamento generico come:

$$\vec{u}(x, t) = \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{L}} (A_k e^{i(kx-\omega_k t)} + A_{-k}^* e^{i(kx+\omega_k t)}) \Rightarrow \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{L}} (A_k e^{i(kx-\omega_k t)} + A_k^* e^{-i(kx-\omega_k t)}) =$$

$$= \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{L}} (A_k e^{i(kx-\omega_k t)} + c.c.)$$

E' conveniente scegliere l'ampiezza A_k come $A_k = \frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_k}} a_k$, con $a_k \in \mathbb{C}$. In questo modo, l'espressione finale dello spostamento assume la forma:

$$\vec{u}(x, t) = \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_k L}} (a_k e^{i(kx-\omega_k t)} + c.c.)$$

É possibile ricavare a e a^\dagger in funzione delle variabili $p(0)$ e $q(0)$ in questo modo:

$$a_k = \sum_j \frac{e^{ikx_j}}{\sqrt{N}} \left(\sqrt{\frac{m\omega_k}{2}} q_j(0) + \frac{2}{\sqrt{2m\omega_k}} p_j(0) \right)$$

dove $p_j(0) = m\dot{u}_j(0)$. In altre parole:

$$a_k = (\vec{u}_k, \sqrt{\frac{m\omega_k}{2}} \vec{q}_j(0) + \frac{2}{\sqrt{2m\omega_k}} \vec{p}_j(0))$$

dove con $(,)$ si indica il prodotto scalare ordinario di \mathbb{R}^n .

(METTERE COME SI RICAVALA A E A CROCE IN FUNZIONE DELLE P E Q)

Siamo giunti adesso alla quantizzazione. Imponiamo regole di quantizzazione canoniche per le variabili canoniche $q_i(0)$ e $p_i(0)$ del tipo:

$$[q_j(0), p_l(0)] = i\hbar\delta_{jl} \quad (j, l = 1, \dots, N)$$

Se \vec{q} e \vec{p} diventano operatori su uno spazio di Hilbert, stessa sorte tocca anche ad a_k e $a_k^* \rightarrow a_k^\dagger$, che soddisferanno alle seguenti regole di commutazione:

$$[a_k, a_{k'}] = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0$$

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \hbar\delta_{kk'}$$

E' importante osservare che gli a_k sono indipendenti, poichè lo sono i modi normali corrispondenti. Inoltre, le regole di commutazione di a_k e a_k^* sono le stesse degli operatori di creazione e distruzione dell'oscillatore armonico, dunque possiamo mettere in corrispondenza i modi normali del sistema con N oscillatori armonici: infatti, si può dimostrare che l'hamiltoniana del sistema si scrive come:

$$H = \sum_k \hbar\omega_k (a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2})$$

ovvero è la somma di tante hamiltoniane di oscillatori armonici, ognuno oscillante con frequenza ω_k . L'interpretazione degli operatori a_k e a_k^* , alla luce delle relazioni di commutazione:

$$[a_k, H] = -\hbar\omega_k a_k \quad [a_k^\dagger, H] = \hbar\omega_k a_k^\dagger$$

è quella di operatori di distruzione e creazione di una eccitazione elementare, di energia $\hbar\omega_k$, alla quale si dà il nome di **fonone**. Introduciamo lo stato di vuoto, ovvero lo stato in cui non sono presenti eccitazioni; esso è definito da:

$$a_k|0\rangle = 0 \quad \forall k$$

Il generico stato normalizzato si costruisce a partire dallo stato di vuoto mediante opportune applicazioni dell'operatore di creazione a_k^\dagger :

$$|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle = \frac{(a_{k_1})^{n_1} \dots (a_{k_j})^{n_j} \dots}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_j!} \dots} |0\rangle$$

tale scrittura significa che nel modo 1 ci sono n_1 fononi, nel modo k ce ne sono n_k , ecc.

L'energia del generico stato è data dalla somma:

$$E(n_1, n_2, \dots) = n_1 \hbar\omega_{k_1} + n_2 \hbar\omega_{k_2} + \dots$$

1.2.3 Lo spazio di Fock

Abbiamo detto che il generico autostato dell'hamiltoniana si ottiene come:

$$|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle = \frac{(a_{k_1})^{n_1} \dots (a_{k_j})^{n_j} \dots}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_j!} \dots} |0\rangle$$

In che spazio vive tale vettore? Osserviamo che poichè i numeri di occupazione non sono limitati superiormente, e il numero di modi normali è N , lo spazio in cui vivono gli autostati dell'hamiltoniana è ∞^N -dimensionale. Tale spazio prende il nome di **spazio di Fock**, dal nome del matematico russo Vladimir Fock, e lo stato $|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle$ viene chiamato **stato di Fock**. Uno stato di Fock descrive un insieme di particelle non interagenti ed *in numero ben definito*; lo stato più generale sarà dunque una sovrapposizione di stati di Fock, e non avrà stavolta un numero definito di particelle.

Matematicamente¹, lo spazio di Fock è generato dal prodotto diretto di N spazi di Hilbert:

$$\mathbb{F} = \bigotimes_{n=1}^N \mathbb{H}_n$$

Per $N \rightarrow \infty$, le proprietà dello spazio di Fock differiscono da quelle di un normale spazio di Hilbert.

1.2.4 Stato a uno o due fononi e meccanica quantistica

Se si considera il generico caso in cui sia presente soltanto una eccitazione, con numero d'onda indefinito, abbiamo che il vettore di stato è descritto da una sovrapposizione di stati:

$$\sum_k \psi_k a_k^\dagger |0\rangle$$

¹Per ulteriori approfondimenti vedi [Infinite Dimensional Groups and Algebras in Quantum Physics (Lecture Notes in Physics)], di J. T. Ottesen, capitolo 1.

dove ψ_k è il peso complesso relativo al modo k . Dal punto di vista concettuale tale scrittura è analoga alla rappresentazione degli impulsi della meccanica quantistica di particella singola, tuttavia per i fononi il limite di particella è complicato da trattare. Applicando l'operatore di evoluzione temporale, $U(t) = e^{-i\frac{(H-E_0)}{\hbar}t}$, alla funzione d'onda $|\psi\rangle$, si ottiene:

$$e^{-i\frac{(H-E_0)}{\hbar}t}|\psi\rangle = \sum_k \psi_k e^{-i\omega_k t} a_k^\dagger |0\rangle$$

Questo perchè in rappresentazione di Heisenberg l'evoluzione dell'operatore a_k^\dagger si ottiene in questo modo:

$$\begin{aligned} a_k^\dagger(t) &= (e^{-i\sum_{k'} \omega_{k'} a_{k'}^\dagger a_{k'} t}) a_k^\dagger (e^{i\sum_{k'} \omega_{k'} a_{k'}^\dagger a_{k'} t}) = e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} a_k^\dagger e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} \\ \Rightarrow \dot{a}_k^\dagger(t) &= -i\omega_k e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} [(a_k^\dagger a_k) a_k^\dagger] e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} + i\omega_k a_k^\dagger e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} [a_k^\dagger (a_k^\dagger a_k)] e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} = \\ &= i\omega_k e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} [a_k^\dagger, a_k^\dagger a_k] e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} = -i\omega_k e^{-i\omega_k a_k^\dagger a_k t} a_k^\dagger e^{i\omega_k a_k^\dagger a_k t} = -i\omega_k a_k^\dagger(t) \\ \Rightarrow a_k^\dagger(t) &= e^{-i\omega_k t} a_k^\dagger(0) \end{aligned}$$

L'evoluzione del singolo modo è dunque monocromatica in ω_k . Sia adesso $\psi_k(t) = \psi_k e^{-i\omega_k t}$, tale oggetto obbedisce a:

$$i\hbar \dot{\psi}_k(t) = \hbar \omega_k \psi_k(t) = E_k \psi_k(t)$$

ovvero i coefficienti della sovrapposizione evolvono con una legge indotta dall'energia del modo. Vediamo allora che studiando uno spazio di Fock per un numero fissato di particelle, si recupera lo spazio di Hilbert della meccanica quantistica ordinaria.

Analogamente, consideriamo lo *stato a due fononi*:

$$|\psi_{k_1 k_2}\rangle = \sum_{k_1 k_2} \psi_{k_1 k_2} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger |0\rangle$$

E' possibile dimostrare che la trattazione di questo stato porta anche in questo caso alla meccanica quantistica di due particelle libere. Inoltre, poichè $a_{k_1}^\dagger$ e $a_{k_2}^\dagger$ commutano, lo stato $|\psi_{k_1 k_2}\rangle$ è necessariamente simmetrico nello scambio $1 \leftrightarrow 2$: di conseguenza i fononi sono **bosoni**.

1.2.5 Densità degli stati

Abbiamo visto che nel limite continuo, il numero d'onda $k = \frac{2\pi}{L}$ può assumere infiniti valori discreti. Nel caso anche il volume del sistema tenda all'infinito, il numero d'onda diventa anch'esso una variabile continua, e sarà necessario sostituire le sommatorie con degli integrali. Vediamo una serie di utili identità:

$$\begin{aligned} a \sum_i &\rightarrow \int dx \Leftrightarrow \sum_i \rightarrow \frac{1}{a} \int dx \\ \frac{2\pi}{L} \sum_k &\rightarrow \int dk \Leftrightarrow \sum_k \rightarrow \int \frac{dk}{2\pi} L \end{aligned}$$

Tutto ciò si generalizza facilmente in 3 dimensioni, in cui $\vec{k} = (\frac{2\pi}{L_1}n_1, \frac{2\pi}{L_2}n_2, \frac{2\pi}{L_3}n_3)$, $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}$:

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \int \frac{dk_1 dk_2 dk_3 L_1 L_2 L_3}{(2\pi)^3} = \int \frac{d^3 k V}{(2\pi)^3}$$

dove V è il volume del sistema. Il fattore $\frac{V}{(2\pi)^3}$ prende il nome di **densità degli stati**. Ricordando le relazioni di de Broglie, per le quali $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, si può riscrivere l'integrale:

$$\int \frac{d^3 k V}{(2\pi)^3} = \int \frac{d^3 p V}{(2\pi \hbar)^3}$$

Seguendo le regole appena enunciate, possiamo riscrivere nel limite continuo l'espansione in modi propri dello spostamento $u(x, t)$:

$$u(x, t) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\mu\omega_k L}} (a_k e^{i(kx - \omega_k t)} + h.c.) \rightarrow \int \frac{dk L}{2\pi \sqrt{2\mu\omega_k L}} (a_k e^{i(kx - \omega_k t)} + h.c.)$$

Osserviamo che gli operatori di discesa nel continuo si trasformano secondo la legge:

$$a_k \rightarrow a(k) = \sqrt{\frac{L}{2\pi}} a_k$$

e seguono le regole di commutazione:

$$[a(k), a(k')] = \hbar \delta(k - k') (\equiv \hbar \frac{L}{2\pi} \delta_{kk'})$$

Dunque si ha:

$$u(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi \sqrt{2\mu\omega_k}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (a(k) e^{i(kx - \omega_k t)} + h.c.)$$

Osserviamo che l'impulso è definito soltanto nel limite continuo e di volume infinito.

Capitolo 2

Campo elettromagnetico

2.1 10 ottobre

Nel caso del campo elettromagnetico, le oscillazioni sono oscillazioni dei campi generati dal moto delle cariche, in assenza di un mezzo di propagazione. Nel caso in cui il sistema sia omogeneo ed isotropo si ha anche invarianza per trasformazioni di Lorentz.

Il sistema di onde descritto dalle equazioni di Maxwell è intrinsecamente relativistico, e presenta per questo una certa difficoltà di quantizzazione; infatti la meccanica quantistica sceglie un sistema di riferimento e distingue chiaramente fra variabili di posizioni (che poi diventeranno operatori) e variabili temporali (il tempo è un parametro e non un operatore). Le misure di grandezze osservabili sono pensate effettuate a tempi definiti, e contemporaneamente in tutto lo spazio. Per sistemi relativistici questo passaggio non è banale, e se si vuole una quantizzazione relativisticamente coerente questa non deve venire alterata da un cambio di sistema di riferimento.

Le equazioni di Maxwell, nel sistema di Gauss razionalizzato ($\epsilon_0 = 1$) si scrivono:

1. $\nabla \cdot \vec{E} = \rho$ (legge di Gauss)
2. $\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c}\partial_t \vec{B}$ (legge di Faraday-Neumann-Lenz)
3. $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ (assenza di monopoli magnetici)
4. $\nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c}(\vec{J} + \partial_t \vec{E})$ (Legge di Ampere-Maxwell)

Nel sistema di Gauss razionalizzato, \vec{E} e \vec{B} hanno le stesse unità di misura in quanto l'espressione della forza di Lorentz è:

$$\vec{F}_L = e(\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{B})$$

Il potenziale coulombiano tra due cariche q_1 e q_2 è $V = \frac{1}{4\pi} \frac{q_1 q_2}{r}$, dunque viene eliminata l'unità di carica, che viene espressa mediante unità meccaniche (analogamente a come si elimina la lunghezza, esprimendola in secondi luce, quando si pone $c = 1$, e a come si elimina anche l'energia, ponendo $\hbar = 1$). Abbiamo dunque che $1C = \sqrt{4\pi}3 * 10^9[q]_{G.R.}$,

inoltre anche la costante di struttura fine è espressa da: $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\hbar c} = \frac{1}{137}$; infine, la densità di energia elettromagnetica è data da $u = \frac{1}{2}(E^2 + B^2)$.

In assenza di sorgenti, le equazioni di Maxwell hanno come soluzioni delle onde piane. Tali soluzioni, data la trasversalità del campo elettromagnetico, saranno caratterizzate da un vettore d'onda \vec{k} , che formerà una terna destrorsa con i campi \vec{E} e \vec{B} : (figura)

In trasformata di Fourier abbiamo infatti che:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{B} = 0 &\rightarrow i\vec{k} \cdot \vec{B} = 0 \Rightarrow \vec{B} \perp \vec{k} \\ \nabla \times \vec{E} + \frac{1}{c}\vec{B} = 0 &\rightarrow i\vec{k} \times \vec{E} + \frac{i\omega}{c}\vec{B} = 0 \Rightarrow \vec{E} \perp \vec{B}, \vec{k}; \quad \omega = c|\vec{k}|\end{aligned}$$

Nel piano perpendicolare a \vec{k} abbiamo due gradi di libertà, mentre per i campi \vec{E} e \vec{B} in linea di principio ne avremmo sei. Introducendo i potenziali vettore e scalare \vec{A} e A^0 , che tengono automaticamente conto delle equazioni di Maxwell, si scende a quattro gradi di libertà. I potenziali sono definiti da:

- $\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad (\vec{B} = i\vec{k} \times \vec{A})$
- $\nabla \times (\vec{E} + \frac{1}{c}\dot{\vec{A}}) = 0 \Rightarrow \vec{E} = -\frac{1}{c}\dot{\vec{A}} - \nabla A^0$

2.2 Il gauge di Coulomb

Tuttavia \vec{A} e A^0 non sono univocamente determinati, a causa delle trasformazioni di gauge:

$$\begin{aligned}\vec{A}' &= \vec{A} + \nabla \Lambda \\ A'_0 &= A_0 - \frac{1}{c}\dot{\Lambda}\end{aligned}$$

dove $\Lambda = \Lambda(\vec{x}, t)$ è una qualsiasi funzione derivabile del tempo e delle coordinate. Si possono dunque dare delle condizioni arbitrarie per determinare i potenziali; ad esempio se si sceglie il gauge di Coulomb, in cui $\nabla \cdot \vec{A} = 0 \quad \forall t$, imponiamo una condizione che lega tra loro le tre componenti di \vec{A} , e i gradi di libertà da tre scendono quindi a due. Tale condizione non è limitante perchè siamo interessati ad onde trasverse, dunque il potenziale che genera il campo è a divergenza nulla.

Inoltre, se $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, abbiamo $\Delta \Lambda = 0$, dunque Λ deve avere laplaciano nullo. Se tra le soluzioni scegliamo quelle che si comportano bene all'infinito, tale soluzione ha come unica soluzione $\Lambda = \text{cost}$. Inoltre, A^0 è determinato dalla legge di Gauss:

$$\nabla \cdot \vec{E} = -\Delta A^0(\vec{x}, t) = \rho$$

Mantenendoci sempre nella classe di soluzioni che si comportano bene all'infinito, il laplaciano ha inversa unica, ed otteniamo la soluzione elettrostatica:

$$A^0(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3y}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|} \rho(\vec{y}, t)$$

Osservazioni:

- Tra il tempo t di $A^0(\vec{x}, t)$ e il tempo t di $\rho(\vec{y}, t)$ non c'è ritardo, per questo $A^0(\vec{x}, t)$ è detto anche *potenziale istantaneo*. A^0 quindi non costituisce un grado di libertà poichè non ci sono onde elettromagnetiche ad esso collegato. In conclusione, avendo imposto la condizione di gauge $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ che elimina il grado di libertà longitudinale di \vec{A} , e osservando che il potenziale scalare non contribuisce alla formazione di onde, i gradi di libertà complessivi si riducono a due, come ci aspettavamo.
- l'equazione $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ non è un'equazione covariante relativistica, dunque una trasformazione di Lorentz su di essa restituirà un'espressione più complicata. In altre parole la coppia (A^0, \vec{A}) non è un quadrivettore in gauge di Coulomb, tuttavia si può comunque dimostrare che tale gauge è covariante (?).

2.2.1 Il gauge di Lorentz

Un altro gauge utilizzato di solito è il gauge di Lorentz:

$$\nabla \cdot \vec{A} = \frac{1}{c} \dot{A}^0$$

Adesso la coppia $(A^0, \vec{A}) = A^\mu$ soddisfa l'equazione

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} A^\mu = 0$$

dunque in gauge di Lorentz A^μ risulta essere un quadrivettore (il suo prodotto scalare con il quadrivettore $\frac{\partial}{\partial x^\mu} = (\frac{\partial}{c\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^i})$ è invariante).

Dal punto di vista pratico il gauge di Lorentz è più scomodo: le equazioni di Maxwell in forma covariante si scrivono:

$$\square A^\mu - \partial^\mu (\partial_\lambda A^\lambda) = \frac{1}{c} J^\mu$$

e imponendo il gauge di Lorentz $\partial_\lambda A^\lambda = 0$ si ottiene

$$\square A^\mu = \frac{1}{c} J^\mu$$

per tutte e quattro le componenti. In una regione di spazio senza sorgenti si ha:

$$\square A^\mu = 0$$

dunque tutte e quattro le componenti contribuiscono alla formazione di onde; per questo motivo, in gauge di Lorentz la quantizzazione deve tener conto dei due gradi di libertà in più, ed eliminarli. Inoltre, a differenza del gauge di Coulomb, che imponeva un vincolo effettivo sulle tre componenti di \vec{A} , a qualsiasi istante t , il gauge di Lorentz permette di scegliere delle componenti A^i qualsiasi, imponendo soltanto un vincolo sulla scelta della derivata temporale di A^0 .

Ricapitolando, in gauge di Coulomb abbiamo:

- $\nabla \cdot \vec{A} = 0$
- $A^0 = \int \frac{d^3 y \rho(\vec{y}, t)}{4\pi |\vec{x} - \vec{y}|}$

L'unica equazione dinamica resta:

$$\square \vec{A} = \frac{1}{c}(\vec{J} - \nabla \dot{A}^0) \equiv \frac{1}{c} \vec{J}_\perp$$

dove il simbolo \perp a pedice di \vec{J} sta a significare che tale vettore ha divergenza nulla (è quindi ortogonale al vettore ∇); si ha infatti:

$$\nabla \cdot \vec{J}_\perp = \nabla \cdot (\vec{J} - \nabla \dot{A}^0) = \nabla \cdot \vec{J} - \Delta \dot{A}^0 = \nabla \cdot \vec{J} + \dot{\rho} = 0$$

per l'equazione di continuità e per la legge di Gauss. Nel caso di assenza di sorgenti, l'equazione dinamica diventa $\square \vec{A} = 0$ e dobbiamo quindi risolvere l'equazione:

$$(c^2 \Delta - \frac{\partial^2}{\partial t^2}) \vec{A} = 0$$

che ha come soluzioni dei vettori della seguente forma:

$$\vec{A} = a \vec{\epsilon}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)}$$

dove a è una costante di normalizzazione, $\omega_k^2 = c^2 k^2$ ed $\vec{\epsilon}$ è un vettore tale $\vec{\epsilon} \cdot \vec{k} = 0$. La soluzione di interesse fisico è costituita dalla parte reale della precedente espressione:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \text{Re}[a \vec{\epsilon}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)}]$$

e poichè $\vec{\epsilon}$ è contenuto in un piano, implica due soluzioni indipendenti per ogni \vec{k} . E' possibile considerare $\vec{\epsilon}$ come somma di due versori $\vec{\epsilon}_1$ e $\vec{\epsilon}_2$, che formano con \vec{k} una terna destrorsa; tale descrizione rappresenta una polarizzazione rettilinea delle onde generate. Tramite la base rettilinea è possibile descrivere anche polarizzazioni circolari o ellittiche dei versori, a patto di scegliere coefficienti immaginari dei due versori; ad esempio, la combinazione

$$\vec{\epsilon}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{\epsilon}_1 + i\vec{\epsilon}_2)$$

descrive una polarizzazione circolare: lungo $\vec{\epsilon}_1$ infatti si avrà l'onda che evolverà con $e^{-i\omega_k t}$, e lungo $\vec{\epsilon}_2$ con $i e^{-i\omega_k t}$. Prendendo le parti reali si ottiene $\cos(\omega_k t)$ lungo $\vec{\epsilon}_1$, e $\sin(\omega_k t)$ lungo $\vec{\epsilon}_2$ (**polarizzazione circolare destrorsa**).

Se $\vec{J}_\perp = 0$, allora anche $A^0 = 0$, e i campi si ottengono come:

- $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$
- $\vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{A}}$

2.2.2 Il problema dell'irraggiamento

Consideriamo adesso il caso in cui $\square \vec{A} = \frac{1}{c} \vec{J}_\perp$, con $\vec{J}_\perp \neq 0$. Se ci sono sorgenti, le onde possono essere emesse o assorbite. La soluzione del problema di d'Alembert non omogeneo non è unica, e per risolverlo si devono specificare prima alcune condizioni. Ad esempio si possono dare le condizioni di bordo:

1. Nel lontano passato non ci sono onde elettromagnetiche \Rightarrow la soluzione che ci interessa è costituita dai *potenziali ritardati*, e le onde elettromagnetiche sono emesse dal sistema di cariche;
2. Nel lontano futuro non ci sono onde \Rightarrow ci interessano i *potenziali anticipati*, e le onde sono interamente assorbite dal sistema di cariche;
3. Sia nel passato che nel futuro è presente radiazione elettromagnetica (diffusione).

A livello classico ci si pone la seguente domanda: dato il moto delle cariche in funzione del tempo, qual'è lo spettro energetico delle onde irraggiate? Cercheremo allora il flusso di energia corrispondente alle onde emesse, dato dal vettore di Poynting:

$$\vec{S} = c\vec{E} \times \vec{B}$$

Sia adesso la dimensione della mia sorgente $\sim a$; (FIGURA) cercherò tra le soluzioni del moto dei campi \vec{E} e \vec{B} che in modulo vadano a zero come $\frac{1}{r}$ per $r \gg a$, in modo che il flusso del vettore di Poynting attraverso la sfera di raggio r sia finito ($\Sigma \sim r^2$, e $|\vec{S}| \sim \frac{1}{r^2}$). Possiamo dunque trascurare tutte le componenti che decadono con legge $\leq \frac{1}{r^2}$, poichè corrisponderanno ad un flusso nullo.

Vogliamo dunque risolvere l'equazione

$$(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}) \vec{A} = -\frac{1}{c} \vec{J}_\perp$$

Un metodo risolutivo consiste nel passare alle trasformate di Fourier temporali:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \vec{A}_\omega(\vec{x}) e^{-i\omega t}$$

Cerchiamo poi una soluzione particolare, mettendo al posto di \vec{J}_\perp una $\delta^3(\vec{x})$:

$$(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}) G(\vec{x}, t) = -\delta^3(\vec{x})$$

G viene detta *funzione di Green*. In trasformata di Fourier temporale, la precedente espressione si riscrive:

$$(\Delta + \frac{\omega^2}{c^2}) G_\omega = (\Delta + k^2) G_\omega = -\delta^3(\vec{x})$$

Una volta trovata la soluzione per $G_\omega(\vec{x})$, si ricava $\vec{A}_\omega(\vec{x})$ mediante il prodotto di convoluzione di $G_\omega(\vec{x})$ con $\vec{J}_\perp(\vec{x})$:

$$\vec{A}_\omega(\vec{x}) = \int G_\omega(\vec{x} - \vec{x}') \frac{\vec{J}_\perp(\vec{x}')}{c} d^3x'$$

Per $k^2 = 0$ (frequenza nulla), la $G_0(\vec{x})$ è semplicemente la funzione di Green coulombiana $\frac{1}{4\pi r}$. Se viceversa $k^2 \neq 0$, si verifica che esistono delle semplici soluzioni a simmetria sferica:

$$G_\omega(r) = \frac{C_+ e^{ikr} + C_- e^{-ikr}}{4\pi r}$$

Tale soluzione va normalizzata: se $r \neq 0$ la $\delta^3(\vec{x})$ è nulla e G_ω è soluzione con qualunque coefficiente, ma se integriamo l'equazione

$$(\Delta + k^2)G_\omega = -\delta^3(\vec{x})$$

su una sferetta di raggio ϵ attorno all'origine, la parte a sinistra dà -1 , mentre a destra si ha:

$$4\pi \int_\odot r^2 dr (\Delta + k^2) \frac{C_+ e^{ikr} + C_- e^{-ikr}}{4\pi r}$$

è chiaro che se $\epsilon \rightarrow 0$ il termine in k^2 scompare perchè va come r . Per il teorema di Gauss, possiamo riscrivere l'integrale di volume

$$\int_\odot \Delta G_\omega = \int_\odot \nabla \cdot \nabla(G_\omega) d^3r$$

come integrale di superficie sul bordo della sferetta:

$$\int_{\partial\odot} \nabla G_\omega \cdot d\vec{\Sigma} = \int \nabla G_\omega \cdot \hat{r} d\Sigma$$

dunque il flusso del vettore ∇G_ω attraverso la superficie della sferetta deve essere -1 . Risultato:

$$\nabla\left(\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r}\right) = -\frac{\hat{r}}{4\pi r^2} e^{\pm ikr} \pm \frac{ike^{\pm ikr}}{4\pi r} \hat{r}$$

Dunque il flusso di ∇G_ω è proprio $\nabla G_\omega 4\pi r^2 = C_+(-e^{ikr} + ike^{ikr}r) + C_-(-e^{-ikr} - ike^{-ikr}r)$, e per $r \rightarrow 0$ resta $-(C_+ + C_-)$, da cui la condizione $C_+ + C_- = 1$.

La soluzione per la funzione di Green, antitrasformando, è allora:

$$\begin{aligned} G(\vec{x}, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_\omega(\vec{x}) e^{-i\omega t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{8\pi^2} \left[C_+ \frac{1}{r} e^{i(kr - \omega t)} + C_- \frac{1}{r} e^{-(ikr + i\omega t)} \right] = \frac{C_+}{4\pi r} \delta\left(t - \frac{r}{c}\right) + \frac{C_-}{4\pi r} \delta\left(t + \frac{r}{c}\right) = \\ &= G_{rit}(\vec{x}, t) + G_{ant}(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

Cioè la funzione di Green ritardata (anticipata) è diversa da zero in una sfera di raggio $ct = r$, e tale sfera esiste solo se $t > 0$ ($t < 0$), che corrisponde a onde nel futuro (passato). La soluzione per il potenziale vettore, già antitrasformata, è data da:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \int d^3x' dt' \frac{\vec{J}_\perp(\vec{x}', t')}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'| c} \delta\left[\left(t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}\right) - t'\right] = \int d^3x' \frac{\vec{J}_\perp(\vec{x}', t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c})}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|}$$

Vediamo dunque che lo stato della sorgente al tempo $t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}$, e nella posizione \vec{x}' , produce un effetto nel punto \vec{x} e dopo un tempo $\frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}$. In altre parole, in ogni istante t e in ogni punto \vec{x} , il potenziale vettore ha un valore che dipende da ciò che accadeva nel punto \vec{x}' , $\frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}$ secondi prima.

[**Affermazione buttata lì:** Siccome G_ω è presa per ω fissato, posso scegliere una soluzione ritardata per $\omega > 0$, e anticipata per $\omega < 0$, ottenendo così il cosiddetto propagatore di Feynman, che propaga nel futuro le particelle e nel passato le antiparticelle.]

2.3 12 ottobre

In gauge di Coulomb siamo dunque giunti ai seguenti risultati:

- $\nabla \cdot \vec{A} = 0$
- $A^0(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3 y}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|} \rho(\vec{y}, t)$
- Per il potenziale ritardato, dunque considerando il problema dell'emissione, abbiamo:

$$\begin{aligned} A_{rit}(\vec{x}, t) &= \int d^4 x' G(\vec{x} - \vec{x}', t - t') \frac{\vec{J}_\perp(\vec{x}', t')}{c} = \int d^3 x' \frac{dt'}{4\pi c |\vec{x} - \vec{x}'|} \vec{J}_\perp(\vec{x}', t') \delta(t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c} - t') = \\ &= \int d^3 x' \frac{1}{4\pi c |\vec{x} - \vec{x}'|} \vec{J}_\perp(\vec{x}', t - \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c}) \equiv \int d^3 y \frac{1}{4\pi c |\vec{x} - \vec{y}|} \vec{J}_\perp(\vec{y}, t - \frac{|\vec{x} - \vec{y}|}{c}) \end{aligned}$$

Osserviamo che a grande distanza dalla sorgente è possibile sviluppare in serie fino al prim'ordine di il denominatore:

$$|\vec{x} - \vec{y}| \simeq |\vec{x}| - \hat{x} \cdot \vec{y} + \frac{\vec{y}^2}{x^2}$$

dopodichè se teniamo solo l'ordine 0 si ha:

$$\frac{1}{4\pi c |\vec{x} - \vec{y}|} \simeq \frac{1}{4\pi c |\vec{x}|} \equiv \frac{1}{4\pi c r}$$

Anche nell'argomento di \vec{J}_\perp è presente un termine del tipo $|\vec{x} - \vec{y}|$, ma riferendosi a un tempo la sua approssimazione è più delicata:

$$t - \frac{|\vec{x} - \vec{y}|}{c} \sim t - \frac{1}{c}(r - \hat{x} \cdot \vec{y})$$

Infatti, considerare soltanto l'ordine 0 significherebbe assumere che ogni punto della sorgente contribuisce in egual misura al ritardo; tale approssimazione è valida soltanto quando la lunghezza d'onda della radiazione emessa è molto maggiore delle dimensioni della sorgente (**sviluppo di grandi lunghezze d'onda**). Che succede infatti se vario il tempo di una quantità $\frac{a}{c}$, dove a è la dimensione della sorgente? La radiazione emessa ha lunghezza

d'onda λ , dunque periodo $\frac{\lambda}{c}$. Se $\frac{\lambda}{c} \gg \frac{a}{c}$, cioè $\frac{\lambda}{a} \gg 1$, ci si può arrestare allo sviluppo all'ordine 0 (*approssimazione di dipolo*). Si avrà quindi

$$\vec{A}_{rit}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi cr} \int d^3y \vec{J}_{\perp}(\vec{y}, t - \frac{r}{c})$$

Esempio: nel caso dell'idrogeno, dove $a \sim 0,5\text{\AA}$, e $\lambda \sim 1000\text{\AA}$ per la transizione $2p \rightarrow 1s$, l'approssimazione di dipolo è ben verificata.

Se l'approssimazione di dipolo non è valida, si deve prendere il prim'ordine e si ha:

$$\vec{A}_{rit}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi cr} \int d^3y \vec{J}_{\perp}(\vec{y}, t - \frac{r - \hat{x} \cdot \vec{y}}{c})$$

Torniamo in approssimazione di dipolo, e consideriamo il caso in cui \vec{J}_{\perp} sia espressa da una corrente discreta di cariche del tipo:

$$\vec{J}_{\perp} = \sum_r e_r \vec{v}_{\perp}^{(r)}(t - \frac{r}{c}) \delta(\vec{y} - \vec{\xi}^{(r)}(t))$$

Il potenziale ritardato sarà quindi espresso da:

$$\vec{A}_{rit}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi cr} \dot{\vec{D}}_{\perp}(t - \frac{r}{c})$$

dove $\vec{D} = \sum_r e_r \vec{\xi}^{(r)}$ è il momento di dipolo del sistema di cariche, e le componenti del vettore $\dot{\vec{D}}_{\perp}$ sono date da:

$$(\dot{D}_{\perp})_i = \sum_r (\delta_{ij} - \frac{\nabla_i \nabla_j}{\nabla^2}) \dot{D}_j^{(r)}(t - \frac{r}{c})$$

Dalla espressione appena trovata di $\vec{A}_{rit} \equiv \vec{A}_{\perp}$ è possibile ricavare i campi \vec{E} e \vec{B} , dunque il vettore di Poynting; osserviamo che poichè $\vec{A} \sim \frac{1}{r} \dot{\vec{D}}(t - \frac{r}{c})$, la derivata rispetto alle coordinate spaziali restituirà due termini, uno proporzionale a $\nabla(\frac{1}{r} \sim \frac{1}{r^2})$ quindi trascurabile, e un secondo termine che proviene dalla derivazione dell'argomento di $\dot{\vec{D}}$, in cui compare $\frac{r}{c}$. Se $f = f(t - \frac{r}{c})$, si ha allora che $\nabla f(t - \frac{r}{c}) = \nabla(-\frac{r}{c}) \partial_t f = -\frac{\hat{r}}{c} \partial_t f$, e di conseguenza

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \frac{1}{c} (\dot{\vec{A}} \times \hat{r})$$

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{A}}_{\perp}$$

Tuttavia, per quanto affermato poco fa sulle derivazioni, l'operatore di trasversalizzazione rispetto al gradiente, $\delta_{ij} - \frac{\nabla_i \nabla_j}{\nabla^2}$, si identifica con l'operatore di trasversalizzazione rispetto alla direzione di osservazione, $\delta_{ij} - \frac{x_i x_j}{x^2}$, in altre parole un vettore $V(\vec{x})$ contrassegnato con il simbolo \perp avrà componenti ortogonali al vettore di posizione \vec{x} . Per questo motivo, dato che $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, e il campo elettrico deve essere ortogonale sia ad esso che alla direzione di propagazione, si può scrivere semplicemente:

$$\vec{E} = \frac{1}{c} (\dot{\vec{A}} \times \hat{r}) \times \hat{r}$$

Vediamo infine che $\dot{\vec{A}}_{\perp} = \frac{1}{4\pi c^2 r} \ddot{\vec{D}}_{\perp}(t - \frac{r}{c})$, dunque dipende dalle derivate seconde del dipolo, com'era prevedibile dato che l'irraggiamento è presente solo in caso di cariche in moto accelerato. Una importante eccezione è costituita dall'effetto Cerenkov, in cui una particella che si muove con velocità costante \vec{v} in un mezzo con indice di rifrazione n , può irraggiare se $|\vec{v}| > \frac{c}{n}$.

2.3.1 Polarizzazione dell'onda emessa

Il vettore di Poynting è dato da:

$$\vec{S} = c\vec{E} \times \vec{B} = \frac{c}{(4\pi c^2 r)^2} (\ddot{\vec{D}}_{\perp})^2 \hat{r} = \frac{1}{(4\pi r)^2 c^3} (\ddot{\vec{D}}_{\perp})^2 \hat{r}$$

La potenza irradiata per unità di angolo solido, $\frac{dW}{d\Omega}$, è data da:

$$\frac{dW}{d\Omega} = S_n 4\pi r^2 = \frac{1}{4\pi c^3} (\ddot{\vec{D}}_{\perp})^2$$

dove con S_n si è indicata la componente di \vec{S} lungo la direzione di propagazione.

Di solito è nota la direzione del dipolo: nel caso di **dipolo rettilineo** (FIGURA) l'antenna emette con una potenza che va come $\sin^2(\theta)$. Nel caso di **antenna circolare** (FIGURA), la proiezione del vettore di polarizzazione (circolare) descrive un'ellisse, la potenza in questo caso va come $\frac{1}{2}(1 + \cos^2(\theta))$.

2.3.2 Energia, lagrangiana e hamiltoniana

Introduciamo la notazione quadrivettoriale:

$$x^{\mu} = (ct, \vec{x})$$

$$A^{\mu} = (A^0, \vec{A})$$

come abbiamo fatto notare, (A^0, \vec{A}) è un quadrivettore solo se siamo in gauge di Lorentz, in un'altra gauge in generale non è vero. (???)

Definiamo adesso il tensore del second'ordine antisimmetrico, o tensore elettromagnetico:

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu} A_{\nu} - \partial_{\nu} A_{\mu}$$

dove $\partial_{\mu} = \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} = (\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^i})$. Tale tensore è indipendente dalla gauge, infatti se $A_{\mu} \rightarrow A_{\mu} + \partial_{\mu} \Lambda$ si ha:

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu}(A_{\nu} + \partial_{\nu} \Lambda) - \partial_{\nu}(A_{\mu} + \partial_{\mu} \Lambda) = \partial_{\mu} A_{\nu} - \partial_{\nu} A_{\mu} + \partial_{\mu} \partial_{\nu} \Lambda - \partial_{\nu} \partial_{\mu} \Lambda = \partial_{\mu} A_{\nu} - \partial_{\nu} A_{\mu} = F_{\mu\nu}$$

se supponiamo Λ almeno C^2 in modo da utilizzare il lemma di Schwartz.

E' possibile scrivere una densità lagrangiana, detta di Fermi:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \equiv \frac{1}{2} (\vec{E}^2 - \vec{B}^2)$$

dove si è usato il fatto che (ponendo $c = 1$):

$$F^{i0} = \partial^i A^0 - \partial^0 A^i = (-\nabla A^0 - \dot{\vec{A}})^i = E^i$$

$$F^{ij} = \partial^i A^j - \partial^j A^i = \epsilon_{ijk} \partial^i A^j = -\epsilon_{ijk} \partial_i A^j = -(\nabla \times \vec{A})^k = -B^k$$

In assenza di sorgenti, dalla lagrangiana $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\partial_\mu A_\nu)$, seguono le equazioni di Eulero-Lagrange:

$$\frac{\partial}{\partial x^\rho} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\rho A_\lambda)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\lambda}$$

Il secondo termine è nullo poichè nella lagrangiana compaiono solo le derivate del potenziale vettore; il termine a sinistra invece si riscrive:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x^\rho} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\rho A_\lambda)} &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial x^\rho} \frac{\partial (F_{\mu\nu} F^{\mu\nu})}{\partial (\partial_\rho A_\lambda)} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x^\rho} \frac{\partial (\partial_\nu A_\mu F^{\mu\nu})}{\partial (\partial_\rho A_\lambda)} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x^\rho} (\delta_\nu^\lambda \delta_\mu^\rho F^{\mu\nu} + \partial_\nu A_\mu (g^{\mu\lambda} g^{\nu\rho} - g^{\mu\rho} g^{\nu\lambda})) = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x^\rho} (F^{\rho\lambda} + \partial^\rho A^\lambda - \partial^\lambda A^\rho) = \frac{\partial}{\partial x^\rho} F^{\rho\lambda} \end{aligned}$$

dove abbiamo sfruttato le seguenti proprietà:

- $\frac{\partial (\partial_\mu A_\nu)}{\partial (\partial_\rho A_\lambda)} = \delta_\mu^\rho \delta_\nu^\lambda$
- $\frac{\partial (\partial^\mu A^\nu)}{\partial (\partial_\rho A_\lambda)} = g^{\mu\rho} g^{\nu\lambda} \frac{\partial (\partial_\rho A_\lambda)}{\partial (\partial_\rho A_\lambda)} = g^{\mu\rho} g^{\nu\lambda}$
- $F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu F^{\mu\nu} - \partial_\nu A_\mu F^{\mu\nu} = -\partial_\mu A_\nu F^{\nu\mu} - \partial_\nu A_\mu F^{\mu\nu} = -\partial_\nu A_\mu F^{\mu\nu} - \partial_\nu A_\mu F^{\mu\nu} = -2\partial_\nu A_\mu F^{\mu\nu}$
abbiamo sfruttato il fatto che $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$, e abbiamo cambiato lettera agli indici saturati.

Dunque, le equazioni del moto si scrivono:

$$\frac{\partial}{\partial x^\rho} F^{\rho\lambda} = 0$$

Se è presente anche una corrente J^μ , la lagrangiana si modifica nel seguente modo:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - J^\mu A_\mu = \frac{1}{2} (E^2 - B^2) - J^0 A^0 + \vec{J} \cdot \vec{A}$$

2.3.3 L'hamiltoniana: gradi di libertà

Per costruire l'hamiltoniana è necessario decidere i gradi di libertà del sistema. In gauge di Coulomb essi sono gli A^i , con il vincolo $\nabla \cdot \vec{A} = 0$; in trasformata di Fourier (ovvero nella rappresentazione degli impulsi) tale vincolo ha un significato immediato, ovvero di ortogonalità tra \vec{A} e il vettore d'onda \vec{k} . Definisco allora i momenti coniugati agli A^i :

$$\pi_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}^i} = F_i{}^0 = -F^{i0} = -E^i$$

Osserviamo che il momento coniugato ad A^0 è nullo:

$$\pi_0 = \frac{\partial \mathfrak{L}}{\partial \dot{A}^0} = 0$$

ma questo non è causa di problemi dato che A^0 non è un grado di libertà. In funzione di $\vec{\pi}$, la lagrangiana si scrive (in assenza di sorgenti):

$$\mathfrak{L} = \vec{\pi} \cdot (\dot{\vec{A}} + \nabla A^0) - \frac{1}{2}(\vec{\pi}^2 + (\nabla \times \vec{A})^2)$$

Il termine $\vec{\pi} \cdot \nabla A^0$ si può riscrivere come:

$$\nabla \cdot (A^0 \vec{\pi}) - (\nabla \cdot \vec{\pi}) A^0$$

e possiamo trascurare la divergenza totale ai fini delle equazioni di moto. Con questa sostituzione, A^0 compare nella lagrangiana solo come un moltiplicatore di Lagrange, e la variazione legata ad A^0 restituirà quindi come condizione $\nabla \cdot \vec{\pi} = 0$. Ma $\nabla \cdot \vec{\pi} = \Delta A^0 = 0$, e di nuovo, se A^0 è scelto nella classe di funzioni che si comportano bene all'infinito, si può prendere $A^0 = 0$ ed eliminarlo dalla lagrangiana. A questo punto possiamo riscrivere:

$$\mathfrak{L} = \vec{\pi} \cdot \dot{\vec{A}} - \frac{1}{2}(\vec{\pi}^2 + (\nabla \times \vec{A})^2)$$

di conseguenza la densità hamiltoniana si scrive:

$$\mathcal{H} = \vec{\pi} \cdot \dot{\vec{A}} - L = \frac{1}{2}(\vec{\pi}^2 + (\nabla \times \vec{A})^2)$$

Osservazione: in realtà, la procedura che abbiamo seguito non è corretta, per il semplice motivo che abbiamo trattato gli A^i come tre gradi di libertà distinti, senza considerare il vincolo non banale $\nabla \cdot \vec{A} = 0$. Tuttavia, il risultato ottenuto è analogo a quello che si sarebbe ottenuto con la procedura rigorosa.

Possiamo generalizzare al caso in cui \mathfrak{L} contenga una parte di interazione $J^\mu A_\mu$: il moltiplicatore A^0 adesso moltiplica un termine $\nabla \cdot \vec{\pi} + J^0$, e l'hamiltoniana si riscrive:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - \vec{J} \cdot \vec{A} + \frac{1}{2}(\nabla A^0)^2$$

dove $(\nabla A^0)^2$ è la densità di potenziale coulombiano. L'hamiltoniana vera e propria si ottiene dall'integrazione su tutto lo spazio della densità hamiltoniana:

$$H = \frac{1}{2} \int d^3x [(\dot{\vec{A}}^2 + (\nabla \times \vec{A})^2) - \vec{J} \cdot \vec{A}] + V_{coul}$$

dove V_{coul} è dato da:

$$V_{coul} = \int d^3x d^3y \frac{\rho(\vec{x}, t) \rho(\vec{y}, t)}{8\pi |\vec{x} - \vec{y}|} = \int d^3x (\nabla A^0)^2$$

Poichè siamo in gauge di Coulomb, A^0 è un cosiddetto *potenziale istantaneo*, dunque V_{coul} è influenzato istantaneamente da eventuali correnti esterne.

2.4 16 ottobre

2.4.1 Quantizzazione del campo elettromagnetico: fotoni

Nel gauge di Coulomb si ha che $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, pertanto non è possibile postulare regole di commutazione canoniche tra le variabili A^i e le coniugate $\pi_i = \dot{A}^i = -E^i$, della forma cioè:

$$[A^i(\vec{x}, t), \dot{A}^j(\vec{y}, t)] = i\hbar\delta^3(\vec{x} - \vec{y})\delta^{ij}$$

in quanto soltanto due delle tre componenti sono indipendenti, e applicando al commutatore l'operatore di divergenza ottengo a sinistra:

$$\sum_i \partial_i [A^i(\vec{x}, t), \dot{A}^j(\vec{y}, t)] = [\sum_i \partial_i A^i(\vec{x}, t), \dot{A}^j(\vec{y}, t)] = [0, \dot{A}^j(\vec{y}, t)] = 0$$

mentre a destra si avrebbe $\sum_i \partial_i \delta^3(\vec{x} - \vec{y})\delta_{ij}$, che in generale non è identicamente nulla. Dunque le regole canoniche non sono compatibili con la struttura del campo. Esplicitiamo il fatto che $\nabla \cdot \vec{A} = 0$: in trasformata di Fourier questo porta come abbiamo visto a un'espressione del tipo $i\vec{k} \cdot \vec{A}(\vec{k}, t) = 0$. Allora una espressione di $\vec{A}(\vec{x}, t)$ della forma:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{k; \alpha=1,2} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k V}} (\vec{\epsilon}^{(\alpha)}(\vec{k}) a^{(\alpha)}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)} + c.c.)$$

tiene automaticamente conto della ortogonalità di \vec{A} rispetto a \vec{k} , a patto di scegliere gli $\vec{\epsilon}^{(\alpha)}$, i versori di polarizzazione, in modo che formino con \vec{k} una terna destrorsa. In questo modo, l'applicazione dell'operatore di divergenza ad \vec{A} agisce sulle variabili di posizione contenute nell'esponenziale $e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)}$, e si ha:

$$\nabla \cdot (\vec{\epsilon}^{(\alpha)} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)}) = (\nabla \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)} + (\nabla e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)}) \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} = i(\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)} = 0$$

Inoltre, poichè il volume del sistema è supposto essere una scatola cubica di lato L , si ha che i vettori d'onda sono quantizzati: $k_i = \frac{2\pi}{L} n_i$.

Dunque con \vec{A} di questa forma la condizione di gauge è incorporata. Inoltre, risulta che i numeri complessi $a^{(1)}(\vec{k})$ e $a^{(2)}(\vec{k})$ sono indipendenti, riferendosi a modi indipendenti in direzioni indipendenti. Si va allora postulare relazioni di commutazione nella rappresentazione degli impulsi:

$$[a^{(\alpha)}(\vec{k}), a^{(\alpha')}(\vec{k}')] = [a^{\dagger(\alpha)}(\vec{k}), a^{\dagger(\alpha')}(\vec{k}')] = 0$$

$$[a^{(\alpha)}(\vec{k}), a^{\dagger(\alpha')}(\vec{k}')] = \hbar \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

I vettori d'onda sono discreti, così come lo sono i modi ω_k ad essi associati. In questo caso, lo spazio di Fock coincide col prodotto diretto di un numero infinito numerabile di spazi di Hilbert, che è a sua volta uno spazio di Hilbert. Quando si farà il limite di volume continuo il prodotto diretto sarà invece su una infinità continua di spazi di Hilbert, e le proprietà dello spazio di Fock differiscono in tal caso dalle proprietà di un comune spazio di Hilbert.

Nella pratica comune, tuttavia, si preferisce avere a che fare con operatori di salita e discesa con commutatore unitario, anzichè proporzionale ad \hbar , in modo che la creazione e la distruzione siano riferibili ad una particella (il fotone). Riscaleremo quindi $a \rightarrow \sqrt{\hbar}a$, ottenendo:

$$[a^{(\alpha)}(\vec{k}), a^{\dagger(\alpha')}(\vec{k}')] = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

Una volta quantizzato nello spazio degli impulsi, cosa si ottiene tornando allo spazio delle coordinate? $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ è una condizione non locale, cioè vincola le derivate di più coordinate, e la soluzione coinvolgerebbe dei nuclei integrali. (????)

Per aggiustare le regole di commutazione devo sostituire δ_{ij} utilizzando l'operatore di proiezione ortogonale al gradiente:

$$\delta_{ij} \rightarrow \delta_{ij} - \frac{\nabla_i \nabla_j}{\nabla^2}$$

In tal modo trasformo il commutatore tra $A^i(\vec{x}, t)$ e $\dot{A}^j(\vec{y}, t)$ in:

$$[A^i(\vec{x}, t), \dot{A}^j(\vec{y}, t)] = \delta_{ij} \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) - \partial_i \partial_j \left(\frac{1}{\nabla^2} \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \right)$$

dove con $\frac{1}{\nabla^2}$ si è indicato formalmente l'inverso dell'operatore laplaciano, che applicato alla $\delta^3(\vec{x} - \vec{y})$ restituisce il potenziale coulombiano. Si ha allora:

$$[A^i(\vec{x}, t), \dot{A}^j(\vec{y}, t)] = \delta_{ij} \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) - \partial_i \partial_j \left(\frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|} \right)$$

Osserviamo che il primo termine, $\delta_{ij} \delta^3(\vec{x} - \vec{y})$, è un termine *locale*, che è nullo per $\vec{x} \neq \vec{y}$, mentre il termine $\partial_i \partial_j \left(\frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|} \right)$ non si annulla mai, ed è chiaramente un termine *non locale*. A causa del termine coulombiano, che rende il commutatore sempre diverso da zero, A^i e \dot{A}^j non possono mai essere misurati contemporaneamente.

Completezza: consideriamo i versori $\vec{\epsilon}^{(1)}$, $\vec{\epsilon}^{(2)}$ e $\hat{k} = \frac{\vec{k}}{k}$, che formano un sistema ortonormale in tre dimensioni; vale la relazione di completezza:

$$\sum_{\alpha=1,2} \epsilon_i^{(\alpha)} \epsilon_i^{(\alpha)} + \frac{k_i k_j}{k^2} = \delta_{ij}$$

L'espressione $\sum_{\alpha=1,2} \epsilon_i^{(\alpha)} \epsilon_i^{(\alpha)}$ si dice anche *proiettore trasverso* a \vec{k} . Dunque $\sum_{\alpha=1,2} \epsilon_i^{(\alpha)} \epsilon_i^{(\alpha)} = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}$, ed è possibile identificare formalmente, mediante la trasformata di Fourier, $\frac{k_i k_j}{k^2}$ con $\frac{\nabla_i \nabla_j}{\nabla^2}$. Possiamo adesso calcolare esplicitamente il commutatore tra A^i e \dot{A}^j :

$$A^j(\vec{x}, t) = \sum_{k\alpha} \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2\omega_k V}} (\epsilon_j^{(\alpha)}(\vec{k}) a^{(\alpha)}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)} + h.c.)$$

$$\dot{A}^l(\vec{y}, t) = \sum_{k'\alpha'} \frac{\sqrt{(-i\omega_{k'})\hbar}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} (\epsilon_l^{(\alpha')}(\vec{k}') a^{(\alpha')}(\vec{k}') e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{y} - \omega_{k'} t)} - h.c.)$$

All'interno del commutatore saranno presenti due sommatorie, una su $k\alpha$ e una su $k'\alpha'$. Usando le regole di commutazione tra $a^{(\alpha)}(\vec{k})$ e $a^{\dagger(\alpha')}(\vec{k}')$, si trova che il generico addendo di

tali sommatorie è costituito dalla somma di un termine proporzionale a $[a^{(\alpha)}(\vec{k}), a^{\dagger(\alpha')}(\vec{k}')] = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}$ e un termine proporzionale a $[a^{\dagger(\alpha)}(\vec{k}), a^{(\alpha')}(\vec{k}')] = -\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}$ (gli altri commutatori sono tutti nulli):

$$[A^i, \dot{A}^j] = \sum_{k\alpha} \sum_{k'\alpha'} \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2\omega_k V}} \frac{-i\sqrt{\hbar}\omega_{k'}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} \epsilon_j^{(\alpha)}(\vec{k}) \epsilon_l^{(\alpha')}(\vec{k}') [-e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)} e^{-i(\vec{k}'\cdot\vec{y}-\omega_{k'} t)} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} - e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{y}-\omega_{k'} t)} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}]$$

Sommando su $k'\alpha'$ le δ restituiscono:

$$[A^i, \dot{A}^j] = \sum_{k\alpha} \frac{i\hbar\omega_k}{2\omega_k V} \epsilon_j^{(\alpha)}(\vec{k}) \epsilon_l^{(\alpha)}(\vec{k}) [e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})} + e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}]$$

Poichè la somma si estende per tutti i $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}$, ed $\vec{n} \in \mathbb{N}^3$, è possibile mandare $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ nel secondo addendo della parentesi quadra, e scrivere:

$$[A^i, \dot{A}^j] = i\hbar \sum_{k\alpha} \frac{1}{2V} \epsilon_j^{(\alpha)}(\vec{k}) \epsilon_l^{(\alpha)}(\vec{k}) [2e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}] = i\hbar \sum_{k\alpha} \frac{1}{V} \epsilon_j^{(\alpha)}(\vec{k}) \epsilon_l^{(\alpha)}(\vec{k}) [e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}]$$

Per la proprietà di completezza, sommando su α si ha:

$$[A^i, \dot{A}^j] = \frac{i\hbar}{V} \sum_k [e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}] (\delta_{jl} - \frac{k_j k_l}{k^2})$$

Possiamo supporre il termine $\frac{k_j k_l}{k^2}$ come dovuto all'azione dell'operatore $\frac{\nabla_j \nabla_l}{\nabla^2}$:

$$\frac{i\hbar}{V} \sum_k [e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}] (\delta_{jl} - \frac{k_j k_l}{k^2}) = \frac{i\hbar}{V} (\delta_{jl} - \frac{\nabla_j \nabla_l}{\nabla^2}) \sum_k [e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}]$$

Passando al limite di volume infinito:

$$\frac{1}{V} \sum_k \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k$$

si ottiene che:

$$\begin{aligned} [A^i, \dot{A}^j] &= \frac{i\hbar}{V} (\delta_{jl} - \frac{\nabla_j \nabla_l}{\nabla^2}) \sum_k [e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}] = i\hbar (\delta_{jl} - \frac{\nabla_j \nabla_l}{\nabla^2}) \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k [e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})}] = \\ &= i\hbar (\delta_{jl} - \frac{\nabla_j \nabla_l}{\nabla^2}) \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \end{aligned}$$

2.5 17 ottobre

Abbiamo visto che si può scrivere $\vec{A}(\vec{x}, t)$ nella forma:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{k;\alpha=1,2} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k V}} (\vec{\epsilon}^{(\alpha)}(\vec{k}) a^{(\alpha)}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega_k t)} + c.c.)$$

imponendo regole di commutazione canoniche sugli operatori $a^{(\alpha)}(\vec{k})$ e $a^{\dagger(\alpha')}(\vec{k}')$:

$$[a^{(\alpha)}(\vec{k}), a^{\dagger(\alpha')}(\vec{k}')] = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

D'ora in poi per brevità di notazione scriveremo $a^{(\alpha)}(\vec{k}) \equiv a_{k\alpha}$.

La costruzione dello stato quantistico segue la medesima procedura del caso dei fononi; si parte da uno stato di vuoto definito da:

$$a_{k\alpha}|0\rangle = 0 \quad (\forall \vec{k}, \alpha)$$

e si costruisce lo spazio di Fock, ovvero l'insieme di tutte le combinazioni lineari a coefficienti complessi dei vettori $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ così costruiti:

$$|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \frac{(a_{k_1\alpha_1}^\dagger)^{n_1} \dots (a_{k_i\alpha_i}^\dagger)^{n_i} \dots}{\sqrt{n_1!} \dots \sqrt{n_i!} \dots} |0\rangle$$

Lo spazio di Fock così costruito può avere un numero di dimensioni fissato oppure variabile. Il primo caso non aveva senso per i fononi, e non ne ha neanche adesso per i fotoni; anche stavolta dunque la sovrapposizione è da pensarsi sia sugli spazi di Hilbert di singolo fonone, che sui vari modi di ogni fonone. (????)

2.5.1 Energia di zero: l'effetto Casimir

Con calcoli simili a quelli effettuati per il commutatore $[A^i, \dot{A}^j]$, si può riscrivere l'hamiltoniana:

$$H = \frac{1}{2} \int d^3x (\dot{\vec{A}}^2 + (\nabla \times \vec{A})^2) \equiv \sum_{k\alpha} \hbar\omega_k (a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + \frac{1}{2})$$

ovvero come sovrapposizione di infiniti oscillatori armonici di frequenza ω_k . Essendo oscillatori armonici, compare il termine $\frac{\hbar\omega_k}{2}$ dovuto al principio di indeterminazione; essendo la sommatoria estesa su tutti i \vec{k} , nell'hamiltoniana compare un termine costante $E_0 = \sum_{k\alpha} \frac{\hbar\omega_k}{2}$, detto *energia di punto zero*, che diverge come $\sim k^4$ (divergenza ultravioletta). Per evitare tale singolarità decidiamo di definire l'energia a meno di una costante, eliminando così il contributo di E_0 . Tuttavia E_0 dipende dal 'vuoto' che stiamo considerando; 'cambiare vuoto' (ovvero cambiare le dimensioni del sistema in modo da andare ad intaccare i valori dei vettori d'onda $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}$) non cambia il fatto che l'energia di zero sia infinita, tuttavia le differenze che sussistono tra energie di zero appartenenti allo stesso sistema di cui viene variato il volume, devono in linea di principio condurre a risultati osservabili. L'energia di zero è alla base dell'effetto Casimir, ovvero la presenza di una piccola forza attrattiva tra due lastre metalliche scariche, piane e parallele, poste a breve distanza nel vuoto.

Consideriamo due lastre metalliche scariche a distanza d , quadrate e di lato L tale che $L \gg d$. L'intero sistema è contenuto in una scatola cubica di lato L . (FIGURA) Le regole di quantizzazione ci dicono che i modi elettromagnetici possibili nelle tre direzioni, nell'intercapedine contenuta tra le due lastre, sono dati da:

$$k_1 = \frac{2\pi}{L}n_1 \quad ; \quad k_2 = \frac{2\pi}{L}n_2 \quad ; \quad k_3 = \frac{2\pi}{d}n_3$$

Nella direzione z esiste dunque una lunghezza d'onda massima, $\lambda_{max} = d$, che varierà assieme alla distanza tra le due lastre. Non esiste viceversa una lunghezza d'onda minima λ_{min} , dunque abbiamo soltanto un taglio nell'infrarosso di cui dovremo tener conto nel conteggio dei modi. (FIGURA) L'energia di zero, in presenza delle due lastre, si scrive:

$$E_0|_L = E(V_d) + E(V - V_d)$$

dove $E(V_d) = \sum_{k\alpha} \frac{\hbar\omega_k}{2} = \frac{1}{2} \int \frac{d^3kV}{(2\pi)^3} \hbar\omega_k$. In linea di principio, poichè $|\vec{k}|$ è limitato inferiormente ma non superiormente, si inserisce un *cutoff* per fare i conti, salvo poi fare il limite per $|\vec{k}| \rightarrow \infty$ alla fine del calcolo: sceglieremo un k_{max} uguale per tutte e tre le zone: V , V_d , $V - V_d$. Per quanto riguarda k_{min} , per V_d abbiamo $k_{min} = \frac{2\pi}{d}$, per V $k_{min} = \frac{2\pi}{L}$ e per $V - V_d$ $k_{min} = \frac{2\pi}{L-d}$, ma poichè $L \gg d$ assumeremo $k_{min} = \frac{2\pi}{L}$ anche per $V - V_d$. Dunque calcoliamo le energie di zero nei tre casi:

$$\begin{aligned} E(V_d) &= \frac{L^2 d}{2} \int_{\frac{2\pi}{d}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k \\ E(V - V_d) &= \frac{L^2(L-d)}{2} \int_{\frac{2\pi}{L}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k \\ E(V) &= \frac{L^3}{2} \int_{\frac{2\pi}{L}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k \end{aligned}$$

Quello che ci interessa è la differenza di energia di zero tra il caso in cui le lastre ci sono, e il caso in cui non ci sono:

$$\begin{aligned} \Delta E &= E(V_d) + E(V - V_d) - E(V) = \frac{L^2 d}{2} \int_{\frac{2\pi}{d}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k + \frac{L^2(L-d)}{2} \int_{\frac{2\pi}{L}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k - \frac{L^3}{2} \int_{\frac{2\pi}{L}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k = \\ &= \frac{L^2 d}{2} \int_{\frac{2\pi}{d}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k + \frac{L^3}{2} \int_{\frac{2\pi}{L}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k - \frac{L^2 d}{2} \int_{\frac{2\pi}{L}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k - \frac{L^3}{2} \int_{\frac{2\pi}{L}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k = \\ &= \frac{L^2 d}{2} \int_{\frac{2\pi}{d}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k - \frac{L^2 d}{2} \int_{\frac{2\pi}{L}}^{k_{max}} d^3k \hbar\omega_k = \frac{L^2 d}{2} \int_{\frac{2\pi}{d}}^{\frac{2\pi}{L}} d^3k \hbar\omega_k \equiv \frac{L^2 d}{2} \int_{\frac{2\pi}{d}}^{\frac{2\pi}{L}} d^3k \hbar c k \end{aligned}$$

Se consideriamo la variazione di energia per unità di superficie, nel limite di volume infinito ($L \rightarrow \infty$) otteniamo:

$$\frac{\Delta E}{L^2} \rightarrow -\frac{\hbar c d}{2} \left(\frac{2\pi}{d}\right)^4 = -\frac{\hbar c}{d^3} \beta$$

dove β è una costante.

Il conto appena effettuato è abbastanza rozzo, e la costante β calcolata con questi mezzi risulta errata. Tuttavia anche in questa maniera il risultato mostra qualitativamente che c'è una energia per unità di superficie come per un condensatore a facce piane parallele, inversamente proporzionale alla distanza tra le lastre. E' possibile dunque definire una pressione (di radiazione):

$$P = -\frac{\partial \frac{\Delta E}{L^2}}{\partial d} \sim -\frac{\hbar c}{d^4}$$

Dunque le due lastre risentono di una pressione (attrattiva) come se sulla loro superficie fosse presente una carica efficace pari a $q = \sqrt{\hbar c} = \sqrt{137}e$. E' possibile misurare questa forza attrattiva, e dai risultati degli esperimenti verificare la bontà della procedura di quantizzazione, nello specifico la validità della costante che moltiplica $\frac{\hbar c}{d^3}$ nella formula di $\frac{\Delta E}{L^2}$.

Nel nostro caso tale costante risulta scorretta per una serie di motivi:

- Abbiamo usato un cutoff isotropo mentre il sistema è chiaramente anisotropo, come era evidente fin dall'inizio dalla quantizzazione dei vettori d'onda nelle tre direzioni;
- Abbiamo confuso $\frac{2\pi}{L-d}$ con $\frac{2\pi}{L}$ scrivendo gli estremi di integrazione;
- Non abbiamo tenuto conto delle divergenze *subleading*, ovvero del fatto che l'energia di zero non diverge in generale soltanto come k^4 (termine *leading*) ma possono essere presenti anche termini di divergenza k^3 , k^2 .

2.6 Esercizi e complementi

2.6.1 La notazione covariante

Capitolo 3

Interazione radiazione materia

3.1 23 ottobre

L'obiettivo è determinare una lagrangiana e una hamiltoniana che mi descrivano l'interazione del campo elettromagnetico con un sistema di cariche. Non si tratta in questo caso di correnti esterne, ovvero cariche in moto prestabilito e fissato a priori dal problema; stavolta non sarà possibile considerare il campo elettromagnetico come una piccola perturbazione, e in generale influenzerà il moto delle cariche.

La lagrangiana non relativistica per una particella in campo elettromagnetico, avendo posto $\vec{v} = \dot{\vec{\xi}}$, si scrive (avendo posto $c = 1$):

$$\mathfrak{L}(\vec{\xi}, \dot{\vec{\xi}}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{\xi}}^2 - e(A^0(\vec{\xi}, t) - \dot{\vec{\xi}} \cdot \vec{A}(\vec{\xi}, t))$$

dove $\vec{\xi}$ è il vettore posizione della particella. A^0 e \vec{A} sono i potenziali elettromagnetici, e sono in generale funzione delle coordinate e del tempo.

E' possibile verificare che tale lagrangiana derivano le corrette equazioni del moto. Per le equazioni di Eulero-Lagrange si ha infatti:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}^i} &= \frac{\partial L}{\partial \xi^i} \\ \Rightarrow \frac{d}{dt} (m \dot{\xi}^i + e A^i) &= -e \partial_i A^0 + \dot{\xi}_j \partial_i A^j \\ \Rightarrow m \ddot{\xi}^i + e \dot{A}^i + e \dot{\xi}^j \partial_j A^i &= -e \partial_i A^0 + e \dot{\xi}_j \partial_i A^j \end{aligned}$$

da cui si ha finalmente

$$m \ddot{\xi}^i = -e(\dot{A}^i + \partial_i A^0) + e(\dot{\xi}_j \partial_i A^j - \dot{\xi}^j \partial_j A^i) = e E^i + e \epsilon_{ijk} \dot{\xi}^j B^k$$

Quando in una lagrangiana la parte di potenziale V viene a dipendere anche dalla velocità, si ha che i momenti coniugati $\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}^i}$ in generale possono venire a dipendere dal campo, infatti in questo caso si ha

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}^i} = m \dot{\xi}^i + e A^i$$

Questo fa sì che nell'hamiltoniana compaiano dei termini aggiuntivi:

$$H = p^i \dot{\xi}^i - L = p^i \dot{\xi}^i - \left(\frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 - e(A^0 - \xi^i A^i) \right) = \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + eA^0$$

Osserviamo che le velocità cinetiche $m\dot{\xi}^i$, a causa del campo elettromagnetico, non sono uguali in questo caso ai momenti coniugati canonici, ma ne differiscono per un termine $e\vec{A}$; dunque l'hamiltoniana appena scritta può essere ottenuta dall'hamiltoniana di particella libera, tramite la sostituzione minimale:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$$

$$E \rightarrow E - eA^0$$

L'hamiltoniana può quindi essere riscritta come:

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + eA^0 = \left[\frac{p^2}{2m} + eA^0 \right] + \left[\frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 - \frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A} \right]$$

Dìdove il primo termine in parentesi rappresenta l'hamiltoniana libera, e il secondo l'hamiltoniana di interazione tra cariche e campo. Osserviamo che nell'hamiltoniana di interazione sono presenti due termini, uno lineare e uno quadratico nella carica elettrica e . Il termine $-\frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}$ è simile al termine $-\vec{J} \cdot \vec{A}$ del caso di corrente esterna, ma il termine $\frac{e^2}{2m} \vec{A}^2$ non ha un corrispondente in tal senso, e risulta essere un termine caratteristico dell'interazione dinamica del sistema di cariche col campo.

Il sistema che ci accingiamo a trattare, ovvero un atomo immerso in un campo elettromagnetico, differisce notevolmente dall'approssimazione singola particella in campo esterno effettuata nel capitolo 2, sia perchè in un atomo sono presenti più cariche, sia perchè adesso non è più possibile trascurare l'interazione dinamica del campo con esse. La lagrangiana che utilizzeremo nel seguito ha questa forma:

$$\sum_r \left[\frac{1}{2} m_r \dot{\xi}_r^2 - e(A_r^0 - \vec{\xi}_r \cdot \vec{A}_r) \right] + \int \mathcal{L}_{em} d^3x$$

dove $\vec{A}_r = \vec{A}(\vec{\xi}_r, t)$ e $A_r^0 = A^0(\vec{\xi}_r, t)$, ovvero i potenziali sono valutati nella posizione occupata dalla r -esima carica. La quantizzazione del campo evolverà lungo due cammini differenti: da una parte il sistema di cariche verrà quantizzato senza considerare l'eventualità di creazione o distruzione di particelle; dall'altra, verrà quantizzata la parte di campo elettromagnetico in modo tale che i fotoni risultanti possano variare di numero, e sarà quindi costruito uno spazio di Fock per un numero indefinito di particelle. Quest'ultima procedura prende il nome di *seconda quantizzazione*. C'è una differenza sostanziale nella descrizione dei due sistemi; nel caso delle cariche, queste sono definite da coordinate e impulsi canonici coniugati $\vec{\xi}_r$ e $\vec{p}_r = m_r \dot{\xi}_r + e\vec{A}_r$, che diventeranno poi operatori quantistici di posizione e impulso, mentre per i fotoni la lagrangiana elettromagnetica è descritta in termini di \vec{A} e $\vec{\pi}$, che diventano viceversa funzioni di $a_{k\alpha}$ e $a_{k\alpha}^\dagger$, ovvero operatori di creazione e distruzione nello spazio di Fock. Ci sono dunque due categorie di momenti

canonici coniugati, delle quali si deve tener conto quando si scrive l'hamiltoniana mediante la trasformata di Legendre:

$$H = \sum_r \vec{p}_r \cdot \vec{\xi}_r + \int d^3x \vec{\pi} \cdot \vec{A} - L$$

Consideriamo adesso la legge di Gauss:

$$-\nabla \cdot \vec{\pi} = \nabla \cdot \vec{E} = \rho$$

dove ρ è espressa da una sommatoria poichè le cariche sono supposte discrete e puntiformi:

$$\rho = \sum_r e_r \delta(\vec{x} - \vec{\xi}_r(t))$$

e ognuna di esse possiede una traiettoria $\vec{\xi}(t)$. Dunque risulta che

$$A^0(\vec{x}, t) = \int d^3y \frac{\rho(\vec{y}, t)}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|} = \sum_r \frac{1}{4\pi} \frac{e_r}{|\vec{x} - \vec{\xi}_r(t)|}$$

Ancora una volta, A^0 è una funzione delle coordinate e del tempo data dal potenziale coulombiano istantaneo del sistema di cariche. Questo rende possibile una scrittura del tipo:

$$A^0(\vec{x}, 0) = \sum_r \frac{1}{4\pi} \frac{e_r}{|\vec{x} - \vec{\xi}_r(0)|}$$

concorde con la scelta di quantizzare l'hamiltoniana a $t = 0$. L'hamiltoniana si può riscrivere come:

$$H = H_{int} + H_{e.m.} + H_{coul} = \sum_r \frac{(\vec{p}_r - e_r \vec{A}(\vec{\xi}_r, 0))^2}{2m_r} + \frac{1}{2} \int d^3x [\vec{A}^2(\vec{x}, 0) + (\nabla \times \vec{A}(\vec{x}, 0))^2] + \\ + \frac{1}{2} \int d^3x (\nabla A^0(\vec{x}, 0))^2$$

dove l'ultimo termine è semplicemente il potenziale coulombiano:

$$\frac{1}{2} \int d^3x (\nabla A^0(\vec{x}, 0))^2 = \frac{1}{8\pi} \sum_{r \neq s} \frac{e_r e_s}{|\vec{\xi}_r(0) - \vec{\xi}_s(0)|}$$

Omettendo alcuni calcoli, si ottiene un'hamiltoniana di questa forma:

$$H = H_{atom} + H_{e.m.} + V$$

dove

$$H_{atom} = \sum_r \frac{p_r^2}{2m_r} + \frac{1}{4\pi} \sum_{r < s} \frac{e_r e_s}{|\vec{\xi}_r(0) - \vec{\xi}_s(0)|}$$

e

$$V = V_1 + V_2 = - \sum_r \frac{e_r \vec{p}_r \cdot \vec{A}_r}{m_r} + \sum_r \frac{e_r^2 A_r^2}{2m_r}$$

Di nuovo possiamo distinguere tra V_1 e V_2 , due termini d'interazione rispettivamente proporzionali ad e ($\sim \sqrt{\alpha}$) ed e^2 ($\sim \alpha$); poichè nella probabilità di transizione compaiono i moduli quadri degli elementi di matrice, questi daranno origine a probabilità di ordine α ed α^2 , dunque fin da adesso è chiaro che in prima approssimazione si può trascurare V_2 rispetto a V_1 . Tuttavia i processi che è possibile descrivere tramite V_1 si limitano a processi in cui si crea o si distrugge un fotone ($V_1 \sim A_i \sim a_{k\alpha} + a_{k\alpha}^\dagger$), mentre considerando l'ordine successivo in α di V_1 , o il primo ordine in α di V_2 , si possono descrivere processi a due fotoni ($\Delta n = \pm 2$) oppure processi di diffusione di fotoni ($\Delta n = 0$).

Considerazioni:

1. In realtà, svolgendo il quadrato $(\vec{p} - e\vec{A})^2$, il doppio prodotto dovrebbe a rigore essere espresso come $e(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p})$; tuttavia risulta che

$$\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p} + [\vec{p}, \vec{A}] = \vec{A} \cdot \vec{p} + (-i\hbar \nabla \cdot \vec{A})$$

dunque in gauge di Coulomb $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ e risulta $\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}$

2. Consideriamo V_1 : abbiamo detto che $\vec{p}_r = m\vec{\xi} - e_r\vec{A}_r$, ma al prim'ordine in e_r posso trascurare il termine $e_r\vec{A}_r$ (che in modulo quadro dà luogo a termini $\sim e_r^2$), e considerare $\vec{p}_r \sim m\vec{\xi}_r$, che dà luogo ad una interazione del tipo $\vec{v}_r \cdot \vec{A}_r$. Allora $V_1 \sim e_r\vec{\xi}_r \cdot \vec{A}_r \sim \vec{D} \cdot \vec{A}$, e a meno di derivate totali, questo è uguale a $\vec{D} \cdot \vec{A} \sim \vec{D} \cdot \vec{E}$, dunque al prim'ordine in e_r l'interazione ha la forma di una interazione dipolo-campo.

3.2 24 ottobre

3.2.1 Perturbazioni dipendenti dal tempo

In meccanica quantistica, ciò che risulta misurabile è la probabilità di transizione del sistema da uno stato iniziale $|i\rangle$ a uno stato finale $|f\rangle$. Si definisce allora l'operatore di evoluzione $U(-\infty, \infty)$, o *operatore di Heisenberg*. Tuttavia, in meccanica quantistica non è ben definita la direzione di uno stato intesa come fase, e questo non permette una definizione matematicamente consistente dell'operatore di evoluzione; consideriamo infatti gli elementi di matrice dell'operatore di Heisenberg:

$$\langle f|U(t, t_0)|i\rangle$$

In caso l'hamiltoniana non dipenda dal tempo, oppure $[H(t), H(t')] = 0$ per $t \neq t'$, sappiamo scrivere il propagatore in forma chiusa:

$$U(t, t_0) = e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}$$

In tal caso osserviamo che applicando l'operatore a un generico autostato dell'hamiltoniana:

$$e^{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}}|E\rangle = e^{-i\frac{E(t-t_0)}{\hbar}}|E\rangle =$$

L'esponenziale per $t \rightarrow \infty$ e $t_0 \rightarrow -\infty$ è oscillante dunque non ammette limite. Si definisce allora una nuova rappresentazione, detta *rappresentazione di interazione*, in cui $U(t, t_0) = e^{-iHt} U_I e^{iHt_0}$ ($\hbar = 1$).

In questo modo, facendo il modulo quadro di un elemento di matrice:

$$|\langle f | U(t, t_0) | i \rangle|^2 = |\langle f | e^{-iHt} U_I(t, t_0) e^{iHt_0} | i \rangle|^2 = |\langle f | e^{-iE_f t} U_I(t, t_0) e^{iE_i t_0} | i \rangle|^2 = |\langle f | U_I(t, t_0) | i \rangle|^2$$

e adesso $U_I(t, t_0)$ è un oggetto per cui ha senso considerare il limite per $t \rightarrow \infty$ e $t_0 \rightarrow -\infty$. Se l'hamiltoniana H è descritta da $H_0 + V$ (come nel caso del sistema atomo + campo elettromagnetico), dove H_0 è un'hamiltoniana libera, e V è un potenziale di interazione, l'evoluzione indotta da H_0 non è interessante poichè è del tipo $e^{\pm iEt}$; grazie alla rappresentazione di interazione si cancella quindi l'interazione dovuta ad H_0 :

$$U_I(t, t_0) = e^{iH_0 t} U(t, t_0) e^{-iH_0 t_0}$$

Nel caso l'interazione venisse spenta, e quindi $H = H_0$, si avrebbe dunque $U_I = I$. Tale rappresentazione viene detta di interazione perchè risulta ($i\hbar \dot{U} = HU$):

$$\begin{aligned} \dot{U}_I &= \frac{i}{\hbar} e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} H_0 U(t, t_0) e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} - \frac{i}{\hbar} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} H U e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} = -\frac{i}{\hbar} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V U e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} = \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V (e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}}) U e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} = -\frac{i}{\hbar} H_I U_I \end{aligned}$$

cioè l'operatore di evoluzione evolve mediante l'hamiltoniana H_I , che dipende dal potenziale V ; osserviamo che se $V \rightarrow 0$, anche $H_I \rightarrow 0$ e dunque l'evoluzione del sistema è legata solo alla presenza di V .

Adesso che abbiamo creato un operatore di evoluzione per cui abbia senso considerare il limite temporale a $\pm\infty$, il problema diventa risolvere l'equazione

$$i\hbar \dot{U}_I(t, t_0) = H_I U_I$$

Questo problema è matematicamente mal definito, poichè le interazioni portate da V non dipendono in generale dal tempo, quindi si suppone siano infinitamente estese sia nel passato che nel futuro, e questo porta come risultato delle divergenze una volta che si vada ad integrare l'equazione (,). Tuttavia le misure di solito sono effettuate con dei pacchetti d'onda, i quali interagiscono solo per un tempo limitato e in regioni di spazio finite, dunque abbiamo davanti due strade:

1. Considerare $|i\rangle$ e $|f\rangle$ come pacchetti d'onda e non più come autostati di H_0 (ad esempio autostati dell'impulso), e complicare di conseguenza il formalismo; possiamo pensare ad un pacchetto d'onda localizzato spazialmente che interagisca col sistema solo per un tempo limitato: l'interazione quindi si annulla per tempo molto lontano nel passato o nel futuro in cui si suppone il pacchetto si sia allontanato a sufficienza.
2. Introdurre un fattore $e^{\epsilon|t|}$, detto di *spegnimento adiabatico*, modificando quindi il potenziale:

$$V \rightarrow e^{\epsilon|t|} V$$

in modo che V decresca esponenzialmente nel tempo, sia nel passato che nel futuro, e quindi la sua azione sia sostanzialmente limitata ad un intervallo temporale $T \simeq \frac{2}{\epsilon}$;

Per T finito, le espressioni matematiche sono tutte ben definite; alla fine dei calcoli, interpretando i risultati, si scopre che le quantità meglio definite non sono le probabilità di transizione, bensì le probabilità di transizione per unità di tempo: ad esempio, se consideriamo l'emissione di radiazione da parte di un atomo e supponiamo che questo emetta da sempre, l'energia totale emessa risulterà ovviamente infinita, dunque risulta più interessante studiare quanto un atomo emette per unità di tempo.

Se si impone $V(t_0, t_0) = 1$, il problema diventa analogo ad una equazione integrale di Volterra:

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_I(t') U_I(t', t_0)$$

Una soluzione immediata potrebbe essere

$$U_I = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_I(t')\right)$$

tuttavia questa non è ben definita in quanto $[H(t), H(t')] \neq 0$ se $t \neq t'$, e per la formula di Baker-Hausdorff risulta $e^A e^B \neq e^{A+B}$ se $[A, B] \neq 0$. Cercheremo allora soluzioni iterative per l'equazione di Volterra:

$$\begin{aligned} U_I^{(0)}(t, t_0) &= 1 \\ \Rightarrow U_I^{(1)}(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_I(t') \\ \Rightarrow U_I(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_I(t') + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_I(t_1) H_I(t_2) + \dots \end{aligned}$$

dove ovviamente conta l'ordine in cui i vari $H(t)$ vengono scritti, e gli integrali vengono per questo detti *time-ordered*.

Possiamo allora esprimere la matrice S in rappresentazione di interazione:

$$S_I = \lim_{t \rightarrow \infty; t_0 \rightarrow -\infty} U_I(t, t_0)$$

Il generico elemento di matrice di S_I si scriverà:

$$(S_I)_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i \delta(E_f - E_i) T_{fi}$$

Alcune considerazioni:

- La δ di conservazione dell'energia, se il potenziale è spento adiabaticamente, sarà in realtà una δ_ϵ , ovvero una *regolarizzazione della δ* , che tenderà alla δ di Dirac per $\epsilon \rightarrow 0$. Dunque se $V=V(t)$ l'energia non si conserva.

- L'elemento di matrice dell'operatore T , T_{fi} , ha anch'esso una espressione perturbativa, che giustificheremo in seguito:

$$T_{fi} = T_{fi}^{(1)} + T_{fi}^{(2)} + \dots$$

dove $T_{fi}^{(1)} = V_{fi}$ (V è il potenziale in rappresentazione di Schroedinger), e

$$T_{fi}^{(2)} = \sum_n \frac{V_{fn}V_{ni}}{E_i - E_n + i\epsilon}$$

dove la somma è intesa sugli stati imperturbati dell'hamiltoniana H_0 . L'addendo $i\epsilon$ a denominatore è una sorta di 'promozione complessa' dell'energia iniziale, e serve ad impedire l'annullarsi del denominatore nel caso di stato iniziale e intermedio degeneri ($E_n = E_i$).

Una volta impostato il problema, resta da dire come si calcola la probabilità di transizione per unità di tempo in funzione degli elementi di matrice della matrice S . Si utilizza a tal fine la *regola d'oro di Fermi*:

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) |T_{fi}|^2 d\phi_f$$

dove $d\phi_f$ è l'elemento infinitesimo di volume dello spazio delle fasi finale.

Rimane da giustificare lo sviluppo in serie di T_{fi} . Con l'espressione perturbativa, si ha:

I° ordine:

Considero:

$$-2\pi i \delta(E_f - E_i) T_{fi}^{(1)} = S_{fi}^{(1)} - \delta_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \lim_{t \rightarrow \infty; t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t dt' \langle f | H_I(t') | i \rangle$$

dove $|i\rangle$ e $|f\rangle$ sono autostati di H_0 . Poichè $H_I(t) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} V e^{-i\epsilon|t|} e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}}$, si ha ($E_f - E_i = \hbar\omega_{fi}$):

$$\begin{aligned} T_{fi}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \lim_{t \rightarrow \infty; t_0 \rightarrow -\infty} V_{fi} \int_{t_0}^t e^{i\frac{E_f - E_i}{\hbar} t'} e^{-\epsilon|t'|} dt' = \\ &= -\frac{i}{\hbar} V_{fi} \left(\frac{1}{\epsilon + i\omega_{fi}} + \frac{1}{\epsilon - i\omega_{fi}} \right) = -\frac{i}{\hbar} V_{fi} \frac{2\epsilon}{\epsilon^2 + \omega_{fi}^2} \end{aligned}$$

Se adesso $\epsilon \rightarrow 0$, si ha che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{i}{\hbar} V_{fi} \frac{2\epsilon}{\epsilon^2 + \omega_{fi}^2} = -\frac{2\pi i}{\hbar} \delta(\omega_f - \omega_i) V_{fi} \equiv -2\pi i \delta(\hbar\omega_f - \hbar\omega_i) V_{fi} = -2\pi i \delta(E_f - E_i) V_{fi}$$

dunque $T_{fi}^{(1)} = V_{fi}$.

II° ordine:

Studio l'integrale:

$$\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \langle f | H_I(t_1) H_I(t_2) | i \rangle =$$

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{-\epsilon|t_1|} \langle f | e^{i\frac{E_f t_1}{\hbar}} V e^{-i\frac{H_0 t_1}{\hbar}} e^{i\frac{H_0 t_2}{\hbar}} V e^{-i\frac{E_i t_2}{\hbar}} | i \rangle e^{-\epsilon|t_2|}$$

Definendo la nuova variabile $\tau = t_1 - t_2$, e osservando che $|\tau| \sim |t_1| + |t_2|$ (nel limite $t \rightarrow \infty$) ottengo:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 e^{i\frac{E_f t_1}{\hbar}} e^{-i\frac{E_i t_1}{\hbar}} \int_0^{t_1-t_2} d\tau e^{i\frac{E_i t_1}{\hbar}} e^{-i\frac{E_i t_2}{\hbar}} \langle f | V e^{-i\frac{H_0 \tau}{\hbar}} V | i \rangle e^{\epsilon|\tau|} = \\ & = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 e^{-i\frac{(E_f - E_i)t_1}{\hbar}} \int_0^{t_1-t_2} d\tau \langle f | V e^{i\frac{(E_i - H_0)\tau}{\hbar}} V | i \rangle e^{\epsilon|\tau|} \end{aligned}$$

Mandando $t \rightarrow \infty$ e $t_0 \rightarrow -\infty$ si ottiene finalmente:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-i\frac{(E_f - E_i)t_1}{\hbar}} \int_0^{\infty} d\tau \langle f | V e^{i\frac{(E_i - H_0)\tau}{\hbar}} V | i \rangle e^{\epsilon|\tau|} = \\ & = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle f | V \frac{i}{\frac{E_i - H_0}{\hbar} + i\epsilon} V | i \rangle (2\pi) \delta\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar}\right) = -2\pi i \frac{1}{\hbar^2} \langle f | V \frac{1}{\frac{E_i - H_0}{\hbar} + i\epsilon} V | i \rangle \delta\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

Sfruttando la completezza degli autostati di H_0 si può infine scrivere:

$$-2\pi i \delta(E_i - E_f) \sum_n \langle f | V | n \rangle \langle n | \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V | i \rangle = -2\pi i \delta(E_i - E_f) \sum_n \frac{V_{fn} V_{ni}}{E_i - E_n + i\epsilon}$$

Dunque $T_{fi}^{(2)} = \sum_n \frac{V_{fn} V_{ni}}{E_i - E_n + i\epsilon}$.

Come si è accennato, l' $i\epsilon$ a denominatore ha la funzione di regolarizzare la frazione, nell'eventualità che l'energia dello stato intermedio possa coincidere con quella dello stato iniziale. Ad esempio, nel caso di stati nel continuo, avremmo al posto della sommatoria un integrale:

$$\int d\Phi_n \frac{V_{fn} V_{ni}}{E_i - E_n + i\epsilon}$$

dunque per $E_i - E_n = 0$ ci sarebbe una discontinuità.

Domanda: che senso ha definire una probabilità di transizione per unità di tempo, se basta aspettare un tempo sufficientemente lungo affinché la probabilità diventi 1?

Risposta: In realtà, se c'è una transizione, lo stato da cui si parte necessariamente non può essere stabile, dunque cade l'ipotesi di $|i\rangle$ autostato di H (mentre $|i\rangle$ resta autostato di H_0). Dunque se un atomo effettua una transizione non sarà descritto dall'equazione di Schroedinger, ma per esso potrà essere definita una *vita media*, che dà un'idea di quanto tempo un atomo resti in un certo stato iniziale i prima di passare ad uno stato finale f . Quindi, se si aspetta un tempo maggiore di questa vita media non ha più senso parlare di probabilità di transizione da $|i\rangle$ a $|f\rangle$ perchè $|i\rangle$ non esiste più. In altre parole, dopo un certo periodo di tempo la probabilità di transizione smette di crescere linearmente col tempo. I tempi caratteristici delle transizioni atomiche, entro i quali ha senso parlare di probabilità di transizione, si aggirano tra i 10^{-15} e i 10^{-8} secondi.

3.3 30 ottobre

L'hamiltoniana del sistema atomo-campo è:

$$H = H_{at} + H_{e.m.} + V_1 + V_2$$

dove $H_{at} = \sum_r \frac{p_r^2}{2m_r} + V_{coul}$, $H_{e.m.} = \frac{1}{2} \int d^3x (\vec{A}^2 + (\nabla \times \vec{A})^2) = \sum_{k\alpha} \hbar\omega_k (a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + \frac{1}{2})$.
Supporremo di aver eliminato l'energia di zero, introducendo l'ordinamento normale:

$$: [a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + \frac{1}{2}] : \equiv [a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha}]$$

Lo spazio di Hilbert delle soluzioni del problema agli autovalori per l'hamiltoniana libera $H_{at} + H_{e.m.}$ è il prodotto diretto di autofunzioni atomiche $|A\rangle$ in uno spazio di Hilbert ordinario, e autofunzioni fotoniche $|n_{k_1\alpha_1}, n_{k_2\alpha_2}, \dots\rangle$ in uno spazio di Fock. Gli operatori che agiscono su $|A\rangle$ sono le $\vec{\xi}_r$ e le $\vec{p}_r = -i\hbar\nabla_{\vec{\xi}_r}$, che dipendono dall'indice di particella r ; su $|n_{k\alpha}, \dots\rangle$ agiscono invece gli operatori di creazione e distruzione $a_{k\alpha}^\dagger$ e $a_{k\alpha}$.

I potenziali di interazione sono V_1 e V_2 , valutati a $t = 0$:

$$V_1 = -\frac{e}{m} \sum_r \vec{p}_r \cdot \vec{A}(\vec{\xi}_r, 0)$$

$$V_2 = \frac{e^2}{2m} \sum_r (\vec{A}(\vec{\xi}_r, 0))^2$$

dove

$$\vec{A} = \sum_{k\alpha} \frac{1}{\sqrt{2\omega_k V}} (a_{k\alpha} \vec{\epsilon}^{(\alpha)}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\xi}} + h.c.)$$

Abbiamo visto che V_1 effettua solo transizioni a un fotone, dunque assorbimenti od emissioni, mentre V_2 fa transizioni a due fotoni o diffusione. Il processo al prim'ordine più generale è questo: (figura)

Ovvero si tratta dell'assorbimento di un fotone da parte dell'atomo nello stato A , e la successiva riemissione di un secondo fotone da parte dell'atomo stesso, che finisce nello stato A' . Tutto questo può avvenire o meno in presenza di altri fotoni (freccie orizzontali). In ogni caso si ha $n_{k\alpha} \rightarrow n_{k\alpha} \pm 1$ ($\Delta n = \pm 1$), dunque tale processo avviene ad ordine 1. Cercheremo allora gli elementi di matrice di V_1 , l'unico potenziale che abbia elementi di matrice non nulli ad ordine e :

$$\langle A'; \dots, n_{k\alpha} \pm 1, \dots | V_1 | A; \dots, n_{k\alpha}, \dots \rangle$$

3.3.1 Assorbimento

Supponiamo di considerare $\Delta n = -1$; V_1 contiene due tipi di operatori che possono agire sui vettori di stato:

$$\vec{p}^{(r)} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\xi}_r} \rightarrow |A\rangle$$

$$a_{k\alpha} \rightarrow |\dots, n_{k\alpha}, \dots\rangle$$

Allora, poichè $\langle n_{k\alpha} - 1 | a_{k\alpha} | n_{k\alpha} \rangle = \sqrt{n_{k\alpha}}$ per le proprietà degli operatori di distruzione, si ha:

$$V_{fi}^{ass} = \sqrt{n_{k\alpha}} \left(-\frac{e}{m} \right) \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2\omega_k V}} \langle A' | \sum_r \vec{p}^{(r)} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\xi}_r} | A \rangle \equiv \sqrt{n_{k\alpha}} (-e) \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2\omega_k V}} [(V_{at}^{ass})_{A'A}]$$

Per convenienza considereremo al posto dell'impulso \vec{p}^r la velocità $\vec{v}^r = \frac{\vec{p}^r}{m}$. Il fattore $\langle A' | \dots | A \rangle$ è un integrale atomico tra le funzioni d'onda $\psi_{A'}$ e ψ_A ; per ogni elettrone avrò un integrale del tipo

$$\int \psi_{A'}^* \left(-i\hbar \frac{\nabla \cdot \epsilon}{m} \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\xi}_r} \psi_A d^3\xi$$

che rappresenta un elemento di matrice di transizione atomica, assimilabile ad una corrente nell'irraggiamento classico, e qui interpretata come moto quantistico. La densità $\psi_{A'}^* \psi_A$ in questo caso è una densità di transizione poichè in generale $\psi_{A'}^* \neq \psi_A$.

Il fattore $\sqrt{n_{k\alpha}}$, invece, è un oggetto puramente di teoria dei campi, e specifica che l'assorbimento è proporzionale all'intensità dell'onda che incide sull'atomo.

3.3.2 Emissione

L'elemento di matrice stavolta è:

$$V_{fi}^{em} = (-e) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k V}} \sqrt{n_{k\alpha} + 1} \langle A' | \sum_r \vec{v}^{(r)} \cdot (\vec{\epsilon}^{(\alpha)}(\vec{k}))^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\xi}_r} | A \rangle \equiv (-e) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k V}} \sqrt{n_{k\alpha} + 1} [(V_{at}^{em})_{A'A}]$$

Osserviamo che stavolta nell'elemento di matrice di transizione atomica è presente non il versore di polarizzazione ma il suo complesso coniugato, e in generale si ha $\vec{\epsilon}^* \neq \vec{\epsilon}$. Stavolta abbiamo un fattore fotonico $\sqrt{n_{k\alpha} + 1}$, che sta ad indicare che l'operatore di creazione può agire anche sul vuoto (*emissione spontanea*). Se consideriamo le ampiezze di transizione di assorbimento e di emissione, si ha:

$$\mathcal{A}_{A'A}^{em} = (\mathcal{A}_{AA'}^{ass})^* \frac{\sqrt{n_{k\alpha} + 1}}{\sqrt{n_{k\alpha}}}$$

Il fattore $\frac{\sqrt{n_{k\alpha} + 1}}{\sqrt{n_{k\alpha}}}$ è la predizione più importante riscontrata finora.

La probabilità di transizione è allora:

$$\begin{aligned} dw_{A'A}^{em} &= dw_{AA'}^{ass} \frac{n_{k\alpha} + 1}{n_{k\alpha}} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} \delta(E_A - E_{A'} - \hbar\omega_k) \frac{e^2 \hbar}{2\omega_k V} |(V_{at}^{ass})_{AA'}|^2 n_{k\alpha} \frac{n_{k\alpha} + 1}{n_{k\alpha}} = \\ &= \frac{d^3k}{(2\pi)^2} \frac{e^2}{2\omega_k} |(\vec{\epsilon}^{(\alpha)} \cdot (\sum_r \vec{v}_r e^{i\vec{k} \cdot \vec{\xi}_r}))_{AA'}|^2 (n_{k\alpha} + 1) \delta(E_A - E_{A'} - \hbar\omega_k) \end{aligned}$$

Il modulo quadro dell'elemento di matrice rappresenta la parte dinamica del problema; il termine $e^{i\vec{k} \cdot \vec{\xi}_r}$ si può interpretare come funzione d'onda di un fotone libero di impulso $\hbar\vec{k}$. Nel caso atomico si ha che $\xi_r \sim 1\text{\AA}$ e $k^{-1} \sim 1000\text{\AA}$, quindi l'esponenziale può essere trascurato. Tale approssimazione è analoga all'approssimazione classica di dipolo,

ed equivale a trascurare sia la dipendenza della sorgente dal ritardo, che il rinculo del fotone. In queste ipotesi, resta da determinare l'elemento di matrice atomico dell'operatore $\sum_r \vec{v}_r \sim \frac{\vec{D}}{e}$.

Si può dunque riscrivere

$$\begin{aligned} \frac{dw}{d\Omega_k} &= \int_0^\infty \frac{e^2}{(2\pi)^2} \frac{k^2}{2\omega_k} (n_{k\alpha} + 1) \delta(E_A - E_{A'} - \hbar\omega_k) \left| \frac{\vec{D}}{e} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \right|_{AA'}^2 dk = \\ &= \int_0^\infty \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega_k}{c^2} (n_{k\alpha} + 1) \delta\left(\frac{E_A - E_{A'}}{\hbar} - \omega_k\right) \left| \frac{\vec{D}}{e} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \right|_{AA'}^2 d^3k = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega_k}{c^2} (n_{k\alpha} + 1) \left| \frac{\vec{D}}{e} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \right|_{AA'}^2 \end{aligned}$$

In caso non sia valida l'approssimazione di dipolo, sarebbe rimasto l'esponenziale e avremmo avuto come risultato finale:

$$\frac{dw}{d\Omega_k} = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega_k}{c^2} (n_{k\alpha} + 1) \left| \frac{\vec{D}}{e} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\xi}_r} \right|_{AA'}^2$$

3.3.3 Caso di dipolo

In rappresentazione di Heisenberg, la velocità $\vec{v} = \dot{\vec{\xi}}$ ha delle semplici equazioni di moto:

$$i\hbar \dot{\vec{\xi}} = [\vec{\xi}, H]$$

Si ha allora:

$$\begin{aligned} \langle A' | i\hbar \dot{\vec{\xi}} | A \rangle &= \langle A' | [\vec{\xi}, H] | A \rangle = \langle A' | \vec{\xi} H - H \vec{\xi} | A \rangle = \vec{\xi}_{A'A} (E_A - E_{A'}) = \vec{\xi}_{A'A} (\hbar\omega_k) \\ &\Rightarrow i\dot{\vec{\xi}}_{A'A} = \vec{\xi}_{A'A} \omega_k \end{aligned}$$

Dunque

$$\frac{dw}{d\Omega_k} = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega}{c^2} (n_{k\alpha} + 1) \omega^2 \left| \frac{1}{e} \vec{D}_{AA'} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \right|^2 = \frac{\alpha}{2\pi} \omega_k k^2 (n_{k\alpha} + 1) \left| \frac{1}{e} \vec{D}_{AA'} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \right|^2$$

L'energia emessa per unità di tempo e di angolo solido, ovvero $\frac{dW}{d\Omega_k}$, si può scrivere in maniera semiclassica come:

$$\frac{dW}{d\Omega_k} = \hbar\omega_k \frac{dw^{em}}{d\Omega_k}$$

Vediamo che l' \hbar della probabilità di emissione viene cancellato, in modo tale che l'energia finale (classica) non ne dipenda; inoltre si ha una dipendenza di tipo $\sim \omega_k^4$ dalla frequenza del fotone. Viceversa, si sarebbe potuto dedurre la probabilità di emissione per unità di tempo quantistica da una $\frac{dW}{d\Omega_k}$ calcolata classicamente, dividendola empiricamente per $\hbar\omega_k$, tuttavia avremmo perso alcune caratteristiche:

1. L'elemento di matrice atomico $\left| \frac{1}{e} \vec{D}_{AA'} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \right|$ avrebbe dovuto essere introdotto fenomenologicamente, in quanto non ha un corrispondente classico;
2. Una teoria classica non spiega l'emissione spontanea.

Una ulteriore differenza è che in questo caso abbiamo $\vec{D}_{AA'} \cdot \vec{\epsilon}$ e non \vec{D}_\perp : la meccanica quantistica infatti permette di predire la probabilità di transizione per unità di tempo e di angolo solido, su un ben preciso vettore di polarizzazione, a differenza del caso classico in cui ci si doveva accontentare della intera componente perpendicolare alla direzione di propagazione. Viceversa, se dal punto di vista quantistico non sto a guardare una precisa polarizzazione, la probabilità di transizione risultante è la somma delle probabilità relative alle due polarizzazioni possibili, e coincide effettivamente con il valore classico:

$$\sum_{\alpha=1,2} |\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)}|^2 = |\vec{D}_\perp|^2$$

Inoltre, a seconda della polarizzazione del fotone emesso o assorbito, si hanno diverse regole di selezione sulla terza componente del momento angolare:

1. Se la polarizzazione è rettilinea, si ha che $\Delta m = 0$;
2. Se la polarizzazione è circolare invece, $\Delta m = \pm 1$

Suppongo adesso che un atomo sia in uno stato eccitato: esso non vivrà in eterno, ma decadrà con una *vita media* che si può calcolare a partire dalla probabilità di transizione per unità di tempo. Ci sono vari tipi di decadimento, che coinvolgono il dipolo elettrico o multipoli superiori, oppure altri operatori. Ad esempio, si dice che lo stato $2p$ dell'idrogeno può *decadere di dipolo* (parità -) nello stato $1s$. La vita media τ è data da:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{dw}{d\Omega_k} = \frac{4}{3} \alpha k^2 \omega_k \left| \frac{1}{e} \vec{D}_\perp \right|_{A'A}^2$$

quindi non si guarda alla polarizzazione del fotone emesso e compare il termine \vec{D}_\perp .

3.3.4 Teoria dei campi e corpo nero

Consideriamo adesso una cavità le cui pareti per semplicità possano trovarsi solo negli stati $1s$ e $2p$; assimileremo quindi tale cavità ad un corpo nero con frequenza di transizione $\sim 1215\text{\AA}$. Vogliamo sapere l'intensità della radiazione elettromagnetica all'equilibrio ad una certa temperatura; utilizzeremo la relazione:

$$dw_{A'A}^{em} = dw_{AA'}^{ass} \frac{n_{k\alpha} + 1}{n_{k\alpha}}$$

Ad una data temperatura, le popolazioni N_A e $N_{A'}$ dovranno stare in una certa proporzione, data dal rapporto di Boltzmann:

$$\frac{N_{A'}}{N_A} = e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}$$

D'altronde, all'equilibrio si deve avere:

$$N_{A'} dw_{AA'}^{em} = N_A dw_{A'A}^{ass}$$

dunque $\frac{N_A}{N_{A'}} = e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} = \frac{n_{k\alpha}+1}{n_{k\alpha}}$. Sfruttando l'argomento di Einstein per il corpo nero, per cui il numero di occupazione medio per uno stato con vettore d'onda \vec{k} e polarizzazione α è dato da:

$$\langle n_{k\alpha} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1}$$

si ottiene che l'intensità si scrive come:

$$I(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{\hbar \langle n_{k\alpha} \rangle}{2\pi^2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^3$$

Tale intensità tiene conto anche dell'emissione spontanea, non presente nel caso classico poichè ad alte temperature $\frac{N_A}{N_{A'}} \sim 1$.

3.4 31 ottobre

Finora ci siamo limitati all'approssimazione di dipolo ($e^{i\vec{k}\cdot\vec{\xi}} \sim 1$); quando $\vec{k} \cdot \vec{\xi}$ non è più trascurabile, si ha al second'ordine un termine del tipo $(\vec{v} \cdot \vec{\epsilon})(\vec{k} \cdot \vec{\xi})$. Il motivo principale che ci porta a dover considerare ordini superiori è la necessità di spiegare transizioni altrimenti vietate dal dipolo, ad esempio transizioni tra stati con stessa parità, tra i quali \vec{D} ha valore di aspettazione nullo. Se $ka = \frac{2\pi a}{\lambda} \ll 1$ lo sviluppo in serie è del tipo:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{\xi}} \simeq 1 + i\vec{k} \cdot \vec{\xi}$$

e l'elemento di matrice di V_1 è quello precedentemente calcolato più una parte del second'ordine:

$$(V_1)_{A'A}^{(2)}(\Delta n = 1) = ie \sum_r (\vec{v}_r \cdot (\vec{\epsilon}^{(\alpha)})^*) (\vec{k} \cdot \vec{\xi}_r) = ie \sum_r v_r^i \xi_r^j \epsilon_i^{(\alpha)} \xi_r^j k_j = ie \sum_r v_r^i \epsilon_i^{(\alpha)} k_j$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo sfruttato il fatto che $\vec{\xi}$ commuta sia con \vec{k} che con $\vec{\epsilon}$. In questo caso gli operatori atomici contengono sia ξ_r^i che $v_r^j = \dot{\xi}_r^j$, dunque si ha un tensore a due indici, scomponibile in componenti di spin 2, 1 e 0. Lo spin 2 corrisponde al quadrupolo elettrico, lo spin 1 al dipolo magnetico. Possiamo riscrivere il tensore $e\dot{\xi}^i \xi^j$ come:

$$e\dot{\xi}^i \xi^j = \frac{e}{2}(\dot{\xi}^i \xi^j + \dot{\xi}^j \xi^i - \frac{2}{3}\vec{\xi} \cdot \vec{\xi} \delta^{ij}) + \frac{e}{2}(\dot{\xi}^i \xi^j - \dot{\xi}^j \xi^i) + e\frac{2}{3}\vec{\xi} \cdot \vec{\xi} \delta^{ij}$$

e osserviamo che:

- il primo termine è un tensore simmetrico a traccia nulla con 5 componenti indipendenti, e corrisponde quindi ad un operatore tensoriale con $l = 2$;
- il secondo termine è uno pseudovettore, ovvero un operatore vettoriale (assiale) con 3 componenti indipendenti ($l = 1$);
- l'ultimo termine è un multiplo della traccia del tensore, e non contribuisce alla transizione in quanto è uno scalare ($l = 0$), a meno che la transizione non sia quella banale $|i\rangle \rightarrow |i\rangle$

Considero allora il tensore $Q^{ij} = e \sum_r (\xi_r^i \xi_r^j - \frac{1}{3} \xi_r^2 \delta^{ij})$, e mi accorgo che il primo termine del tensore $e \dot{\xi}^i \xi^j$ corrisponde a meno di un fattore 2 a $\dot{Q}^{ij} = e(\dot{\xi}^i \xi^j + \xi^j \dot{\xi}^i - \frac{2}{3} \vec{\xi} \cdot \vec{\xi} \delta^{ij})$.

Definendo invece $\vec{\mu} = \frac{e}{2} \vec{\xi} \wedge \dot{\vec{\xi}}$, si ha che

$$\frac{e}{2} (\dot{\xi}^i \xi^j - \xi^j \dot{\xi}^i) = -\epsilon^{ijk} \mu^k$$

Osserviamo che il quadrupolo avendo $l = 2$ non cambia la parità e può effettuare transizioni con $\Delta l = 0, \pm 2$.

3.4.1 L'effetto Cerenkov

Consideriamo adesso il caso in cui non sia più possibile fare uno sviluppo in serie, ad esempio considerando una carica libera non ci si può più limitare a ξ dell'ordine delle dimensioni atomiche, e non si può più trascurare neanche il rinculo dell'atomo. Sotto queste ipotesi si può analizzare l'effetto Cerenkov, ovvero l'irraggiamento da parte di una carica in moto rettilineo uniforme. Supponiamo una carica in moto con impulso \vec{p} che emetta un fotone di impulso $\hbar \vec{k}$: (figura)

Manifestamente non stiamo trascurando il rinculo del fotone, e quindi il termine $e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$. Per la conservazione di energia e impulso si ha:

$$E(\vec{p}) = E(\vec{p} - \hbar \vec{k}) + \hbar \omega_k$$

ma possiamo supporre $\hbar k \ll p$ (ad esempio per fotoni nel visibile) e sviluppare al prim'ordine:

$$E(\vec{p}) = E(\vec{p}) - \nabla_{\vec{p}} E \cdot \hbar \vec{k} + \hbar \omega_k$$

Ma $\nabla_{\vec{p}} E$ è la velocità della particella, dunque si ha che:

$$\vec{v} \cdot \hbar \vec{k} = \hbar \omega_k = \hbar k c \quad (\text{nel vuoto})$$

ma $\vec{v} \cdot \hbar \vec{k} \leq |\vec{v}| |\hbar \vec{k}|$, dunque si dovrebbe avere che $vk\hbar \geq \hbar kc$, il che è assurdo poichè nel vuoto $v < c$. Dunque una particella carica in moto rettilineo uniforme, nel vuoto non può irraggiare con questa modalità.

Supponiamo allora di essere in un mezzo diverso dal vuoto, avremo dunque un misto tra quanti di luce e fononi di eccitazione. La velocità della luce passa da c a $\frac{c}{n}$, essendo n l'indice di rifrazione del mezzo. Si ha adesso che

$$\vec{v} \cdot \vec{k} = \frac{c}{n} k$$

e per la conservazione dell'impulso $vk \cos \theta = \frac{c}{n} k \Rightarrow \cos \theta = \frac{c}{nv}$, la particella quindi irraggia ad un angolo ben preciso, descrivendo quindi un cono.

Osservazioni:

- In una trattazione ondulatoria dell'effetto Cerenkov si spiega questa definitezza dell'angolo di emissione come dovuta a interferenza dell'onda d'urto, ma la trattazione è molto più complicata rispetto alla visione particellare.

- Il discorso concettuale visto adesso, ovvero la diversità di comportamento di una particella in un mezzo a seconda che la sua velocità stia sopra o sotto a un certo limite, si riapplica alla stessa maniera per la superfluidità: in tal caso ci si chiede se un oggetto in moto in un certo mezzo possa perdere energia e quindi irraggiare fononi.

Se l'effetto Cerenkov si riduce ad un irraggiamento, è descrivibile al prim'ordine. Poichè stavolta non siamo nel vuoto, cambierà l'espressione del campo elettrico:

$$H = \frac{1}{2} \int d^3x (\epsilon E^2 + B^2) = H = \frac{1}{2} \int d^3x (n^2 \vec{A}^2 + (\nabla \times \vec{A})^2)$$

Stavolta cambieremo opportunamente anche la normalizzazione di \vec{A} :

$$\vec{A} = \sum_{k\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{1\omega_k V}} \frac{1}{n} (\vec{\epsilon}_{k\alpha} a_{k\alpha} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega_k t)} + h.c.)$$

Dunque $(\vec{A})^2$ contiene un fattore $(-i\omega_k)^2$, e un fattore $\frac{1}{n^2}$ che cancella l' n^2 presente nell'hamiltoniana. Inoltre, $(\nabla \times \vec{A})^2$ contiene anch'esso un termine del tipo $\vec{k} \times \vec{A}$, e poichè $k = \frac{n\omega_k}{c}$, si ha di nuovo un termine del tipo n^2 che semplifica l' $\frac{1}{n^2}$ di \vec{A}^2 . Con queste considerazioni, l'hamiltoniana è ancora esprimibile come collezione di oscillatori armonici.

Infine, si ha che l'elemento di matrice $(V_1)_{\vec{p}\vec{p}'}$ è espresso da:

$$(V_1)_{\vec{p}\vec{p}'} = -\frac{e\sqrt{\hbar}}{n} \frac{\vec{\epsilon}_{k\alpha}^*}{\sqrt{2\omega_k V}} \delta_{\vec{k}, \frac{\vec{p}-\vec{p}'}{\hbar}}$$

Tale risultato si ottiene osservando che

$$\int d^3x \frac{e^{-\frac{i\vec{p}'\cdot\vec{x}}{\hbar}}}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \frac{e^{-\frac{i\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar}}}{\sqrt{V}} = \delta_{\vec{k}, \frac{\vec{p}-\vec{p}'}{\hbar}}$$

La delta è di Kronecker e non di Dirac perchè il volume è supposto finito e i vettori d'onda quantizzati. Inoltre, l'elemento di matrice si riduce a:

$$\langle p' | \frac{-e\vec{v} \cdot \vec{\epsilon}_{k\alpha}^* e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} a_{k\alpha}^\dagger \sqrt{\hbar}}{\sqrt{2\omega_k V} n} | p \rangle$$

Osserviamo adesso che $a_{k\alpha}^\dagger$, agendo sulla parte di moto fotonico ($|p\rangle \equiv |p\rangle \otimes |0\rangle$), rende 1. La probabilità di emissione è collegata all'elemento di matrice tramite la regola d'oro di Fermi:

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 \hbar |\vec{\epsilon}_{k\alpha} \cdot \vec{v}|^2}{n^2 2\omega_k V} \delta(E_p - E_{p'} - \hbar\omega_k) \frac{(2\pi)^3}{V} \delta^3\left(\frac{\vec{p}'}{\hbar} - \vec{k}\right) \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} \frac{V d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}$$

Osserviamo che siamo passati da una delta di Kronecker ad una delta di Dirac, per quanto riguarda gli impulsi, per comodità di calcolo. Il passaggio è lecito perchè (...). Nella delta di conservazione dell'energia compare un termine $(E_p - E_{p'})$, che si può riscrivere come:

$$E_p - E_{p'} = \hbar \vec{v} \cdot \vec{k}$$

In questo caso l'integrazione in d^3k restituisce:

$$\int d^3k \delta(\hbar v k \cos(\theta) - \hbar \omega_k) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos(\theta)) \delta(\hbar v k \cos(\theta) - \hbar \omega_k) \int_0^\infty dk k^2$$

L'integrazione della δ fissa il valore del $\cos(\theta)$:

$$\cos(\theta) = \frac{\hbar \omega_k}{\hbar v k} = \frac{c}{nv}$$

tuttavia, affinché questa espressione abbia senso è necessario che $c < nv$, e integrando la δ si ottiene una teta di Eulero: $\Theta(nv - c)$, ricordando che $n = n(\omega)$. Nella probabilità di emissione resta allora una distribuzione differenziale in frequenza:

$$\begin{aligned} dw &= \frac{2\pi e^2}{n^2 2\omega_k} \sum_{\vec{\epsilon}} |\vec{\epsilon} \cdot \vec{v}|^2 \frac{v}{\hbar} k^3 dk \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \Theta(nv - c) = \frac{1}{v} \frac{1}{n^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\hbar c} \right) \frac{c}{\omega_k} \frac{1}{\hbar^3} \left(\frac{\omega_k}{c} \right) \frac{d\omega_k}{c} v_\perp^2 = \\ &= \frac{\alpha}{v} \frac{1}{\hbar^3} \frac{1}{c} v_\perp^2 \end{aligned}$$

Ricordando che $v_\perp^2 = v^2 \sin^2(\theta) = v^2(1 - \frac{1}{2}(\frac{c}{nv})^2)$, si ha

$$\frac{dw}{d\omega} = \alpha \frac{v}{c} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{c}{nv} \right)^2 \right]$$

L'emissione come si è detto avviene solo se $\frac{c}{nv} < 1$, e poichè $n = n(\omega)$ avremo un taglio in frequenza: (figura)

ω_{MAX} di solito è nel visibile (blu)

3.4.2 Irraggiamento con accelerazione dovuta a urti: scattering Thomson

Si ha diffusione quando un fotone viene assorbito da un atomo in uno stato A , dopodichè viene riemesso un fotone dall'atomo stesso, che finisce nello stato A' (FIGURA)

In questo caso lo stato iniziale è non normalizzabile (il fotone incidente è descritto da un'onda piana) e sarà necessario misurare una sezione d'urto anzichè una probabilità di transizione per unità di tempo. Poichè è richiesta contemporaneamente la creazione e la distruzione di un fotone, il processo avviene all'ordine e^2 , dunque avremo contributi sia da $V_1^{(2)}$ che da $V_2^{(1)}$:

$$T_{fi}^{(2)} = (V_2)_{fi} + \sum_n \frac{(V_1^{(1)})_{fn} (V_1^{(1)})_{ni}}{E_i - E_n + \hbar\omega_1 + i\epsilon}$$

In generale non si possono trascurare questi due termini e vanno considerati entrambi; tuttavia, se l'energia del fotone è grande rispetto al salto di energia atomico ΔE , ma piccola rispetto alla massa dell'atomo $m_{at}c^2$, si può trascurare il secondo termine e limitarci all'elemento di matrice di V_2 (ad esempio, se l'energia del fotone è di $\sim 100eV \ll 1MeV$). Ricordiamo l'espressione di V_2 :

$$V_2 = \frac{e^2}{2m} \left(\sum_{k\alpha, r} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k V}} (a_{k\alpha} \vec{\epsilon}_{k\alpha} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{\xi}_r - \omega_k t)} + h.c.) \right)^2$$

$$\Rightarrow (V_2)_{fi} = \langle A' | \otimes \langle k_2 \alpha_2 | V_2 | k_1 \alpha_1 \rangle \otimes | A \rangle = \frac{e^2}{2m} \frac{\hbar(\vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{\epsilon}_2^*)}{\sqrt{2\omega_1 V 2\omega_2 V}} \langle A' | \sum_r e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{\xi}_r} | A \rangle$$

Questo perchè sopravvive solo il termine in cui $a_{k_1 \alpha_1}$ distrugge il fotone 1, e $a_{k_2 \alpha_2}^\dagger$ crea il fotone 2. Se ci mettiamo in approssimazione di dipolo, trascuriamo l'esponenziale e il suo elemento di matrice diventa semplicemente $\delta_{AA'} n_e$, dove la delta è una delta formale che indica che lo stato atomico è pressochè inalterato (scattering elastico), e n_e è il numero di elettroni atomici.

Normalizzando a flusso unitario la probabilità di transizione, si ottiene la sezione d'urto:

$$d\sigma = \frac{dw}{\Phi_i}$$

Dove $\Phi_i = \frac{c}{V}$ (V è il volume del sistema). Si ha allora:

$$d\sigma = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\delta(\hbar(\omega_1 - \omega_2))}{\frac{c}{V}} \left| \frac{e^2 n_e}{2m} \frac{\hbar(\vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{\epsilon}_2^*)}{\sqrt{4V^2 \omega_1 \omega_2}} \right|^2 \frac{V d^3 k_2}{(2\pi)^3}$$

Integro in dk e grazie alla δ ottengo ($k_1 = k_2$, $\omega_1 = \omega_2$):

$$d\sigma = \frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{c^2} \left| \frac{e^2}{2m} \frac{\hbar(\vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{\epsilon}_2^*)}{2\omega_1} \right|^2 \frac{1}{c^2} \frac{k_1^2}{4\pi^2} d\Omega_2 = \left| \frac{e^2}{4\pi m c^2} \vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{\epsilon}_2^* \right|^2 d\Omega_2 = r_0^2 |\vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{\epsilon}_2^*|^2$$

dove r_0 rappresenta la distanza a cui dovrebbero essere due cariche e di massa m affinché la loro energia elettrostatica sia dell'ordine di mc^2 (*raggio classico*).

Osservazioni:

- In sostanza la sezione d'urto ricavata è quasi classica, l'unica cosa non classica è il prodotto scalare $\vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{\epsilon}_2^*$. Tale risultato era ottenibile anche per via classica, ma la trattazione quantistica permette di generalizzare al caso anelastico;
- Poichè $\hbar\omega$ deve essere molto maggiore di ΔE , non siamo in approssimazione di basse frequenze;

$\vec{\epsilon}_1$ e $\vec{\epsilon}_2^*$ assumono il significato di vettore di polarizzazione iniziale e finale; si possono fare misure polarizzate e non polarizzate, ma bisogna avere presente come creare una base di polarizzazioni standard. Quale $\vec{\epsilon}$ scelgo per il fascio finale? (figura)

Si può scegliere $\vec{\epsilon}_2$ nel piano $\vec{k}z$ ($\vec{\epsilon}_{in}$) oppure perpendicolare ad esso ($\vec{\epsilon}_{out}$). Le componenti di tali vettori, rispetto a θ (*anomalia*) e ϕ (*azimut*), sono:

- $\vec{\epsilon}_{in} = (\cos(\theta) \cos(\phi), ,)$
- $\vec{\epsilon}_{in} = (, ,)$
- $\vec{k} = (, ,)$

Se non si guarda la polarizzazione, la distribuzione angolare è data da $\sum_{\epsilon_2} r_0^2 |\vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{\epsilon}_2^*|^2$, sommata cioè su tutte le possibili orientazioni indipendenti di $\vec{\epsilon}_2$ ortogonali a \vec{k} .

3.4.3 Scattering Raman

Abbiamo visto che la diffusione di fotoni è un processo del second'ordine che può avere contributi dal primo ordine di V_2 e dal second'ordine di V_1 . Se $\hbar\omega_1 \gg \Delta E$, ovvero l'energia della radiazione incidente è molto maggiore dell'energia che separa due livelli, si ha sostanzialmente scattering Thomson con sezione d'urto proporzionale al raggio classico dell'elettrone al quadrato. Il diagramma è (figura). Viceversa, se la frequenza della radiazione è paragonabile a $\frac{\Delta E}{\hbar}$, si hanno due possibilità: (figura 1 e figura 2)

Lo stato intermedio n ha energia E_n , mentre lo stato intermedio m ha energia $E_n + \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2$, dove (1) e (2) sono i fotoni iniziale e finale, che nel secondo caso fanno entrambi parte dello stato intermedio. Questo non ci sorprende poichè $H_0 = H_{at} + H_{rad}$ e gli autostati di H_0 possono essere prodotti di autostati atomici e autostati fotonici. Sia lo stato iniziale di I che quello di II hanno stessa energia $E_A + \hbar\omega_1$, così come gli stati finali hanno in entrambi i casi energia $E_{A'} + \hbar\omega_2$. Posso allora scrivere il contributo al second'ordine di V_1 come:

$$\begin{aligned} (V_1^{(2)})_{A'A} &= \sum_n \frac{(V_1^+)_{A'n}(V_1^-)_{nA}}{E_1 - E_n + \hbar\omega_1 + i\epsilon} + \sum_m \frac{(V_1^-)_{A'm}(V_1^+)_{mA}}{\hbar\omega_1 + E_A - E_m - \hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 + i\epsilon} = \\ &= \sum_n \frac{(V_1^+)_{A'n}(V_1^-)_{nA}}{\hbar(\omega_1 - \omega_{nA}) + i\epsilon} + \sum_m \frac{(V_1^-)_{A'm}(V_1^+)_{mA}}{-(\hbar\omega_{mA} - \hbar\omega_2) + i\epsilon} \end{aligned}$$

Adesso vediamo per la prima volta l'utilità dell' $i\epsilon$ a denominatore: se A' è uno stato eccitato, e A è il fondamentale, ω_{nA} è positiva e può essere uguale a ω_1 , quindi il denominatore si annullerebbe se non fosse per $i\epsilon$. Tuttavia, in realtà non siamo esattamente nel discreto, poichè gli stati non sono stabili: ciascuno stato ha una sua vita media, e procedendo ad uno sviluppo al 4° ordine (α^4) si trova che $\epsilon = \frac{1}{\tau}$. In questo modo, l'ampiezza di risonanza Raman è 8-10 ordini di grandezza maggiore di quella Thomson. Inoltre questo tipo di scattering può avvenire con cambio di stato atomico, ed è di solito anelastico. A seconda di dove sono collocati gli stati n ed m , possono essere importanti i termini (I) o (II), ad esempio se $E_{A'} > E_n > E_A$ si ha che $\omega_{mA} < 0$ e anche il secondo denominatore può annullarsi. E' possibile esprimere T_{fi} in questi termini:

$$T_{fi} = \left(\frac{\hbar}{V\sqrt{\omega_1\omega_2}} \right) f_{A'A}$$

dove $\frac{\hbar}{V\sqrt{\omega_1\omega_2}}$ è un fattore cinematico, e $f_{A'A}$ ha le dimensioni di una lunghezza, ed è una combinazione delle ampiezze di scattering Thomson, (I) e (II):

$$f_{A'A} = f_T + f_I + f_{II}$$

E' possibile definire una sezione d'urto:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega_2}{\omega_1} \left| \frac{f_{A'A}}{4\pi} \right|^2$$

In approssimazione di dipolo si ha:

$$f_T = \frac{2e^2}{m} \vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{\epsilon}_2^* n_e \delta_{A'A}$$

$$f_I = \frac{1}{2} \frac{(\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_2^*)_{A'n} (\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_1)_{nA}}{\hbar(\omega_1 - \omega_{nA}) + i\epsilon}$$

$$f_{II} = -\frac{1}{2} \frac{(\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_1)_{A'm} (\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_2^*)_{mA}}{\hbar(\omega_1 + \omega_{mA}) - i\epsilon}$$

E' possibile scrivere gli elementi di matrice di \vec{D} in termini di quelli di \vec{D} , similmente a come si era fatto per la transizione di dipolo in cui $\vec{D}_{A'A} = i\omega_{A'A} \vec{D}_{A'A}$. Adesso però ci sono due elementi di tipo \vec{D} , e salta fuori una ω_{nA} che dipende da n . Tuttavia ci sono delle regole di somma che permettono di affermare che i \vec{D} commutano tra loro mentre \vec{D} e \vec{D} hanno commutatore non nullo e proporzionale a $i\hbar e^2$. Tramite tali considerazioni, si può riscrivere $f_{A'A}$ come segue:

$$f_{A'A} = \omega_1 \omega_2 \left[\frac{(\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_2^*)_{A'n} (\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_1)_{nA}}{\hbar(\omega_1 - \omega_{nA}) + i\epsilon} - \frac{(\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_1)_{A'm} (\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_2^*)_{mA}}{\hbar(\omega_1 + \omega_{mA}) - i\epsilon} \right]$$

allora si ha che:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega_2}{\omega_1} \left| \frac{f_{A'A}}{4\pi} \right|^2 = \omega_2^3 \omega_1 \left| \left[\frac{(\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_2^*)_{A'n} (\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_1)_{nA}}{\hbar(\omega_1 - \omega_{nA}) + i\epsilon} - \frac{(\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_1)_{A'm} (\vec{D} \cdot \vec{\epsilon}_2^*)_{mA}}{\hbar(\omega_1 + \omega_{mA}) - i\epsilon} \right] \right|^2$$

e si osserva che c'è una dipendenza di tipo ω^4 dalla frequenza, tipica della diffusione atomica. Classicamente $f(\theta)$ in approssimazione di Born descriveva lo scattering senza spin, adesso grazie alla presenza dei vettori di polarizzazione lo scattering comprende anche lo spin. In definitiva, ad alte frequenze incidenti non si vede più la struttura dell'atomo e si ha solo scattering Thomson, mentre per basse frequenze lo scattering ha una sezione d'urto proporzionale a ω^4 .

3.5 Complementi ed esercizi

3.5.1 L'effetto Aharonov-Bohm

L'effetto Aharonov-Bohm è il risultato di una misura concettuale che controlla certi aspetti della quantizzazione del campo elettromagnetico. In alcuni casi considerare potenziali al posto dei campi può portare a dei paradossi, consideriamo infatti il seguente esperimento: (figura)

Abbiamo un fascio di elettroni che incide su un bersaglio costituito da due fenditure, oltre le quali è sistemato uno schermo S . Tra le fenditure e lo schermo è posto un cilindro di raggio a con asse perpendicolare al foglio e contenente un campo magnetico \vec{B} costante e diretto parallelamente all'asse del cilindro. Il cilindro è supposto perfettamente isolante e all'esterno si ha dunque $\vec{B} = 0$. Supponiamo inoltre $a \ll D$.

Sullo schermo, quando \vec{B} è spento, si formano delle figure di interferenza come usuale. Ma se \vec{B} viene acceso, ci sono due modi di pensare:

- Si potrebbe pensare che l'accensione del campo non provochi nessun cambiamento nel sistema, visto che l'onda elettronica si propaga in una zona senza campo magnetico, e la regione di spazio occupata dal cilindro è trascurabile.
- Viceversa, quantizzando in gauge di Coulomb abbiamo un potenziale vettore \vec{A} sia dentro che fuori il cilindro, e questo potenziale è tale che prendendone la circuitazione lungo un cammino chiuso C attorno al cilindro, si ha:

$$\int_C \vec{A} \cdot d\vec{s} = B\pi a^2$$

Se \vec{A} è presente, non c'è motivo di pensare che l'equazione di Schroedinger debba avere la stessa soluzione dell'equazione libera; ragionando in termini di campi invece non ci sarebbe questo problema e le soluzioni coinciderebbero. L'esperienza tuttavia mostra che accendendo il campo \vec{B} le frange di interferenza si spostano di una quantità $\frac{B\pi a^2}{\frac{e}{\hbar c}}$, dove $\frac{e}{\hbar c}$ è il quanto elementare di flusso.

L'equazione di Schroedinger che descrive la propagazione del fascio si ottiene da quella libera tramite sostituzione minimale:

$$H = \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m}$$

Nei punti in cui $\vec{B} = 0$, \vec{A} è esprimibile come gradiente di una certa funzione Λ , e si può quindi scrivere:

$$H = \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\nabla\Lambda)^2}{2m}$$

Se ψ_0 è la soluzione dell'equazione di Schroedinger libera, allora la soluzione per l'equazione con \vec{A} è data da:

$$\psi = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_r \vec{A} \cdot d\vec{s}\right) \psi_0$$

infatti si ha

$$\vec{p}\psi = -i\hbar\nabla\psi = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_r \vec{A} \cdot d\vec{s}\right) [-i\hbar\nabla\psi_0 + i\frac{e}{\hbar c}(-i\hbar)\vec{A}]$$

in modo che

$$(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\psi = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_r \vec{A} \cdot d\vec{s}\right) \vec{p}\psi_0$$

Dunque se ψ_0 è soluzione dell'equazione libera, $\psi_0 \exp(\frac{ie}{\hbar c} \int_r \vec{A} \cdot d\vec{s})$ è soluzione dell'equazione con il campo magnetico. Tuttavia $\int_r \vec{A} \cdot d\vec{s}$ dipende dal cammino r scelto, e non è possibile stabilire univocamente una costante di integrazione: (figura) Dunque, il fascio (2) ha uno sfasamento rispetto al fascio (1) dato da $\Delta\phi = \frac{e}{\hbar c} \int_r \vec{A} \cdot d\vec{s} = \frac{e}{\hbar c} B\Sigma$, quindi le frange di interferenza si spostano all'accensione del campo \vec{B} ; inoltre, la funzione $\phi_r = \frac{ie}{\hbar c} \int_r \vec{A} \cdot d\vec{s}$ non è monodroma.

Consideriamo adesso il caso di una trasformazione di gauge per l'hamiltoniana $H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2$:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \nabla\Lambda$$

dove Λ è una funzione *monodroma* e non dipendente dal tempo, in modo che $A^0 \rightarrow A^0$. Poichè Λ è monodroma, la trasformazione di gauge è innocua, nel senso che manda soluzioni monodrome in soluzioni monodrome:

$$\psi_{A'} = \psi_A e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(\vec{x})}$$

e

$$\vec{p}\psi_{A'} = e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda}(\vec{p} + \frac{e}{c}\nabla\Lambda)\psi_A$$

La fase di ψ_A è modificata di un fattore monodromo, dunque una trasformazione di gauge equivale alla moltiplicazione per una fase. Allora si deve tenere presente un dettaglio: prima abbiamo moltiplicato la funzione ψ_0 per un fattore di fase chiaramente non monodromo, ottenendo però una soluzione monodroma. Questo significa che l'evoluzione libera non è una funzione monodroma, dunque non è soluzione dell'equazione di Schroedinger con i potenziali e il campo acceso.

3.5.2 Esercizi

1. Lagrangiana relativistica ed equazioni del moto
2. Effetto Aharonov-Bohm

Capitolo 4

Condensazione di Bosoni e superfluidità

4.1 7 novembre

La teoria dei campi è utile anche per trattare sistemi di particelle a basse temperature. Finora abbiamo considerato sistemi a numero di occupazione variabile, come quello fotonico o fononico, adesso il numero di particelle resterà fisso perchè l'energia è piccola rispetto all'energia di riposo delle particelle in gioco, ma quello che sarà variabile è il numero di particelle eccitate rispetto a quelle nello stato fondamentale. Le eccitazioni presenti allora non saranno più localizzate su una singola particella ma corrisponderanno ad eccitazioni collettive.

Esempi:

- **Gas di Bose:** c'è un solo stato quantistico in cui le particelle posso finire quando la temperatura va a 0. Tale stato è uno stato collettivo in cui classicamente tutte le particelle sono ferme, mentre quantisticamente non vengono eccitate particelle singole ma moti collettivi. Tali eccitazioni collettive non sono propriamente onde poichè come vedremo differiscono da esse per la relazione di dispersione.
- **Gas di Fermi:** diversamente dal caso di Bose, adesso tutti gli stati si impilano fino a raggiungere l'energia di Fermi, e le particelle che possono variare il loro impulso sono soltanto quelle ad energia maggiore.

Nei due casi si ha una distribuzione di probabilità del tipo: (figura)

Come abbiamo anticipato, si cambia punto di vista per quanto riguarda la regola di dispersione. Per le particelle abbiamo infatti le seguenti relazioni tra impulso ed energia ($c = 1$):

- $E(\vec{p}) = m + \frac{p^2}{2m}$ (classica)
- $E(\vec{p}) = \sqrt{p^2 + m^2}$ (relativistica)

Da esse si può ottenere una relazione di dispersione usando le relazioni di de Broglie tra impulso e lunghezza d'onda; abbiamo dunque due casi:

- $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ (**campo di Schroedinger**)
- $\omega = \sqrt{k^2 + (\frac{m}{\hbar})^2}$ (**campo di Dirac a spin 0**)

Osserviamo prima di tutto che la regola di dispersione dipende da \hbar , dunque le onde che descrivono le fluttuazioni di gas di Bose o di Fermi a basse temperature *non sono onde classiche*.

Come si quantizza il campo di Schroedinger? Supponiamo che una particella possa essere descritta da una funzione d'onda del tipo:

$$|\psi\rangle = \sum_k \tilde{\psi}_k a_k |0\rangle$$

Questa espressione descrive la funzione d'onda di una particella con un certo impulso, e $\tilde{\psi}_k$ rappresenta l'ampiezza di probabilità che la particella possa avere impulso k .

Ancora non abbiamo aggiunto niente alla teoria precedente. Si aggiunge qualcosa quando si scrive l'hamiltoniana nella forma seguente:

$$H = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_k^\dagger a_k$$

ovvero l'hamiltoniana di un insieme di particelle libere con vettore d'onda k . Se passiamo alla rappresentazione delle coordinate, per definizione si ha:

$$|\psi\rangle = \int d^3x \psi(\vec{x}) \phi^\dagger(\vec{x}, 0) |0\rangle$$

Definisco ϕ^\dagger come operatore di creazione nel punto \vec{x} . Se $\psi(\vec{x})$ è descritta come sovrapposizione di onde piane: $\psi(\vec{x}) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tilde{\psi}_k$, allora si può scrivere

$$|\psi\rangle = \int d^3x \sum_k \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \tilde{\psi}_k \phi^\dagger(\vec{x}, 0) |0\rangle$$

dunque ricordando che $|\psi\rangle = \sum_k \tilde{\psi}_k a_k^\dagger |0\rangle$, si può identificare ϕ^\dagger con $\sum_k \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} a_k^\dagger$, in modo tale da avere:

$$|\psi\rangle = \int d^3x \frac{1}{V} \sum_k \tilde{\psi}_k a_k^\dagger |0\rangle = \sum_k \tilde{\psi}_k a_k^\dagger |0\rangle$$

Dunque $\phi^\dagger(\vec{x}, 0)$ è la trasformata di Fourier discreta di a_k^\dagger .

Poichè $H = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_k^\dagger a_k$ è indipendente dal tempo, si ha che:

$$\phi(\vec{x}, t) = e^{i\frac{Ht}{\hbar}} \phi(\vec{x}, 0) e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} = \sum_k \frac{1}{V} a_k e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega_k t)}$$

dove $\omega_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$. La differenza principale con le onde classiche sta nel fatto che l'equazione di d'Alembert è del secondo ordine nel tempo e ammetteva soluzioni con frequenze sia positive

che negative; adesso, l'equazione di Schroedinger è del primo ordine e si hanno frequenze solo positive. In questo caso è possibile separare ϕ^\dagger e ϕ , e interpretarli come operatori locali di creazione e distruzione. L'analogo risultato del secondo ordine non permetteva invece questa interpretazione poichè gli operatori risultanti avevano commutatore non proporzionale ad una δ di Dirac.

Esempio: ricordiamo che nel caso dei fotoni avevamo:

$$\tilde{\phi}^\dagger = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\omega_k V}} a_k^\dagger e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t)}$$

ed era proprio il fattore $\frac{1}{\sqrt{2\omega_k V}}$ che modificava il commutatore tra $\tilde{\phi}$ e $\tilde{\phi}^\dagger$.

Adesso invece si avrà che $[\phi(\vec{x}, 0), \phi^\dagger(\vec{y}, 0)] = \delta(\vec{x} - \vec{y})$, poichè per ipotesi assumeremo regole di commutazione per a_k e a_k^\dagger del tipo $[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}$.

E' infatti possibile scrivere una densità lagrangiana del tipo:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\phi, \phi^\dagger, \dot{\phi}, \dot{\phi}^\dagger, \partial_i \phi, \partial_i \phi^\dagger) = i\hbar \phi^\dagger \dot{\phi} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi^\dagger \nabla \phi$$

Variando rispetto a $\dot{\phi}$ si ottiene un momento coniugato della forma:

$$\pi = i\hbar \phi^\dagger$$

mentre non esiste un momento coniugato a ϕ^\dagger . La densità hamiltoniana dunque si scrive:

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\phi} - \mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi^\dagger \nabla \phi$$

Imponiamo regole di commutazione canoniche per ϕ e π :

$$[\phi(\vec{x}, 0), \pi(\vec{y}, 0)] = i\hbar \delta(\vec{x} - \vec{y})$$

da cui (come avevamo anticipato) deriva $[\phi(\vec{x}, 0), \phi^\dagger(\vec{y}, 0)] = \delta(\vec{x} - \vec{y})$ poichè $\pi = i\hbar \phi^\dagger$. ϕ e ϕ^\dagger adesso sono campi complessi, e questo commutatore non nullo è l'esternazione del fatto che la parte reale di ϕ non commuta con la parte immaginaria. Si può pensare di riscrivere il campo ϕ come

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi + i\theta)$$

dove φ e θ sono due operatori hermitiani non commutanti.

Osservazioni:

1. E' possibile ottenere un'equazione del second'ordine, simile a quella delle onde, anche per il campo di Schroedinger, combinando opportunamente l'equazione di Schroedinger e la sua complessa coniugata. (fare il conto)

4.1.1 L'hamiltoniana di interazione di Landau

Aggiungiamo adesso l'interazione tra le particelle a bassa temperatura; si può scrivere una hamiltoniana efficace, dovuta a Landau:

$$H_{eff} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi^\dagger \nabla \phi - \mu \phi^\dagger \phi + \frac{1}{2} g (\phi^\dagger \phi)^2$$

Tale hamiltoniana descrive la formazione del condensato, pur contenendo termini che descrivono la repulsione tra gli atomi a piccole distanze (\Rightarrow grandi densità). Abbiamo a che fare con particelle di spin 0 (bosoni) che soddisfano ad una statistica del tipo (particelle identiche):

$$n_k = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_k - \mu}{KT}} - 1}$$

dove μ è il potenziale chimico. Una volta fissato il numero di particelle, μ agisce come un moltiplicatore di Lagrange.

Si ha che $\sum_k n_k = N$; nell'ipotesi in cui gli n_k non siano troppo grandi, e il volume $V \rightarrow \infty$, si può scrivere:

$$\sum_k n_k \rightarrow V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_k - \mu}{KT}} - 1} = N$$

Il potenziale chimico deve essere negativo o nullo altrimenti l'integrando avrebbe una singolarità non eliminabile (polo in $k = 0$). Se pongo $\alpha = \frac{\mu}{KT}$, $\frac{N}{V} = n$, e $\frac{\hbar^2 k^2}{2mKT} = x^2$, definendo inoltre $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\pi mKT}}$, si può mettere l'equazione nella forma:

$$n\lambda^3 = \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^{x^2 - \alpha} - 1} = f(\alpha)$$

Se α è sufficientemente negativo, $e^{x^2 - \alpha} \gg 1$ e l'integrando è sostanzialmente esponenziale; per $\alpha = 0$ l'oggetto tende a un valore finito: $f(0) = \zeta(\frac{3}{2})$. Dunque se $\frac{n}{T^{3/2}}$ è sufficientemente grande si arriva ad una temperatura critica per cui $n\lambda(T_c) = \zeta(\frac{3}{2})$. In tal caso necessariamente $\alpha = 0$ (e quindi $\mu = 0$); inoltre scendendo sotto tale temperatura critica si otterrebbe una contraddizione perchè $n\lambda^3$ continua a crescere mentre l'integrale non può aumentare, a meno di divergere. In realtà c'è una scappatoia formale, nel fatto che non sempre ha senso sostituire la sommatoria con l'integrale, e nessuno vieta agli n_k di essere grandi quanto vogliono. Suppongo allora che ci sia un numero fisso di particelle nello stato fondamentale, N_0 , e vado a vedere a quanto ammonta il valore $N - N_0 = N(T) = \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^{x^2 - \alpha} - 1}$ (per $T < T_c$): infatti, nell'integrale non compaiono i modi con energia nulla, e per questo assume il significato di numero di particelle eccitate a temperatura T .

Nella Hamiltoniana di Landau, il segno - davanti al coefficiente μ (che ha il significato di potenziale chimico, stavolta > 0) ci dice che la situazione in cui tutte le particelle sono ferme è instabile, e queste tenderanno a muoversi diminuendo l'energia del sistema. Il termine proporzionale a $|\phi|^4$ è invece un termine stabilizzatore che si oppone a densità troppo basse: (figura)

Dunque i numeri di occupazione per piccoli k sono anch'essi piccoli. Come avevamo già osservato, se T scende sotto la temperatura critica, anche $\mu = 0$, altrimenti l'integrale diverge. In tal caso il numero di particelle nel fondamentale, $\frac{N_0}{V}$, è pari a $\frac{\zeta(\frac{3}{2})}{\lambda^3}$.

Abbiamo visto che lo stato di vuoto non è un punto di equilibrio stabile per il potenziale, dunque sceglieremo l'altro punto di minimo, per $|\phi| = \sqrt{\frac{\mu}{g}} \equiv \phi_0$, e chiamiamo $|\phi_0\rangle$ lo stato corrispondente. Risulta che $|\phi_0\rangle$ è uno stato coerente per l'operatore a_0 :

$$|\phi_0\rangle = N \exp(\sqrt{V}\phi_0 a_0^\dagger)|0\rangle$$

Identificando $|\phi_0|^2 \frac{\mu}{g}$ con $\frac{N_0}{V} = n_0$ si può riscrivere:

$$|\phi_0\rangle = N \exp(\sqrt{N_0}a_0^\dagger)|0\rangle$$

N è l'operatore numero: $N = \sum_k a_k^\dagger a_k$.

Se prendiamo $\phi(\vec{x}, 0) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{V}} a_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ e lo applichiamo a $|\phi_0\rangle$, otteniamo il seguente risultato: (fare conto)

Osserviamo che l'hamiltoniana è invariante per rotazioni del campo ϕ di un angolo θ , tuttavia, una volta scelta la fase la fisica non è più invariante, e si dice che la scelta dello stato fondamentale per il nuovo sviluppo *rompe la simmetria*. In ogni caso, l'hamiltoniana per come è scritta non è in grado di predire quale sia θ , dunque siamo autorizzati a sceglierlo uguale a 0 per semplicità. Allora si ha

$$\phi^\dagger \phi = \frac{\mu}{g} + \sqrt{\frac{\mu}{g}}(\phi + \phi^\dagger) + \tilde{\phi}^\dagger \tilde{\phi} \quad (4.1)$$

e l'hamiltoniana si può riscrivere come

$$H_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi^\dagger \nabla \phi - \frac{\mu^2}{2g} + \frac{\mu}{2(\tilde{\phi} + \tilde{\phi}^\dagger)} + O(\phi^3, \phi^4) \quad (4.2)$$

dove ϕ^3 e ϕ^4 rappresentano oscillazioni anarmoniche e riguardano interazioni tra eccitazioni.

Considero poi l'hamiltoniana totale, ovvero

$$H = \int_V d^3x H_{eff} = -\frac{\mu^2}{2g} V + \sum_k \left(\mu + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) a_k^\dagger a_k + \frac{\mu}{2} (a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) + O(a^3, a^4) \quad (4.3)$$

dove i termini del tipo aa e $a^\dagger a^\dagger$ derivano da

$$\int \tilde{\phi}^2(\vec{x}) d^3x \quad (4.4)$$

Ci sono due fatti sorprendenti: 1) Gli elementi aa e $a^\dagger a^\dagger$ conservano l'impulso, in quanto creano o distruggono una coppia di eccitazioni con impulsi uguali e opposti, però non conservano il numero di particelle, in quanto

$$a_k^\dagger a_k \Rightarrow \Delta n = 0 \quad ; \quad a_k^\dagger a_k^\dagger \Rightarrow \Delta n = +2 \quad a_k a_k \Rightarrow \Delta n = -2 \quad (4.5)$$

Si ha che l'operatore numero $N = \sum_k a_k^\dagger a_k$ è il generatore delle rotazioni globali del sistema: (metti dim)

Siamo in condizioni per cui N_0 è così grande da poter essere considerato come un termostato per le particelle negli stati eccitati, in quanto la fluttuazione di un numero di particelle dell'ordine dell'unità può essere considerato irrisorio nei confronti di un numero di particelle nello stato fondamentale dell'ordine del numero di Avogadro. Nel nuovo stato fondamentale abbiamo congelato l'operatore a_0 sostituendolo con un numero, il suo autovalore ϕ_0

2) Se prendo lo stato $|\phi_0\rangle$ e su di esso cerco il valore di aspettazione dell'hamiltoniana, trovo 0; infatti $a_0|\phi_0\rangle = \sqrt{N_0}|\phi_0\rangle$ ma se $k \neq 0$ ho che $a_k|\phi_0\rangle = 0$ dunque scegliendo degli opportuni stati H potrà avere valori di aspettazione negativi, e $|\phi_0\rangle$ non sarà più lo stato fondamentale.

H adesso non è diagonalizzata dai consueti operatori di creazione e distruzione a_k^\dagger e a_k , ma da opportune loro combinazioni, ottenibili mediante le trasformazioni di Bogoliubov, imponendo un certo numero di condizioni. Cerco infatti due nuovi operatori A_k^\dagger e A_k , tali che

$$[A_k, A_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \quad (4.6)$$

Se definisco $A_k = c_k a_k + s_k a_{-k}^\dagger$, questo implica che

$$[c_k a_k + s_k a_{-k}^\dagger, c_{k'} a_{k'} + s_{k'} a_{-k'}^\dagger] = c_k^2 - s_k^2$$

cioè si può scegliere $c_k = \cosh(\frac{\theta_k}{2})$ e $s_k = \sinh(\frac{\theta_k}{2})$. In questo modo, H si riscrive come:

$$H = -\frac{\mu^2}{2g}V + E_0 + \sum_k \epsilon(\vec{k}) A_k^\dagger A_k$$

dove E_0 è una costante aggiunta ad hoc. Adesso H è espressa come collezione di oscillatori liberi rispetto a A_k^\dagger e A_k .

Vediamo adesso quali sono le condizioni che determinano c_k , s_k e la regola di dispersione $\epsilon(\vec{k})$. $\epsilon(\vec{k})$ è determinata in funzione di μ e g :

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon(\vec{p}) = \sqrt{(\mu + \frac{p^2}{2m})^2 - \mu^2} = \sqrt{\frac{\mu}{m}p^2 + (\frac{p^2}{2m})^2}$$

Tale espressione, per quanto semplice, dice che ϵ non coincide con l'energia di particella libera, ma si comporta per piccoli p (ovvero se $p^2 \ll \mu m$) come $\sqrt{\frac{\mu}{m}}|p|$, ovvero ha un andamento lineare. La tangente alla curva di dispersione per $p = 0$ vale proprio $\sqrt{\frac{\mu}{m}}$, e assume il significato di velocità critica del mezzo; essa è anche la velocità dei fononi per piccoli impulsi. Dimostriamo adesso come è possibile mettere H in forma diagonale, e la relazione di dispersione accennata...[...]

Abbiamo visto che il termine $E_0 = -\sum_k \epsilon(\vec{k}) s_k^2$ è stato aggiunto per cancellare il termine dello sviluppo non ordinato normalmente; tale termine è negativo, e lo stato fondamentale definito dall'ordinamento normale degli A_k avrà un'energia minore di quello

definito dagli a_k . Tale nuovo stato sarà indicato come $|\tilde{\phi}_0\rangle$ ed è definito da $A_k|\tilde{\phi}_0\rangle = 0$. Grazie alle relazioni

$$\begin{aligned}\mu + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} &= \epsilon \cosh(\theta_k) \\ \mu &= \epsilon \sinh(\theta_k)\end{aligned}$$

si può ottenere quadrando e sottraendo i risultati

$$\epsilon(\hbar\vec{k}) = \sqrt{(\mu + \frac{p^2}{2m})^2 - \mu^2} = \sqrt{\frac{\mu}{m}p^2 + (\frac{p^2}{2m})^2}$$

e

$$\tanh(\theta_k) = \frac{\mu}{\mu + \frac{p^2}{2m}}$$

Il nuovo stato fondamentale risulta schiacciato (squeezed), in quanto che nel modo 0 si ha una densità finita, mentre negli altri modi si ha una distribuzione di coppie a impulso nullo, come si vede dalla sua espressione:

$$|\tilde{\phi}_0\rangle = \exp(\sum_k f_k a_k^\dagger a_{-k}^\dagger)|0\rangle$$

dove f_k è un parametro da determinare. Poichè $A_k|\tilde{\phi}_0\rangle = 0$ per ogni $k \neq 0$, si deve avere ($a_k \sim \frac{\partial}{\partial a_k^\dagger}$)

$$c_k a_k + s_k a_{-k}^\dagger |\tilde{\phi}_0\rangle = c_k f_k a_{-k}^\dagger + s_k a_{-k}^\dagger |0\rangle = 0$$

dunque devo scegliere $f_k = -\tanh(\frac{\theta_k}{2})$.

Perchè tale stato è uno stato superfluido? Per quello che si è visto lo spettro ha una pendenza finita (e quindi una velocità finita, poichè $\vec{v} = \nabla_{\vec{p}} E(p)$), e la velocità critica risultante è analoga alla velocità della luce $\frac{c}{n}$ in un mezzo materiale discussa per l'effetto Cerenkov. Anche adesso, una particella che attraversa il condensato con una velocità minore della velocità critica non potrà emettere eccitazioni collettive poichè per lei sarà inibita la trasmissione di energia. Ancora, per la conservazione dell'energia si ha:

$$E_p = E_{p+\hbar k} + \epsilon_k$$

dove ϵ_k è l'energia della eccitazione collettiva del fluido emessa dalla particella. Al prim'ordine

$$E(\vec{p} + \hbar\vec{k}) \simeq E(\vec{p}) + \nabla_p E(\vec{p}) \cdot \hbar\vec{k} = \vec{v} \cdot \hbar\vec{k}$$

da cui semplificando si ha che $\vec{v} \cdot \hbar\vec{k} = \epsilon_k$. Ma $\vec{v} \cdot \hbar\vec{k} \leq |v||p|$ mentre $\epsilon_k \simeq v_c |p|$, quindi l'uguaglianza è soddisfatta solo se $|v| > v_c$. Risulta inoltre che $v_c = \min \frac{\epsilon(p)}{|p|}$; osserviamo che se avessimo avuto una legge di dispersione di tipo particella libera $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ in 0 si avrebbe derivata nulla e di conseguenza non ci sarebbe stata una velocità critica; infatti tale velocità esiste soltanto per regole di dispersione di tipo fononico.

In realtà, lo spettro lineare-parabolico non è realistico per descrivere il superfluido, poichè si può dimostrare che in queste condizioni le sue eccitazioni son instabili, e una

eccitazione di impulso p potrebbe decadere in due subeccitazioni di impulso $\frac{p}{2}$. Lo spettro vero di un superfluido (ad esempio quello dell'elio) presenta infatti anche una parte attrattiva: c'è sempre un andamento lineare per piccoli impulsi, seguito da uno parabolico ma con concavità verso il basso (spettro convesso) fino a un massimo, quindi una breve discesa fino al minimo e poi il solito andamento di tipo particella libera per $p \rightarrow \infty$. Vediamo che la velocità critica non è più legata alla pendenza del grafico nell'origine, ma dalla retta di minima pendenza tangente alla curva nei dintorni del minimo. Tale zona è detta *zona dei rotoni*.

I fononi considerati nel problema possono avere energia piccola a piacere, e dal punto di vista fisico corrispondono ad oscillazioni di fase parallelamente alla vallata. Per poter osservare questo fatto occorre introdurre i termini cubici nell'hamiltoniana e riparametrizzarla.

La rottura spontanea di simmetria è presente anche in fisica delle particelle: si pensa infatti che l'esistenza del mesone di Yukawa, il pione, sia dovuta alla rottura di una particolare simmetria detta *simmetria chirale*. Il pione non ha massa nulla, anche se più piccola (circa sette volte) di quella del nucleone. Tuttavia, è possibile dimostrare (*teorema di Goldstone*) che in una teoria relativistica questi fononi diventano particelle di massa nulla (bosoni di Goldstone). Esiste una eccezione al teorema di Goldstone, ovvero quando μ , il termine di interazione che nel problema attuale è stato introdotto come una costante, diventa funzione dell'impulso. In caso ci sia di mezzo un potenziale coulombiano (ad esempio nel caso dell'interazione di una coppia di Cooper, ovvero due elettroni con impulso opposto), il potenziale chimico può avere un andamento del tipo p^2 (la trasformata di fourier del potenziale coulombiano è $\sim \frac{1}{p^2}$ e questo viola il teorema. In modelli più sofisticati si ha $\mu = f(p^2)$. Si ha in questi casi che se p tende a 0, $\epsilon(p)$ non tende più a zero e si ha un *gap*, ovvero uno spostamento di energia. In tal caso, $\frac{\epsilon(p)}{p}$ ammette comunque minimo. Dunque nei materiali elettrici la superconduttività non è dovuta a fononi ma all'esistenza di questo gap. Nella teoria elettrodebole le particelle massive che realizzano un modello superconduttore sono i bosoni di Rubbia (W).

Una evoluzione di questa teoria è il modello di Landau-Ginzburg.

Capitolo 5

L'equazione di Dirac

L'equazione di Dirac è utilizzata per descrivere la meccanica relativistica di alte energie per particelle puntiformi. Fu introdotta come soluzione al problema della generalizzazione della meccanica quantistica di Schroedinger con l'aggiunta di condizioni relativistiche, come ad esempio il fatto che le particelle in relatività sono oggetti ben definiti per cui $E = \sqrt{p^2 + m^2}$ ($c = 1$). Per una teoria con tali propositi si richiedevano al tempo quattro requisiti fondamentali, ovvero la teoria doveva essere:

1. quantistica;
2. relativistica;
3. locale;
4. le funzioni d'onda descrittive di un sistema dovevano essere di singola particella;

Per teoria *locale* si intende una teoria capace di definire una particella su una regione di spazio piccola a piacere. In termini matematici questo significa che le equazioni della teoria devono contenere solo un numero finito di derivate, di ordine finito. Abbiamo già visto che nel caso dei fotoni non era possibile definire un operatore di creazione o distruzione in un solo punto, poichè il commutatore tra $A(\vec{x}, t)$ e $A^\dagger(\vec{y}, t)$ non era proporzionale ad una $\delta^3(\vec{x} - \vec{y})$ ma compariva anche un termine di spread dovuto al potenziale coulombiano, dunque $A(\vec{x}, t)$ e $A^\dagger(\vec{y}, t)$ non potevano essere interpretati come operatori di creazione o distruzione *locali*.

Per il principio di indeterminazione, $\Delta p \Delta x > \hbar$, e se voglio localizzare una particella in un intervallo spaziale Δx devo trasferirle un impulso $\delta p > \frac{\hbar}{\Delta x}$. Supponiamo dunque di voler localizzare una particella di massa m con una precisione $\delta x \ll \frac{\hbar}{mc}$, dove $\lambda_c = \frac{\hbar}{mc}$ è la lunghezza d'onda Compton della particella, si ha che

$$\Delta p \gg mc \Rightarrow \Delta E \simeq c \Delta p \gg mc^2$$

ovvero per scendere oltre una certa soglia di precisione devo fornire alla particella una energia molto maggiore della sua massa di riposo, sufficiente alla creazione di coppie

particella-antiparticella. Dunque la richiesta di località aggiunge alla particella iniziale un mare di coppie particella anti-particella, pertanto nega la richiesta del punto 4 di una funzione d'onda di singola particella. L'equazione di Dirac si interpreta a questo punto come equazione differenziale per un campo.

Se invece si decide di sacrificare la località, il problema è facilmente impostato come

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \sqrt{m^2 - \hbar^2 \nabla^2} \psi \quad (5.1)$$

ovvero l'equazione di Schroedinger con $H = \sqrt{m^2 - \hbar^2 \nabla^2}$. Tuttavia questa espressione non ha un senso ben chiaro dato che non è immediato il significato della radice di un operatore, a meno di utilizzare uno sviluppo in serie che comprende però un numero infinito di derivate. Tale espressione diventa quindi equivalente ad una equazione integrale, che ha normalmente una soluzione più complicata di una equazione differenziale, poichè le condizioni iniziali non sono più sufficienti.

Risultati simili erano stati ottenuti discutendo nel caso fononico il limite di sistema a numero fisso di particelle (per cui si recuperava la meccanica quantistica di Schroedinger); avevamo infatti visto che una funzione d'onda a 1 particella soddisfaceva a

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \omega_{-i} \nabla \psi$$

pertanto, poichè la relazione di dispersione fononica è $\omega = |\vec{k}|$, si avrebbe anche in questo caso una espressione del tipo $|\nabla|$, definibile soltanto come operatore integrale e non come operatore differenziale. In tal caso per ottenere una soluzione dell'equazione è necessario allargare lo spazio dall'originario spazio di Hilbert ad uno spazio adatto a contenere le soluzioni del nuovo tipo, che si trova coincidere proprio con lo spazio di Fock. Va da sè che per questi motivi l'hamiltoniana H non sarà più in generale una hamiltoniana di singola particella.

Tuttavia, Dirac cercava una soluzione locale, e tra i tentativi più illustri di perseguire questo scopo ricordiamo l'equazione di Klein-Gordon:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (m^2 - \hbar^2 \nabla^2) \psi$$

Tale equazione si ottiene semplicemente quadrando la (.), ma ha il problema di essere una equazione differenziale del secondo ordine nel tempo come l'equazione di D'Alambert, e come quest'ultima ammette soluzioni con energie positive e negative. Infatti nello spazio degli impulsi la relazione di dispersione si riduce a

$$\omega^2 = \left(\frac{m}{\hbar}\right)^2 + k^2 \Rightarrow \omega = \pm \sqrt{k^2 + \left(\frac{m}{\hbar}\right)^2}$$

Essendo l'equazione del secondo ordine non basta fornire le condizioni iniziali della funzione d'onda ma è necessario fornire anche quelle per la derivata prima, ed è come aver aggiunto un grado di libertà al sistema.

Inoltre, frequenze negative non hanno interpretazione in una teoria di singola particella, mentre ce l'hanno in una teoria di campo, dove sono ammesse sia particelle che antiparticelle (ad esempio per il fotone le frequenze negative erano interpretate come operatori di creazione). Interpretiamo dunque la ψ del campo di Klein-Gordon non come una funzione d'onda ma come un campo per una singola particella ma circondata da un numero imprecisato di coppie particella-antiparticella.

L'equazione di Klein-Gordon ha una corrente conservata analoga a quella calcolata per l'equazione di Schroedinger, ma la densità che si ottiene non è definita positiva, e non può quindi essere interpretata come una densità di probabilità. Questo fu uno dei motivi per cui l'equazione di Klein-Gordon fu inizialmente scartata, salvo essere ripresa in seguito in sede di teoria di campo; tale densità infatti viene interpretata come una densità di carica, e si elimina quindi il vincolo della positività.

In ogni caso, per il momento Klein-Gordon non funzionava, e il problema era ancora aperto. Dirac spostò la sua attenzione sulla ricerca di una soluzione che conciliasse una funzione d'onda eventualmente a più componenti (spinore) con una teoria locale. Tuttavia più componenti implicano l'introduzione dello spin, e come si era già constatato per spin 0 non c'era soluzione. La teoria si applica dunque a particelle con spin $\geq \frac{1}{2}$, e l'idea di Dirac fu di definire una hamiltoniana

$$h = \beta m + \vec{\alpha} \cdot \vec{p}$$

dove $\vec{p} = -i\hbar\nabla$, βm è il termine di massa e $\vec{\alpha} \cdot \vec{p}$ è un termine lineare nelle derivate. Il prezzo da pagare per un'equazione del prim'ordine è che l'hamiltoniana così definita deve essere necessariamente una matrice:

$$(h)_{ab} = (\beta m + \vec{\alpha} \cdot \vec{p})_{ab}$$

La prima richiesta da soddisfare per un'hamiltoniana che voglia candidarsi a risolvere il problema è:

$$h^2 = p^2 + m^2$$

Prendendo il quadrato di h si ha

$$\beta^2 m^2 + mp_i(\beta\alpha_i + \alpha_i\beta) + \frac{1}{2}p_ip_j(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i)$$

e Affinchè scompaiano i termini lineari in p , è necessario che le matrici α_i e β anticommuto, ovvero $\{\alpha_i, \beta\} = \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0$. Inoltre $\beta^2 = 1$ e $\{\alpha_i\alpha_j\} = 2\delta_{ij}$ affinché il termine di massa e quello di secondo grado nelle derivate restino isolati. Al tempo di Dirac si aveva già una soluzione soddisfacente l'algebra matriciale appena descritta: le matrici di Pauli σ_i , che potevano essere identificate con le α_i . Tuttavia restava il problema che sia le α che le β dovevano avere traccia nulla poichè anticommutano tra loro:

$$\alpha_i = -\beta\alpha_i\beta$$

ma

$$tr(\alpha_i) = tr(-\beta\alpha_i\beta) = -tr(\alpha_i)$$

per le proprietà cicliche della traccia ($tr(ABC) = tr(BCA) = tr(CAB)$). Dunque lo spazio matriciale 2x2 col vincolo della traccia nulla ha dimensione 3, dunque non c'è spazio sufficiente per contenere 4 matrici indipendenti, e si deve salire di grado. Sempre a causa del vincolo di traccia nulla, è necessario che le matrici (che sono hermitiane) abbiano autovalori 1 e -1 in egual numero. Perciò scartiamo la dimensione 3 e il primo spazio utile è quello delle matrici 4x4; in tale ambiente Dirac propose una rappresentazione delle 4 matrici della forma:

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} ; \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

dove ogni blocco è una matrice 2x2 e le $\vec{\sigma}$ sono le matrici di Pauli. Si verifica facilmente che le matrici appena definite soddisfano l'algebra richiesta, ed è possibile trovare altre rappresentazioni equivalenti, che differiscono da questa per una trasformazione di similitudine¹; con questa soluzione l'equazione di Dirac si riscrive:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a = h_{ab} \psi_b$$

dove adesso la funzione d'onda ψ è uno spinore a 4 componenti. L'equazione di Dirac ha una corrente conservata, data dal quadrivettore:

$$j^\mu = (\psi^\dagger \psi, \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi)$$

per il quale vale

$$\partial_\mu j^\mu = 0$$

dove $\partial_\mu = (\partial_t, \nabla)$. Infatti si ha:

$$\begin{cases} i\dot{\psi} = (\beta m - i\vec{\alpha} \cdot \nabla) \psi \\ -i\dot{\psi}^\dagger = \psi^\dagger (\beta m - i\vec{\alpha} \cdot \overleftarrow{\nabla}) \end{cases}$$

$$\partial_t \psi^\dagger \psi = \dot{\psi}^\dagger \psi + \psi^\dagger \dot{\psi} = i\psi^\dagger (\underline{\beta m} - i\vec{\alpha} \cdot \overleftarrow{\nabla}) \psi - i\psi^\dagger (\underline{\beta m} - i\vec{\alpha} \cdot \nabla) \psi = -\psi^\dagger \vec{\alpha} \cdot \nabla \psi + \psi^\dagger \vec{\alpha} \cdot \overleftarrow{\nabla} \psi = -\nabla \cdot (\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi)$$

e dunque

$$\partial_t \psi^\dagger \psi + \nabla \cdot (\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) = \partial_\mu j^\mu = 0$$

Se consideriamo $\psi^\dagger \psi$, questa è definita positiva e può assumere significato di densità di probabilità, tuttavia in base alla richiesta $h^2 = p^2 + m^2$, h può avere autovalori sia positivi che negativi. Questo è un problema intrinseco della teoria, e come nel caso di Klein-Gordon non si sapeva che interpretazione dare agli autovalori negativi.

Tramite le matrici β e $\vec{\alpha}$ è possibile definire una quinta matrice:

$$\gamma_5 = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3$$

$$\gamma_5^2 = I \quad ; \quad \{\gamma_5, \alpha_i\} = 0 = \{\gamma_5, \beta\}$$

¹Date due matrici A e B , si dice che A è *simile* a B e si indica con $A \sim B$ se esiste una matrice invertibile S tale che $A = S^{-1}BS$. La relazione di similitudine è una relazione di equivalenza.

Il significato di tale matrice sarà più chiaro in seguito, ma è collegato al limite di massa nulla dell'equazione di Dirac, e alla chiralità; in tale limite l'equazione di Dirac può essere applicata allo studio di particelle come i neutrini, che sono sinistrorsi (quindi violano la parità) e corrispondono ad autostati di γ_5 con autovalori ± 1 .

Vediamo adesso gli stati di particella libera: innanzitutto è necessario definire lo spin o un numero quantico che ne faccia le veci. A rigore, lo spin di una particella è il momento angolare nel sistema di quiete, ed è lì che deve essere definito. Tuttavia in generale la particella avrà $\vec{p} \neq 0$, e il procedimento corretto consisterebbe in una trasformazione di Lorentz che porti nel sistema di quiete, una definizione dello spin in tale sistema, e il ritorno nel vecchio sistema di riferimento.

Altrimenti si può definire l'elicità, ovvero la proiezione di $\vec{\sigma}$ nella direzione dell'impulso:

$$\Lambda = \frac{\vec{\Sigma} \cdot \vec{p}}{|\vec{p}|} = \vec{\sigma} \cdot \hat{p}$$

dove con $\vec{\Sigma}$ si intende

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \Rightarrow \Lambda = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \hat{p} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \cdot \hat{p} \end{pmatrix}$$

Tale operatore è sempre definibile, poichè è una costante del moto; l'elicità infatti commuta con l'hamiltoniana di Dirac, come si osserva mediante un conto esplicito dei vari commutatori (esercizio), oppure notando che le σ agiscono su indici diversi da quelli su cui agiscono β e $\vec{\alpha}$: è possibile infatti scrivere

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mentre

$$\vec{\alpha} = \vec{\sigma} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Allora ogni ψ sarà autostato dell'elicità con un determinato autovalore. Una maniera intuitiva per capire il concetto è questa: ciò che si conserva è il momento angolare totale $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, ma $L = \vec{x} \wedge \vec{p}$, e se prendo la proiezione $\vec{J} \cdot \vec{p}$ ottengo $\vec{S} \cdot \vec{p}$ poichè $\vec{L} \cdot \vec{p} = 0$. Dunque la proiezione di \vec{S} lungo \vec{p} è in realtà la proiezione di $\text{vec}J$. Dunque gli spinori u diagonalizzano l'elicità e si può scrivere

$$\Lambda u_\lambda = \lambda u_\lambda$$

L'equazione che descrive una particella di Dirac libera è

$$h\psi = E\psi$$

dove

$$h = \beta m + \vec{\alpha} \cdot \vec{p}$$

Se suppongo $\vec{p} = 0$ (particella ferma), ottengo

$$h_0\psi_0 = E_0\psi_0 = m\beta\psi_0$$

da cui le due possibili soluzioni (ricordiamo che è un'equazione matriciale)

$$E_0 = \pm m$$

Gli autostati hanno quindi la forma

$$\psi_1 = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad \psi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_0 \end{pmatrix}$$

e corrispondono agli autovalori $+1$ e -1 di β . Gli spinori a due componenti ϕ_0 e χ_0 contengono l'informazione sullo spin, ad esempio ϕ_0 può essere autostato di σ_z :

$$\sigma_z\phi_0 = \pm\phi_0$$

Se invece $\vec{p} \neq 0$, si può scrivere in generale delle soluzioni di tipo onda piana:

$$\psi^{(+)} = u(\vec{p})e^{i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})}$$

L'hamiltoniana ora è

$$h = m\beta + \vec{\alpha} \cdot \vec{p} = \begin{pmatrix} m & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -m \end{pmatrix} \Rightarrow h\psi = \begin{pmatrix} m & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = E_p \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

che porta alle due equazioni

$$\begin{cases} m\phi + \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\chi = E_p\phi \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\phi - m\chi = E_p\chi \end{cases}$$

Se $E_p > 0$, si può scrivere $\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E_p + m}\phi$, da cui si ricava l'equazione agli autovalori per ϕ :

$$\begin{aligned} \left(m + \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2}{(E_p + m)}\right)\phi &= E_p\phi \\ \Rightarrow \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2}{(E_p + m)}\phi &= (E_p - m)\phi \end{aligned}$$

e poichè sappiamo che per le proprietà delle $\vec{\sigma}$ $\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2}{\equiv} p^2$ riotteniamo per gli autovalori l'informazione iniziale

$$E_p - m = \frac{p^2}{(E_p + m)} \Rightarrow E_p^2 = m^2 + p^2$$

Dunque le soluzioni a energia positiva si scrivono in definitiva come

$$\psi^{(+)} = u(\vec{p})e^{i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})}$$

dove

$$u(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \phi \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{(E_p + m)} \phi \end{pmatrix}$$

e con $E_p = \sqrt{p^2 + m^2}$. Per le soluzioni ad energia negativa si ha

$$\psi^{(-)}(\vec{x}, \vec{p}) = v_\lambda(\vec{p}) e^{i(E_p t - \vec{p} \cdot \vec{x})}$$

La ragione di questa scrittura sta nell'analogia col caso fononico e fotonico in cui i coefficienti relativi a $\omega < 0$ erano i complessi coniugati di quelli a $\omega > 0$. Stavolta però è opportuno mantenere anche lo stesso impulso \vec{p} . Tuttavia $v_\lambda(\vec{p})$ non è autostato di $h(-\vec{p})$ ed ha energia negativa $-E_p$. Dunque per convenzione si scriverà:

$$\psi^{(-)} = v_\lambda(\vec{p}) e^{i(E_p t - \vec{p} \cdot \vec{x})}$$

e $\psi^{(-)}$ soddisfa a

$$\begin{aligned} -i\nabla \psi^{(-)} &= -\vec{p} \psi^{(-)} \\ i\partial_t \psi^{(-)} &= -E_p \psi^{(-)} \end{aligned}$$

Per ottenere le soluzioni devo scrivere:

$$\begin{pmatrix} m & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = -E_p \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

che rende le seguenti equazioni:

$$m\phi - (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\chi = -E_p\phi$$

$$-(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\phi - m\chi = -E_p\chi \Rightarrow (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\phi + m\chi = E_p\chi$$

da cui

$$(E_p + m)\phi = -(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\chi$$

e quindi lo spinore v_λ può essere scritto come:

$$v_\lambda = \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E_p + m} \chi_\lambda \\ \chi_\lambda \end{pmatrix}$$

Sempre per convenzione, si definisce lo spinore v_λ come autostato dell'elicità con autovalore $-\lambda$:

$$\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{p} v_\lambda = -\lambda v_\lambda \Rightarrow v_\lambda = \begin{pmatrix} \frac{-\lambda p}{E_p + m} \chi_\lambda \\ \chi_\lambda \end{pmatrix}$$

e stavolta le piccole componenti sono in alto.

L'equazione di Dirac ha successo anche in fisica atomica come correzione relativistica all'equazione di Schroedinger, ad esempio le correzioni fini all'atomo di idrogeno sono corrette fino all'ordine $\frac{v^2}{c^2}$. Nel limite ultrarelativistico invece il comportamento dell'equazione

è totalmente diverso; $\frac{p}{E_p+m} \sim 1$, cioè l'energia è dominata dall'impulso, e gli spinori hanno la seguente forma:

$$u_\lambda = \begin{pmatrix} \phi_\lambda \\ \lambda \phi_\lambda \end{pmatrix} \Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \hat{p} \phi_\lambda = \lambda \phi_\lambda$$

e

$$u_\lambda = \begin{pmatrix} -\lambda \chi_\lambda \\ \chi_\lambda \end{pmatrix} \Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \hat{p} \chi_\lambda = -\lambda \chi_\lambda$$

e si verifica che u_λ e v_λ sono autostati di γ_5 con autovalori rispettivamente λ e $-\lambda$. Dunque nel limite ultrarelativistico chiralità ed elicità possono essere identificate. Vedremo adesso che la rappresentazione di Dirac non è la più conveniente conveniente nel caso ultrarelativistico, infatti l'equazione di Dirac si scrive:

$$i\partial_t \psi = [m\beta + \vec{\alpha} \cdot (-i\nabla)]\psi$$

Se moltiplichiamo per β si ottiene:

$$i\beta\partial_t \psi = [m + \beta\vec{\alpha} \cdot (-i\nabla)]\psi \Rightarrow i(\gamma^0\partial_0 + \gamma^i\partial_i)\psi = m\psi$$

dunque possiamo pensare di definire la quantità

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \vec{\gamma}) = (\beta, \beta\vec{\alpha})$$

che risulta essere un quadrivettore poichè si ha

$$\partial_\mu \gamma^\mu = -im$$

cioè il prodotto scalare tra γ^μ è invariante.

Abbiamo visto inoltre che la matrice γ_5 ha la forma:

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}$$

e cercheremo una rappresentazione delle 4 matrici γ più la γ_5 in cui quest'ultima sia diagonale. Tale rappresentazione, detta *rappresentazione chirale*, si ottiene cercando una matrice opportuna S e definendo delle nuove matrici

$$\tilde{\gamma}^\mu = S\gamma^\mu S^{-1}$$

Ad esempio, una possibile scelta della matrice S è:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ I & -I \end{pmatrix} \Rightarrow S^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ I & -I \end{pmatrix}$$

attraverso la quale si ha:

$$\tilde{\gamma}_5 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} I & I \\ I & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & I \\ I & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

Esercizio: determinare la forma delle altre 4 matrici trasformate.

5.0.2 Campo elettromagnetico nell'equazione di Dirac

Non esiste un modo univoco per introdurre il campo elettromagnetico nell'equazione di Dirac. (Dire altri modi) Ad esempio con la sostituzione minimale:

$$E \rightarrow E - eA^0$$

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$$

l'equazione stazionaria libera passa dalla forma

$$h(\vec{p})\psi_0 = E_0\psi_0$$

ad questa

$$h(\vec{p} - e\vec{A})\psi_0 = (E_0 - eA^0)\psi_0$$

Esplicitando l'hamiltoniana si ha:

$$E\psi = eA^0\psi + \begin{pmatrix} m & \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) \\ \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) & -m \end{pmatrix} \psi$$

Tuttavia questa equazione non è valida a tutte le energie, e come vedremo porta a dei paradossi, come il paradosso di Klein per un fascio di elettroni incidenti su un gradino di potenziale. L'equazione di Dirac con campo magnetico non è facilmente risolubile a meno di effettuare qualche approssimazione. Mettiamoci in condizioni favorevoli, che in questo caso corrispondono a considerare $E - m = \Delta \ll m$ e $\delta \sim A^0 \sim \frac{v^2}{c^2}m$; dunque Δ e A^0 sono dei piccoli parametri. Non ci sono invece restrizioni su \vec{A} , il cui modulo può essere anche dello stesso ordine di quello di $\frac{1}{e}\vec{p}$. Dunque possiamo pensare di sviluppare per piccole velocità, e introduciamo la notazione $\vec{\pi} = \vec{p} - e\vec{A}$, dove $\vec{\pi}$ rappresenta il momento cinetico $m\vec{v}$, e \vec{p} è il vero momento coniugato alla \vec{x} . Nel limite non relativistico avremo le seguenti equazioni accoppiate:

$$E\phi = eA^0\phi + m\phi + \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\chi$$

$$(E - m)\phi \equiv \Delta\phi = eA^0\phi + \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\chi$$

$$\Rightarrow (\Delta - eA^0)\phi = \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\chi$$

e

$$\Rightarrow (2m + \Delta - eA^0)\chi = \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\phi$$

[Ricordiamo che nel caso libero avevamo trovato $\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2m}\phi$]

Dunque le componenti χ hanno in generale la seguente espressione, facendo attenzione all'ordinamento degli operatori (A^0 è funzione delle coordinate):

$$\chi = \frac{1}{2m + \Delta - eA^0(\vec{x})} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}\phi$$

Sostituendo nella espressione appena trovata per ϕ si ottiene:

$$(\Delta - eA^0)\phi = (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) \frac{1}{2m + \Delta - eA^0(\vec{x})} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\phi$$

Questa espressione è formalmente esatta ma è difficilmente risolvibile. L'approssimazione al prim'ordine consiste nel trascurare i termini perturbativi Δ e eA^0 rispetto alla massa m :

$$(\Delta - eA^0)\phi \simeq (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) \frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) \phi = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \phi$$

Potremmo pensare che $(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 = \vec{\pi}^2$ come nel caso di $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})$, ma in questo caso le singole componenti di $\vec{\pi}$ non commutano tra loro:

$$[\pi_i, \pi_j] = [p_i, -eA_j] + [-eA_j, p_j] = ie(\partial_i A_j - \partial_j A_i) = ie\epsilon_{ijk} B_k(\vec{x})$$

ovvero il commutatore è collegato con il rotore di \vec{A} , che corrisponde al campo magnetico \vec{B} , e in generale è funzione delle coordinate. In realtà si ha:

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2 &= \sigma_i \sigma_j \pi_i \pi_j = (\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}) \pi_i \pi_j = \vec{\pi}^2 + i\epsilon_{ijk} \pi_i \pi_j \sigma_k = \vec{\pi}^2 + i\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \sigma_k = \vec{\pi}^2 + i\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} [\pi_i, \pi_j] \sigma_k = \\ &= \vec{\pi}^2 + i\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} (ie\epsilon_{ijl} B_l) \sigma_k = \vec{\pi}^2 - e\vec{\sigma} \cdot \vec{B} \end{aligned}$$

dove nei passaggi abbiamo usato la proprietà di saturazione del tensore di Levi-Civita:

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ijl} = 2\delta_{kl}$$

e la seguente proprietà tensoriale:

$$\epsilon_{ijk} \pi_i \pi_j = \epsilon_{ijk} \frac{1}{2} ([\pi_i, \pi_j] + \{\pi_i, \pi_j\}) = \epsilon_{ijk} \frac{1}{2} [\pi_i, \pi_j]$$

Infatti $\epsilon_{ijk} \{\pi_i, \pi_j\} = 0$ poichè l'anticommutatore è simmetrico nello scambio di i e j , mentre il tensore di Levi-Civita è antisimmetrico.

Dunque otteniamo per ϕ l'espressione:

$$(\Delta - eA^0)\phi = \left(\frac{\vec{\pi}^2}{2m} - \frac{e\vec{\sigma} \cdot \vec{B}}{2m} \right) \phi$$

e l'hamiltoniana di Dirac al primo ordine perturbativo diventa:

$$H_D^1 = eA^0(\vec{x}) + \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} - e\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{B}}{2m}$$

Osserviamo quindi che compare un termine di tipo momento magnetico $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, dove $\vec{\mu} = \frac{e}{2m} \vec{\sigma} = 2\mu_B \vec{S} = \frac{e}{m} \vec{S} \equiv \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma}$