UNIVERSITÀ DEL SALENTO

Facoltà di Scienze MM.FF.NN Corso di laurea in Fisica Anno accademico 2006/2007

Aspetti dell'interazione radiazione-materia e applicazioni

Relatore Claudio Corianò Candidato Carlo Marzo

Lecce, 04 marzo 2008

Prefazione

Lo studio dell'interazione radiazione-materia è una delle parti piu' interessanti della meccanica quantistica giacchè da questo studio emergono alcuni aspetti teorici che puntano verso una sua estensione. Benchè la meccanica quantistica sia una teoria completa - allorquando escludiamo le estensioni relativistiche di questa - lo studio della interazione radiazione-materia ci porta direttamente a confrontare una teoria a molti corpi, che è quella descrivente il campo elettromagnetico, con una teoria del corpo singolo, che è la meccanica quantistica tradizionale. Ed è proprio grazie a questo studio che negli anni 30-40 si cominciò a delineare la teoria della *seconda quantizzazione* ed a studiare il problema di una quantizzazione dei sistemi relativistici.

Lo sviluppo della quantizzazione delle variabili dinamiche di una particella, culminato con la teoria di Schroedinger, ha portato ad una generale comprensione dei fenomeni riguardanti un numero fisso di corpi in moto non relativistico. Successivamente al 1926, anno che vede la nascita dell'equazione di Schroedinger, numerosi tentativi furono effettuati per cercare di trasportare le idee della quantizzazione verso nuovi e ancora incompresi campi della fisica. La teoria, così come era, non soddisfaceva le richieste della relatività e non forniva ancora una spiegazione coerente riguardo i fenomeni in cui gli atomi interagivano con un campo di radizione. Il primo obiettivo fu risolto da Dirac pochi anni dopo fornendo una equazione relativisticamente invariante le cui previsioni, quali l'esistenza delle antiparticelle e la completa descrizione dell'atomo di idrogeno, ne certificarono la correttezza. Rimaneva ancora insoluto il problema di una teoria che inglobasse completamente la radiazione e che potesse fornire di conseguenza una completa spiegazione dei fenomeni elettromagnetici. Da questi stimoli partì la ricerca per l'estensione dei metodi della quantizzazione verso nuove e più comprensive teorie che portarono negli anni seguenti a sviluppare la teoria quantistica dei campi, che costituisce il paradigma moderno per la fisica delle particelle e delle interazioni elettromagnetiche. In particolare l'interazione tra radiazione e materia portò allo svilppo dell'elettrodinamica quantistica o QED. Il passaggio a tale teoria avvenne cercando di fondere in un unico modello le proprietà note della

particella quantistica con quelle ancora parzialmente ignorate dell'interazione con il campo di radiazione. La teoria di Schroedinger, e successivamente quella di Dirac, si scontrarono con il tentativo di dare un fondamento ad alcune proprietà del campo elettromagnetico note sperimentalmente ma ancora non spiegabili teoricamente. Einstein infatti, dal 1905, in alcuni articoli aveva fornito dei modelli teorici per la descrizione dei fenomeni concernenti la radiazione facendo alcune assunzioni che ora dovevano essere inglobate da qualsiasi teoria che pretendesse di essere completa. Nel tentativo di comprendere l'effetto fotoelettrico e i meccanismi dell'equilibrio della materia in un campo di radiazione Einstein fu portato ad assumere che il campo fosse una entità quantizzata (fu lui ad introdurre il concetto di *fotone*) e che un atomo potesse emettere spontaneamente della radiazione. Queste proprietà, che Einstein trattò come *postulati*, trovarono successivamente fondamento e spiegazione nelle teorie di campo elettromagnetico. Nella fase che intercorre fra il 1926 e il 1932, in cui la teoria dell'elettrodinamica quantistica prese forma in maniera completa, si svilupparono le idee e i metodi della quantizzazione del campo elettromagnetico che poi confluirono in forma coerente verso la QED. Questi metodi sono l'oggetto della presente tesi nella quale viene usato un formalismo ibrido, ancora non manifestamente relativistico, contenente però i concetti fondamentali della quantizzazione del campo elettromagnetico libero sufficienti a spiegare molti dei fenomeni riguardanti l'interazione tra la radiazione e la materia. Il modello matematico da noi utilizzato non è dissimile infatti da quello sviluppato in un articolo del 1926 da Born, Heisenberg e Jordan [5] nel tentativo di estendere al campo elettromagnetico libero le nuove idee della quantizzazione. Per cercare di dare fondamento teorico alle proprietà dell'interazione radiazione-materia il campo libero viene decomposto in serie di Fourier di onde progressive. In questo modo i coefficienti dello sviluppo saranno trattati come variabili dinamiche del sistema, alle quali, automaticamente, saranno fatti corrispondere degli operatori agenti sullo spazio degli stati del campo elettromagnetico, tale processo prende il nome di seconda quantizzazione del campo libero. Con una opportuna scelta degli operatori, il campo elettromagnetico risulterà decomposto in una sovrapposizione di oscillatori disaccoppiati dei quali il fotone rappresenterà una oscillazione. In questo modo, nel corso di questo lavoro, dimostreremo come sia possibile fornire una corretta e semplice interpretazione per quei fenomeni (quali l'emissione spontanea) che altrimenti rimarrebbero non compresi in una teoria quantistica della materia. Nel formalismo sviluppato risulterà immediatamente chiaro, dall'accostamento con il modello dell'oscillatore armonico, come sia necessario definire lo stato del campo (e quindi tutto lo spazio degli stati) fornendo il numero di fotoni con una determinata energia e polarizzazione. Il numero dei fotoni presenti nel

campo sarà non limitato e variabile fornendo così un modello di spazio nel quale il numero delle particelle coinvolte non è conservato. Viene così fornito, nello studio della quantizzazione del campo elettromagnetico, il protitipo di spazio degli stati a numero variabile di particelle nelle teorie di campo.

Nell'ultimo capitolo indagheremo le caratteristiche dello spettro energetico dell'atomo di idrogeno utilizzando le correzioni che la teoria di Dirac fornisce per la dinamica dell'elettrone nel campo del protone. Partiremo da queste, che saranno assunte, per indagare in particolare quali siano i risultati che l'applicazione del formalismo della seconda quantizzazione del campo libero comporta nell'indagine delle transizioni tra gli stati di tripletto a quelli di singoletto dell'atomo di idrogeno. L'attenzione da noi riposta su queste particolari transizioni è giustificata dal voler indagare, con i mezzi sviluppati, le proprietà fisiche e le origini di quella potente sorgente di conoscenze che rappresenta per la cosmologia moderna la così detta 21 centimeter line. Osserveremo infatti come la radiazione di lunghezza d'onda pari a 21 centimetri sia originata dalla transizione corrispondente ad un passaggio da uno stato in cui protone ed elettrone presentano spin paralleli verso quello con spin antiparalleli. Dimostreremo come a questi due stati dell' idrogeno corrispondano due valori leggermente differenti di energia che viene riversata, nella transizione, sotto forma di radiazione. Lo studio della riga a 21 centimetri ha permesso, nei periodi immediatamente successivi alla sua rivelazione, di conoscere la forma della nostra galassia e la distribuzione della massa all'interno di questa, mentre di recente fornisce un potente mezzo per l'individuazione della materia oscura. Il formalismo della seconda quantizzazione sarà utilizzato nel calcolo, effettuato con i metodi della teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo, della vita media dello stato con spin paralleli. Capiremo così la ragione per cui tale tipo di transizione fosse praticamente inosservabile in condizioni di laboratorio.

Indice

1	Qua	antizza	zione del campo elettromagnetico libero	6	
	1.1	Dal ca	ampo classico al campo quantizzato	6	
	1.2	Stati	del campo elettromagnetico	12	
2	Studio dell'interazione tra campo elettromagnetico e mate-				
	ria			15	
	2.1	Intera	zione di un atomo col campo classico di radiazione	16	
		2.1.1	Particella carica in un campo elettromagnetico	16	
		2.1.2	Interazione dipolare	18	
		2.1.3	Regole di selezione	21	
	2.2	Intera	zione di un atomo col campo quantizzato	23	
		2.2.1	Termini dell'interazione	24	
		2.2.2	Assorbimento da parte di un atomo	25	
		2.2.3	Emissione da parte di un atomo	26	
	2.3	Scatte	ering elettrone-fotone	28	
3	Il formalismo della seconda quantizzazione per un calcolo				
	perturbativo				
	3.1	Tratta	azione semiclassica della radiazione per l'atomo d'idrogeno	35	
		3.1.1	Termini fondamentali	35	
		3.1.2	Struttura fine	36	
		3.1.3	Correzioni radiative: effetto Lamb	40	
		3.1.4	Struttura iperfine	41	
	3.2	Calco	lo della vita media con il formalismo della seconda quan-		
		tizzaz	ione	45	
		3.2.1	L'hamiltoniano per l'interazione tra lo spin dell'elet-		
			trone e il campo elettromagnetico	46	
		3.2.2	Calcolo della vita media per gli stati origine della 21		
			centimeter line	47	
		3.2.3	La riga a 21 centimetri in cosmologia	54	

A	Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo				
	A.1 Perturbazioni nello spettro discreto	57			
	A.1.1 Perturbazione periodica	59			
	A.2 Transizioni nello spettro continuo	60			
в	Passaggio alle variabili continue B.1 Il limite continuo	63 63			

Capitolo 1

Quantizzazione del campo elettromagnetico libero

Uno dei primi tentativi di estendere i metodi della quantizzazione verso sistemi contenenti un numero arbitrario di gradi di libertà, ed in particolare verso le proprietà del campo elettromagnetico, fu portato avanti in un articolo del 1926 da Heisenberg, Born e Jordan[5]. Questi intrapresero la via già aperta dieci anni prima da Einstein [9] quando, giustificate con considerazioni statistiche le sue equazioni sull'emissione e l'assorbimento, affermò come una teoria dalla quale queste potessero essere derivate avrebbe dovuto far proprie le richieste di quantizzazione per il campo elettromagnetico. Il processo che nell'articolo del 1926 fu proposto, portato poi a compimento da Dirac[6], prevedeva una quantizzazione del campo libero confinato in una cavità ed espresso come sovrapposizione di *modi normali*. In questo capitolo ripercorriamo in manierà più moderna le stesse idee in modo da giungere alla descrizione delle proprietà del campo e della sua interazione con la materia.

1.1 Dal campo classico al campo quantizzato

La forma che assumono i campi elettrico e magnetico in assenza di sorgenti di carica è data dalle soluzioni dell'equazioni di Maxwell:

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0,$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0,$$

$$\nabla \wedge \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t},$$

$$\nabla \wedge \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}.$$
(1.1)

Le prime tre sono automaticamente soddisfatte con una opportuna scelta, detta gauge di Coulomb, dei potenziali elettromagnetici :

$$\phi = 0, \qquad \nabla \cdot \vec{A} = 0. \tag{1.2}$$

L'ultima delle 1.1 viene invece rispettata dal campo magnetico solo in condizione che il potenziale vettore, che nella gauge di Coulomb determina il campo, soddisfi l'equazione di D'Alembert :

$$\nabla^2 \vec{A}(r,t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial^2 t} \vec{A}(r,t) = 0.$$
(1.3)

Per uno sviluppo di una teoria quantistica del campo libero diventa vantaggioso cercare di esprimere questo in funzione di un numero infinito ma discreto di variabili. Questo passaggio permetterà poi di effettuare una corrispondenza tra le variabili e gli operatori del campo permettendo così una estensione dei principi della quantizzazione. Questo scopo viene raggiunto considerando il campo libero, soddisfacente quindi le equazioni 1.1, confinato in una regione finita dello spazio (un cubo) di volume $\Omega = L^3$. In questo modo si selezioneranno dall'insieme delle soluzioni dell'equazione 1.3 solo quelle soddisfacenti le condizioni al contorno sui lati del nostro cubo. Questo processo porterà ad una naturale emersione di un insieme discreto di oscillazioni, i modi normali, dei quali una generica sovrapposizione rappresenterà la forma del campo all'interno della cavità. L'insieme dei coefficienti di questo sviluppo in modi normali discrimineranno tra le diverse forme del campo elettromagnetico libero fornendo così un possibile insieme di variabili da poter essere soggetto al processo di quantizzazione.

Le condizioni che il potenziale vettore, soluzione di 1.3, deve rispettare ai bordi del cubo di spigolo L sono:

$$\vec{A}(0, y, z, t) = \vec{A}(L, y, z, t),
\vec{A}(x, 0, z, t) = \vec{A}(x, L, z, t),
\vec{A}(x, y, 0, t) = \vec{A}(x, y, L, t).$$
(1.4)

Tenendo conto che per i modi normali tutte le componenti del campo oscillano secondo la medesima frequenza cerchiamo le soluzioni della forma :

$$\dot{A}(x,y,z,t) = \dot{A}(x,y,z)e^{i\omega t}.$$
(1.5)

Inserendo la 1.5 nella 1.3 otteniamo:

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\right)\vec{A}(x, y, z) = 0, \qquad (1.6)$$

che fornisce la relazione tra frequenza e lunghezza d'onda delle soluzioni cercate. Il modo normale di oscillazione, che definisce la dipendenza spaziale della soluzione, ha la forma:

$$\vec{A}_{k,\sigma}(x,y,z) = N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad (\sigma = 1,2),$$
(1.7)

con ${\cal N}_k$ costante di normalizzazione da determinare e in cui le richieste precedenti sono soddisfatte se

$$\omega_k^2 = c^2 k^2 \tag{1.8}$$

е

$$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{L} (n_1, n_2, n_3), \qquad n_i \in \mathbb{Z}.$$
 (1.9)

L'unica condizione sulla coppia dei versori $\hat{\epsilon}_{k,1}$ e $\hat{\epsilon}_{k,2}$, che definiscono la polarizzazione del campo elettrico, è la richiesta di perpendicolarità rispetto al vettore di propagazione dell'onda \vec{k} . Il nostro intento è di sceglierli linearmente indipendenti e in maniera che formino, insieme al vettore \vec{k} , una terna destrorsa di assi, cioè tali che soddisfino l'insieme di equazioni:

$$\hat{\epsilon}_{k,\sigma'} \cdot \hat{\epsilon}_{k,\sigma'} = \delta_{\sigma,\sigma'} \tag{1.10}$$

e

$$\hat{\epsilon}_{k,1} \wedge \hat{\epsilon}_{k,2} = \frac{\vec{k}}{k}.$$
(1.11)

Le oscillazioni normali forniscono una base per il potenziale vettore \vec{A} da noi cercato, così che questo può essere espresso attraverso una loro sovrapposizione con coefficienti di Fourier dipendenti dal tempo. Tenendo conto che questi sono esponenziali complessi uno sviluppo che ci assicuri la realtà del potenziale vettore è ottenuto nella maniera seguente:

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},k_z>0} \sum_{\sigma=1,2} \left[a_{k,\sigma}(t)\vec{A}_{k,\sigma}(\vec{r}) + a_{k,\sigma}^*(t)\vec{A}_{k,\sigma}^*(\vec{r}) \right] =$$
$$= \sum_{\vec{k},k_z>0} \sum_{\sigma=1,2} \left[N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \left(a_{k,\sigma}(t)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + a_{k,\sigma}^*(t)e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) \right].$$
(1.12)

Dove il termine oscillante $e^{i\omega t}$ è stato inglobato nel coefficiente $a_{k,\sigma}(t)$.

Per trovare la dipendenza temporale dei coefficienti di Fourier imponiamo che il potenziale vettore sia soluzione dell'equazione di D'Alembert in maniera che definisca effettivamente dei campi liberi. Inserendo 1.12 in 1.3 otteniamo:

$$\sum_{\vec{k},k_z>0} \sum_{\sigma=1,2} \left[N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \left(-k^2 a_{k,\sigma}(t) - \frac{1}{c^2} \frac{d^2 a_{k,\sigma}(t)}{dt^2} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \left(-k^2 a_{k,\sigma}^*(t) - \frac{1}{c^2} \frac{d^2 a_{k,\sigma}^*(t)}{dt^2} \right) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right] = 0, \quad (1.13)$$

dalla quale deduciamo

$$\frac{d^2 a_{k,\sigma}(t)}{dt^2} + \omega_k^2 a_{k,\sigma}(t) = 0 \qquad (\omega_k^2 = c^2 k^2). \qquad (1.14)$$

L'integrale generale di questa equazione differenziale è dato dalla formula:

$$a_{k,\sigma}(t) = a_{k,\sigma}^{(1)}(0)e^{-i\omega_k t} + a_{k,\sigma}^{(2)}(0)e^{i\omega_k t},$$
(1.15)

così che la forma assunta dal potenziale vettore del campo elettromagnetico libero diventa

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},k_z>0} \sum_{\sigma=1,2} N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \left[a_{k,\sigma}^{(1)}(0) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + a_{k,\sigma}^{(1)*}(0) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + a_{k,\sigma}^{(2)}(0) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}+\omega_k t)} + a_{k,\sigma}^{(2)*}(0) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}+\omega_k t)} \right].$$
(1.16)

Per cercare di ridurre in forma compatta la precedente formula per A, potremmo essere portati a voler ridefinire le costanti legate alle condizioni iniziali in maniera da non limitarci alla restrizione $k_z > 0$. Ma nel riformulare la 1.16 dobbiamo porre attenzione sulla possibilità che i versori di polarizzazione si trasformino tra loro in maniera tale da non rispettare la condizione:

$$\hat{\epsilon}_{k,1} \wedge \hat{\epsilon}_{k,2} = \frac{\dot{k}}{k}.$$
(1.17)

Utilizzando la trasformazione per le costanti data da:

$$a_{k,\sigma}^{(1)}(0) = a_{k,\sigma}(0) \tag{1.18}$$

$$a_{k,\sigma}^{(2)}(0) = -(1)^{\sigma} a_{-k,\sigma}^*(0)$$
(1.19)

il potenziale vettore diventa

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},k_z>0} \sum_{\sigma=1,2} N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \left[a_{k,\sigma}(0) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + a_{k,\sigma}^*(0) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + (-1)^{\sigma} \left(a_{-k,\sigma}^*(0) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}+\omega_k t)} + a_{-k,\sigma}(0) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}+\omega_k t)} \right) \right].$$
(1.20)

In questo modo diventa evidente come i vettori di polarizzazione $\hat{\epsilon}_{k,\sigma}$ si trasformino in $\hat{\epsilon}_{-k,\sigma} = -(-1)^{\sigma} \hat{\epsilon}_{k,\sigma}$ per una inversione del vettore di propagazione \vec{k} , rispettando così la condizione richiesta 1.17.

Possiamo adesso agevolmente procedere verso una semplificazione della formula in maniera da avere una somma su tutto lo spettro dei numeri d'onda \vec{k} :

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},k_z>0} \sum_{\sigma=1,2} N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \left[a_{k,\sigma}(0) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + a_{k,\sigma}^*(0) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} \right] + \\ + \sum_{\vec{k},k_z>0} \sum_{\sigma=1,2} N_k \hat{\epsilon}_{-k,\sigma} \left[a_{-k,\sigma}^*(0) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}+\omega_k t)} + a_{-k,\sigma}(0) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}+\omega_k t)} \right] = \\ = \sum_{\vec{k},k_z>0} \sum_{\sigma=1,2} N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \left[a_{k,\sigma}(0) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + a_{k,\sigma}^*(0) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} \right] + \\ + \sum_{\vec{k},k_z<0} \sum_{\sigma=1,2} N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \left[a_{k,\sigma}(0) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_k t)} + a_{k,\sigma}^*(0) e^{i(-\vec{k}\cdot\vec{r}+\omega_k t)} \right] = \\ = \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma=1,2} N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \left[a_{k,\sigma}(t) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r})} + a_{k,\sigma}^*(t) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r})} \right], \quad (1.21)$$

nella quale abbiamo impiegato la relazione $a_{k,\sigma}(t) = a_{k,\sigma}(0)e^{-i\omega_k t}$.

Osserviamo come i coefficienti dello sviluppo dipendenti dal tempo $a_{k,\sigma}(t)$ possano fornire una scelta per le variabili del campo elettromagnetico. Spinti dall'idea che tramite questi si possa perseguire lo scopo di una quantizzazione del campo cerchiamo, utilizzando il potenziale vettore in 1.21, di definire l'energia partendo dalla formula classica data da:

$$\frac{1}{8\pi} \int_{L^3} dV (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) =$$
$$= \frac{1}{8\pi} \int_{L^3} dV \left[\frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right)^2 + \left(\nabla \wedge \vec{A} \right)^2 \right]. \tag{1.22}$$

Inserendo la nostra forma del potenziale vettore e mantenendo esplicita la dipendenza dai coefficienti $a_{k,\sigma}$ abbiamo:

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\omega_k^2}{4\pi c^2} N_k^2 L^3(a_{k,\sigma} a_{k,\sigma}^* + a_{k,\sigma}^* a_{k,\sigma}), \qquad (1.23)$$

dove sono state sfruttate le relazioni di ortogonalità

$$\int_{L^3} dV e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{k'}\cdot\vec{r}} = L^3 \delta_{\vec{k},\vec{k'}},$$
(1.24)

insieme con

$$\hat{\epsilon}_{k,\sigma} \cdot \hat{\epsilon}_{k,\sigma'} = \delta_{\sigma,\sigma'},$$

$$\hat{\epsilon}_{k,\sigma} \cdot \hat{\epsilon}_{-k,\sigma'} = -(-1)^{\sigma} \delta_{\sigma,\sigma'}.$$
 (1.25)

La formula 1.23 ha una forte somiglianza formale con quella corrispondente all'hamiltoniano di un sistema di oscillatori armonici disaccoppiati. Somiglianza che diventa più stretta scegliendo come valore per le costanti di normalizzazione (dipendenti dal numero d'onda)

$$N_k = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3\omega_k}}.$$
(1.26)

In questo modo l'energia del campo elettromagnetico diventa formalmente identica a una somma di energie corrispondenti a oscillatori normali di campo:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \omega_k (a_{k,\sigma} a_{k,\sigma}^* + a_{k,\sigma}^* a_{k,\sigma}).$$
(1.27)

Nella quale i modi normali rappresentano le oscillazioni del campo con frequenza ω_k . Trattando i coefficienti $a_{k,\sigma} \in a_{k,\sigma}^*$ come ampiezze classiche potremmo fare un ulteriore passo e scrivere la formula:

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \omega_k(a_{k,\sigma} a_{k,\sigma}^*).$$
(1.28)

Ma il processo di quantizzazione prevede che questi siano interpretati come operatori non commutanti per i quali le due espressioni dell'energia 1.27 e 1.28 smetterebbero di essere equivalenti. Sostituiamo quindi nella 1.27 il coefficiente $a_{k,\sigma}$ con l'operatore $\hat{a}_{k,\sigma}$, e il coefficiente complesso coniugato $a_{k,\sigma}^*$ con l'operatore aggiunto $\hat{a}_{k,\sigma}^+$. La quantizzazione delle proprietà del campo elettromagnetico è introdotta con le regole di commutazione:

$$\left[\hat{a}_{k,\sigma}, \hat{a}^{+}_{k',\sigma'}\right] = \delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{1.29}$$

insieme con

$$[\hat{a}_{k,\sigma}, \hat{a}_{k',\sigma'}] = [\hat{a}_{k,\sigma}^+, \hat{a}_{k',\sigma'}^+] = 0.$$
(1.30)

Queste regole di commutazione furono impiegate da Dirac [6] nel 1927 e applicate, come da noi appena fatto, per definire l'algebra degli operatori $\hat{a}_{k,\sigma}$

e $\hat{a}_{k,\sigma}^+$. La migliore giustificazione di questa particolare scelta, piuttosto che di una qualsiasi altra, è che su di essa Dirac sviluppò una teoria della radiazione in grado di derivare immediatamente due importanti risultati. Il primo di essi fu una derivazione da principi primi della teoria di Einstein sull'emissione e l'assorbimento della radiazione. In più Dirac fu capace di mostrare come dalle regole di commutazione 1.30 derivasse naturalmente una descrizione statistica dei fotoni basata sulla distribuzione di Bose-Einstein.

Confortati da questi risultati (anche se *a posteriori*), riscriviamo l'*operatore* energia per il campo elettromagnetico in termini degli operatori $\hat{a}_{k,\sigma} \in \hat{a}_{k,\sigma}^+$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \omega_k (\hat{a}_{k,\sigma} \hat{a}^+_{k,\sigma} + \hat{a}^+_{k,\sigma} \hat{a}_{k,\sigma}), \qquad (1.31)$$

da cui, utilizzando la 1.30, otteniamo la formula

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \omega_k \left(\hat{a}^+_{k,\sigma} \hat{a}_{k,\sigma} + \frac{1}{2} \right).$$
(1.32)

1.2 Stati del campo elettromagnetico

Con l'hamiltoniano dato da 1.32, insieme con le regole di commutazione 1.30, siamo riusciti a ricondurre il nostro modello matematico per il campo elettromagnetico ad un sistema di oscillatori armonici disaccoppiati. Possiamo quindi trasferire in blocco tutte le proprietà dello spettro dell'oscillatore armonico, e in particolare esprimere l'hamiltoniano in funzione dell'operatore numero $\hat{N}_{k,\sigma}$, definito dalla relazione:

$$\hat{N}_{k,\sigma} = \hat{a}^+_{k,\sigma} \hat{a}_{k,\sigma}.$$
(1.33)

L'operatore numero chiaramente commuta con l'hamiltoniano 1.32, e il suo autovalore $n_{k,\sigma}$, numero intero non negativo, sarà utilizzato per indicizzare gli autostati di questo. E' possibile quindi definire lo spazio degli stati come prodotto tensoriale degli spazi relativi ai singoli oscillatori indipendenti. In questo spazio il generico autostato dell'hamiltoniano sarà definito come prodotto degli autostati $|n_{k,\sigma}\rangle$ degli oscillatori separati :

$$|...n_{k,\sigma}...n_{k',\sigma'...}\rangle = ...|n_{k,\sigma}\rangle ...|n_{k',\sigma'}\rangle ...$$
(1.34)

Su questi autostati diventa estremamente semplice ricavare il valore dell'energia del campo. Questa infatti risulta dalla somma delle energie degli infiniti oscillatori disaccoppiati, ognuno con una propria frequenza di oscillazione ω_k :

$$E = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \omega_k \left(n_{k,\sigma} + \frac{1}{2} \right).$$
(1.35)

Si è soliti definire lo *stato di vuoto* del campo come lo stato rappresentato dal ket:

$$|...0_{k,\sigma}...0_{k',\sigma'...}>,$$
 (1.36)

nel quale tutti gli oscillatori sono nel loro stato fondamentale. Come è evidente dalla formula 1.35 a tale stato del campo corrisponde una energia di *punto zero* data dalla somma delle energie dei livelli fondamentali dei singoli oscillatori:

$$E_0 = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar\omega_k}{2} = \infty.$$
(1.37)

Incontriamo così una delle divergenze che inevitabilmente accompagnano il procedimento di quantizzazione del campo elettromagnetico libero. Finchè però ci limitiamo agli autovalori dell'energia la difficoltà può essere facilmente eliminata cancellando le energie di punto zero. In questo modo otteniamo per il valore dell'energia del campo la formula:

$$E = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \omega_k n_{k,\sigma}.$$
 (1.38)

Oltre all'energia, al campo elettromagnetico è associata una quantità di moto data dalla formula classica:

$$\vec{p} = \int_{L^3} dV \frac{1}{8\pi c} \vec{E} \wedge \vec{B} = \int_{L^3} dV \frac{1}{8\pi c} \left(-\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) \wedge \left(\nabla \wedge \vec{A} \right).$$
(1.39)

Anche in questo caso, utilizzando *l'operatore* potenziale vettore, possiamo trovare l'operatore corrispondente agente sullo spazio degli stati del campo elettromagnetico:

$$\hat{p} = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \vec{k} \hat{a}^+_{k,\sigma} \hat{a}_{k,\sigma} = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \vec{k} \hat{N}_{k,\sigma}.$$
(1.40)

Come è evidente dalla presenza dell'operatore numero $N_{k,\sigma}$, gli autostati dell'hamiltoniano del campo elettromagnetico sono anche autostati della quantità di moto con valore dato da:

$$\vec{p} = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \vec{k} n_{k,\sigma}.$$
(1.41)

Abbiamo così definito le grandezze fondamentali del campo elettromagnetico e il valore da queste assunto nei differenti stati. Dalle formule per l'energia e la quantità di moto :

$$E = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \omega_k n_{k,\sigma}, \qquad \vec{p} = \sum_{\vec{k},\sigma} \hbar \vec{k} n_{k,\sigma}, \qquad (1.42)$$

è possibile dedurre una interpretazione corpuscolare delle proprietà del campo elettromagnetico ed introdurre il concetto, fondamentale per tutta la elettrodinamica quantistica, di fotone o quanto di luce. Possiamo interpretare il campo elettromagnetico libero come costituito da particelle di energia $\hbar\omega_k$ e impulso $\hbar k$, i fotoni, per i quali la relazione tra queste grandezze è la medesima esistente, in meccanica relativistica, per particelle di massa di quiete nulla. Gli autovalori dell'operatore numero $n_{k,\sigma}$ assumono quindi il significato di numero di fotoni del campo con un definito valore dell'impulso $\hbar \vec{k}$ e della polarizzazione $\hat{\epsilon}_{k,\sigma}$. In questo modo abbiamo dimostrato come tutto il formalismo matematico sviluppato risulta corrispondente ad una rappresentazione del campo elettromagnetico libero come insieme di fotoni. In questo formalismo, che altro non è che il metodo della seconda quantizzazione applicato ai fotoni, il ruolo di variabili indipendenti è svolto dai numeri $n_{k,\sigma}$ e gli operatori agiscono sulle funzioni di queste variabili. Il ruolo fondamentale è svolto dagli operatori $\hat{a}_{k,\sigma}$ e $\hat{a}_{k,\sigma}^+$ la cui azione sugli autoket dell'operatore numero è data, in analogia al modello dell'oscillatore armonico, da:

$$\hat{a}_{k,\sigma}|...n_{k,\sigma}...\rangle = \sqrt{n_{k,\sigma}}|...n_{k,\sigma} - 1...\rangle$$
(1.43)

е

$$\hat{a}_{k,\sigma}^{+}|...n_{k,\sigma}...> = \sqrt{n_{k,\sigma}+1}|...n_{k,\sigma}+1...>,$$
 (1.44)

variando il numero di fotoni presenti in un determinato stato.

Capitolo 2

Studio dell'interazione tra campo elettromagnetico e materia

Il punto di partenza nello studio dell'evoluzione del sistema atomo-radiazione è la definizione dell'hamiltoniana classica. Da questa sarà poi possibile, utilizzando il principio di corrispondenza, passare alla formulazione quantistica del problema definendo il relativo operatore hamiltoniano e il corrispondente spazio di Hilbert. Su queste ultime definizioni (spazio degli stati e operatore hamiltoniano) si traccia la differenza della trattazione del sistema atomo-radiazione.

Quando quest'ultima è semiclassica l'hamiltoniano conterrà esclusivamente operatori descriventi le proprietà dell'atomo e quindi agente solo sullo spazio degli stati di quest'ultimo. Il campo elettromagnetico sarà considerato come campo esterno funzione di operatori definiti sul medesimo spazio degli stati. Le transizioni tra stati stazionari saranno quindi trattate perturbativamente.

Qualora si passi alla descrizione del campo attraverso il metodo della *seconda quantizzazione* l'hamiltoniano conterrà anche operatori connessi alle osservabili del campo. Lo spazio di Hilbert, che di conseguenza dovrà descrivedere lo stato del sistema globale formato dall'atomo e dalla radiazione, avrà quindi la particolare struttura di prodotto tensoriale di spazi di Hilbert.

Le due trattazioni del sistema sono profondamente differenti e cercano (come ogni teoria fisica) di giustificare e spiegare i risultati fondamentali della fenomenologia dell'interazione radiazione-atomo quali ad esempio le regole di selezione, la probabilità di transizione, lo spettro atomico fine e iperfine etc.

Come ogni teoria che rappresenta una migliore approssimazione nella descrizione di un sistema fisico, il metodo della *seconda quantizzazione* in parte conferma i risultati ottenuti con la formulazione semiclassica (quali ad esempio le regole di selezione), in parte amplia lo spettro dei fenomeni interpretabili con la teoria quantistica che non erano spiegabili prescindendo dalla *seconda quantizzazione*, quali ad esempio l'emissione spontanea di un atomo eccitato.

2.1 Interazione di un atomo col campo classico di radiazione

2.1.1 Particella carica in un campo elettromagnetico

Nella teoria classica l'hamiltoniana di una particella carica in un campo elettromagnetico può essere ottenuta da quella descrivente il moto della particella libera

$$\vec{H} = \frac{\vec{P}^2}{2m},\tag{2.1}$$

attraverso la sostituzione (solitamente indicata come accoppiamento minimale) del momento meccanico \vec{P} con il termine $\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$, e dell'hamiltoniana \vec{H} con $\vec{H} - e\varphi$, dove φ è il potenziale scalare, \vec{A} è il potenziale vettore, mentre \vec{p} è la quantità di moto generalizzata. Fondamentale proprietà di questo processo è la garanzia di essere invariante per trasformazioni di gauge. Con questo intendiamo affermare che se tale hamiltoniana funzione di \vec{A} e φ descrive un particolare moto del sistema, un *identico* moto sarà descritto se a queste quantità sostituiamo \vec{A} e $\hat{\varphi}$ ottenute con la seguente sostituzione

$$\vec{A} = \vec{A} + \nabla \chi \tag{2.2}$$

$$\dot{\varphi} = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t},\tag{2.3}$$

dove χ è una funzione delle coordinate e del tempo. La libertà (vincolata) nella scelta dei potenziali potrà così essere utilizzata per descrivere il medesimo sistema con una quaterna di potenziali (le tre componenti di \vec{A} e il potenziale scalare φ) più *comodi* per il particolare problema da affrontare.

Arriviamo così all'espressione dell'hamiltoniana classica[12] che rispetti le nostre richieste di essere invariante per trasformazioni di gauge:

$$\vec{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi, \qquad (2.4)$$

e possiamo partire da questa formula per poter arrivare alla descrizione quantistica del sistema. Per fare questo applichiamo il principio di corrispondenza e definiamo *l'operatore hamiltoniano* sostituendo alle coordinate canoniche classiche i corrispettivi operatori. In rappresentazione delle coordinate questo vuol dire effettuare il seguente passaggio:

$$\vec{r} \longrightarrow \hat{r}$$
 (2.5)

$$\vec{p} \longrightarrow -i\hbar\nabla,$$
 (2.6)

con le usuali regole di commutazione:

$$[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0 \tag{2.7}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 (2.8)$$

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j}. \tag{2.9}$$

Tenendo sempre presente che \hat{p} è l'operatore corrispondente al momento generalizzato \vec{p} e non al momento meccanico \vec{P} legato a quest'ultimo dalla relazione:

$$\vec{P} = \vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}.$$
(2.10)

Come precedentemente affermato l'hamiltoniana classica soddisfa completamente le richieste di *invarianza di gauge* fornendo la medesima traiettoria con differenti potenziali legati tra loro dalla 2.2 e dalla 2.3. Tale invarianza si traduce in meccanica quantistica nella richiesta che l'hamiltoniano, ottenuto con la sostituzione degli operatori corrispondenti, fornisca lo stesso valore delle osservabili per le differenti scelte del *gauge*, oppure equivalentemente, che le soluzioni dell'equazioni di Schroedinger dipendente dal tempo, corrispondenti a differenti scelte di *gauge*, siano tra loro legate dalla moltiplicazione per un fattore di fase.

Per dimostrare che questa richiesta viene soddisfatta dall'operatore hamiltoniano corrispondente a 2.4 scriviamo inizialmente le relative equazioni di Schroedinger dipendenti dal tempo :

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2 + e\varphi\right]\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$
(2.11)

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2 + e\dot{\varphi}\right]\dot{\psi} = i\hbar\frac{\partial\dot{\psi}}{\partial t}.$$
(2.12)

E definite le rispettive soluzioni $\psi \in \hat{\psi}$, mostriamo che sussiste la seguente relazione :

$$\acute{\psi} = \psi e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi},$$
(2.13)

dove χ è la funzione delle coordinate e del tempo generatrice del cambiamento di gauge. Inserendo $\psi = \psi e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi}$ nella 2.12 si ottiene l'equazione

$$\frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right)^2\psi e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi} + \left(e\varphi - \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\psi e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi} = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi} - \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi},$$
(2.14)

e conseguentemente è facile dimostrare come l'applicazione dell'operatore $\frac{1}{2m}\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\hat{A}-\frac{e}{c}\nabla\chi\right)$ sulla funzione d'onda $\acute{\psi}=\psi e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi}$ porti a:

$$\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)\psi e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi} = \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi\right)\psi e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi} = e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A} - \frac{e}{c}\nabla\chi + \frac{e}{c}\nabla\chi\right)\psi = e^{\frac{ie}{\hbar c}\chi}\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)\psi.$$
(2.15)

Moltiplicando ancora per $\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)$ riotteniamo l'equazione 2.11 di partenza dimostrandone l'equivalenza per differenti scelte di *gauge*.

Sviluppando il quadrato nell'hamiltoniano bisogna tenere presente che in generale gli operatori $\hat{p} \in \hat{A}$ non commutano. Otteniamo così la seguente espressione per quest'ultimo:

$$\frac{1}{2m}\hat{p}^2 - \frac{e}{2mc}\left(\hat{p}\hat{A} + \hat{A}\hat{p}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{A}^2 + e\varphi.$$
 (2.16)

Tenendo conto della regola di commutazione dell'operatore impulso con qualsiasi funzione delle coordinate [\hat{p}, \hat{A}] = $-i\hbar\nabla\cdot\hat{A}$ possiamo sfruttare la libertà nella scelta dei potenziali e richiedere che il potenziale vettore abbia divergenza nulla. Con tale scelta del *gauge* possiamo scrivere l'hamiltoniano per una particella in un campo elettromagnetico:

$$\frac{1}{2m}\hat{p}^2 - \frac{e}{mc}\left(\hat{p}\hat{A}\right) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{A}^2 + e\varphi, \qquad (2.17)$$

che prenderemo come punto di partenza per lo studio dell'interazione tra l'atomo è il campo di radiazione.

2.1.2 Interazione dipolare

L'hamiltoniano descrivente il moto di una particella carica in un campo elettromagnetico interviene nello studio delle transizioni atomiche qualora si descriva il moto di un elettrone soggetto all'interazione col nucleo e con i restanti elettroni. In tal caso la (2.17) può essere modellata (con le dovute approssimazioni) per descrivere il moto di un elettrone nel caso più semplice in cui questo formi un sistema legato col solo protone. A tale sistema *a due* corpi si applicherebbe l'usuale processo di separazione delle variabili e in tal caso la 2.17 descriverebbe gli stati di una particella avente massa uguale alla massa ridotta del sistema. Gli stati di tale particella ideale differirebbero da quelli dell'elettrone a seconda di quanto il rapporto delle masse m_e/m_p sia prossimo allo zero. Utilizzeremo quindi l'equazione 2.17 riferita al moto dell'elettrone confortati dal fatto che tale rapporto è dell'ordine di 10^{-3} e che, conseguentemente, la massa ridotta sia confondibile con quella dell'elettrone atomico.

Possiamo ora applicare le considerazioni precedentemente discusse per studiare le transizioni atomiche del sistema elettrone-protone a causa di una perturbazione armonica (onda piana monocromatica) limitandoci inizialmente al termine più intenso contenente $\hat{p}\hat{A}$ e trascurando sia il termine proporzionale ad \hat{A}^2 , sia le correzioni relativistiche aggiuntive che completano l'interazione e generano eventualmente la struttura fina dello spettro energetico dell'atomo.

Il sistema isolato consiste di due particelle cariche legate dal potenziale coulombiano $-\frac{e^2}{r}$ i cui stati stazionari sono le soluzioni del problema agli autovalori :

$$\hat{H}_0\psi_n = E_n\psi,\tag{2.18}$$

sottoposto ad una perturbazione armonica derivata dal potenziale vettore (quì definito classicamente)

$$\vec{A} = 2A_0\hat{\epsilon}\cos(\omega t - \frac{\omega}{c}\hat{n}\vec{r}).$$
(2.19)

Dove $\hat{\epsilon}$ rappresenta un versore diretto perpendicolarmente a \hat{n} in maniera tale che il potenziale vettore soddisfi la richiesta di *trasversalità*: $\nabla \cdot \vec{A} = 0$. Possiamo adesso applicare il formalismo della teoria perturbativa dipendente dal tempo per calcolare la probabilità legata ad una transizione tra gli stati stazionari di \hat{H}_0 a causa della perturbazione $\frac{-e}{mc} \left(\hat{p} \hat{A} \right) \operatorname{con} \hat{A} = 2A_0 \hat{\epsilon} \cos(\omega t - \frac{\omega}{c} \hat{n} \hat{r})$.

Sviluppando il coseno in somma di esponenziali complessi otteniamo $\hat{A} = A_0 \hat{\epsilon} \left(e^{(i)(\omega t - \frac{\omega}{c} \hat{n} \hat{r})} + e^{(-i)(\omega t - \frac{\omega}{c} \hat{n} \hat{r})} \right)$ riconducendoci al noto caso di una perturbazione armonica nel quale il termine della somma proporzionale a $e^{-i\omega t}$ è responsabile dell'assorbimento stimolato da parte dell'elettrone di un quanto di energia $\hbar \omega$, mentre il termine proporzionale a $e^{i\omega t}$ è quello responsabile dell'emissione stimolata.

Trattiamo in dettaglio il caso dell'assorbimento stimolato dall'onda piana monocromatica di pulsazione ω . Dai risultati della teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo applichiamo al nostro caso la formula

$$\frac{2\pi}{\hbar} \left| < f |\hat{V}|i > \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \qquad (2.20)$$

legata alla probabilità, indotta dalla perturbazione armonica $\hat{V}e^{-i\omega t}$, di una transizione tra due autostati $|i\rangle = |f\rangle$ dell'hamiltoniano imperturbato e dove E_i e E_f sono le rispettive energie. Applicandola al nostro caso, con

$$\hat{V}e^{-i\omega t} = -\left(\frac{e}{mc}\right)A_0\hat{\epsilon}\cdot\hat{p}e^{(-i)(\omega t - \frac{\omega}{c}\hat{n}\hat{r})}$$
(2.21)

otteniamo:

$$\frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e^2}{m_2 c_2}\right) \left|A_0\right|^2 \left| < f \left| \left(e^{(i)(\omega t - \frac{\omega}{c}\hat{n}\hat{r})}\hat{\epsilon} \cdot \hat{p}\right|i > \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega).$$
(2.22)

Una ulteriore approssimazione può essere apportata qualora la lunghezza d'onda del campo di radiazione sia molto più lunga delle dimensioni atomiche in maniera tale che la serie:

$$e^{(i)\left(\frac{\omega}{c}\hat{n}\hat{r}\right)} = 1 + i\frac{\omega}{c}\hat{n}\cdot\hat{r} + \dots$$
(2.23)

possa essere approssimata con il suo termine dominante. La bontà di tale approssimazione può essere giustificata per atomi leggeri in questo modo: per il campo di radiazione $\hbar\omega$ deve essere dell'ordine della differenza tra i livelli energetici

$$\hbar\omega \approx \frac{Ze^2}{a_{Bohr}/Z} \approx \frac{Ze^2}{R_{atomo}},\tag{2.24}$$

che porta a

$$\frac{c}{\omega} = \frac{\lambda}{2\pi} \approx \frac{c\hbar R_{atomo}}{Ze^2} \approx 137 R_{atomo} Z,$$
(2.25)

da cui discende che per atomi leggeri, cioè con numero atomico Z piccolo, abbiamo $\frac{Z}{137} \ll 1$. Essendo l'elemento di matrice di \hat{r} dell'ordine di R_{atomo} siamo quindi giustificati nel sostituire lo sviluppo 2.23 col suo termine dominante. Questa approssimazione permette di sostituire a $\langle f | e^{\frac{i\omega}{c} \hat{n} \hat{r}} \hat{\epsilon} \cdot \hat{p} | i \rangle$ la più semplice formula $\hat{\epsilon} < n | \hat{p} | i \rangle$ e in particolare, prendendo $\hat{\epsilon}$ lungo l'asse x e \hat{n} lungo l'asse z essa viene ricondotta a $\hat{\epsilon} < n | \hat{p}_x | i \rangle$.

Possiamo calcolare facilmente l'elemento di matrice dell'operatore \hat{p}_x usando la relazione

$$[\hat{x}, \hat{H}_0] = i\hbar \frac{p_x}{m}, \qquad (2.26)$$

ottenendo

$$< f|\hat{p}_{x}|i> = \frac{m}{i\hbar} < f|[\hat{x}, \hat{H}_{0}]|i> = im\omega_{f,i} < f|\hat{x}|i>.$$
 (2.27)

In questo modo vediamo come si possa ricondurre la ricerca di quegli autostati di \hat{H}_0 tra i quali può avvenire una transizione, alla determinazione dell'elemento di matrice dell'operatore *dipolo* $e\hat{x}$ tra i medesimi autostati.

2.1.3 Regole di selezione

Ricondotta la ricerca delle transizioni possibili a quello della determinazione degli elementi di matrice dell'operatore *dipolo*, possiamo procedere per cercare di trovare una relazione che esprima in maniera diretta la possibilità o meno di tale transizione. Cerchiamo, ancora una volta, di esprimere tale problema in funzione di grandezze dalle proprietà note e semplici per poter rendere palesi, tramite queste, quali siano le regole che *selezionano* e fissano le transizioni atomiche.

Se trascuriamo lo spin dell'elettrone e del protone nel nostro modello semplificato di atomo le funzioni d'onda corrispondenti agli stati stazionari dell'operatore \hat{H}_0 , diagonalizzate insieme agli operatori $\hat{L}^2 \in \hat{M}_z$ relativi all' osservabile momento angolare, sono della forma

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta,\phi), \qquad (2.28)$$

dove è stata messa in evidenza la dipendenza dalle coordinate e il legame con le armoniche sferiche.

Abbiamo quindi che in rappresentazione delle coordinate l'elemento di matrice dell'operatore dipolo diventa

$$\langle f|\hat{r}|i\rangle = \int \left(R_f n_f, l_f(r) Y_{l_f}^{m_f}(\theta, \phi)\right)^* \hat{r} \left(R_f n_i, l_i(r) Y_{l_i}^{m_i}(\theta, \phi)\right) dr d\Omega.$$

$$(2.29)$$

Sarà sufficiente, da ora in avanti, limitarci esclusivamente alla parte angolare sia per quanto riguarda la funzione d'onda (e quindi tratteremo esclusivamente l'armonica sferica) sia per le coordinate. Se osserviamo le funzioni che esprimono le tre armoniche sferiche

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi}$$

$$Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$
(2.30)

vediamo come sia possibile tramite di esse esprimere le coordinate cartesiane a meno del raggio r:

$$\frac{x}{r} = \sin\theta\cos\phi = \frac{2\pi}{3} \left(Y_1^0 - Y_1^1\right)$$
$$\frac{y}{r} = \sin\theta\sin\phi = -\frac{2\pi}{3} \left(Y_1^0 + Y_1^1\right)$$
$$\frac{z}{r} = \cos\theta = Y_1^{-1}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}.$$
(2.31)

Riconduciamo così la parte angolare della 2.29 al calcolo di tre integrali ciascuno contenente il prodotto di tre armoniche sferiche :

$$\int \left(Y_{l_f}^{m_f}(\theta,\phi)\right)^* Y_1^1(\theta,\phi) Y_{l_i}^{m_i}(\theta,\phi) d\Omega$$
(2.32)

$$\int \left(Y_{l_f}^{m_f}(\theta,\phi)\right)^* Y_1^{-1}(\theta,\phi) Y_{l_i}^{m_i}(\theta,\phi) d\Omega$$
(2.33)

$$\int \left(Y_{l_f}^{m_f}(\theta,\phi)\right)^* Y_1^0(\theta,\phi) Y_{l_i}^{m_i}(\theta,\phi) d\Omega.$$
(2.34)

Da proprietà del tutto generali riguardanti le armoniche sferiche e il legame con i coefficienti di *Clebsch-Gordan* è possibile dedurre una formula che che lega a quest'ultimi gli integrali del tipo illustrato, riconducendo il problema del calcolo dell'elemento di matrice dell'operatore dipolo alle più note proprietà dei coefficienti di Clebsch-Gordan.

La formula che utilizzeremo è la seguente

$$\int Y_{l}^{m*}(\theta,\phi)Y_{l_{1}}^{m_{1}}(\theta,\phi)Y_{l_{2}}^{m_{2}}(\theta,\phi)d\Omega = \sqrt{\frac{(2l_{1}+1)(2l_{2}+1)}{4\pi(2l+1)}} < l_{1}l_{2};00|l_{1}l_{2};l0> < l_{1}l_{2};m_{1}m_{2}|l_{1}l_{2};lm>.$$
(2.35)

I coefficienti di Clebsch-Gordan $\langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l, m \rangle$ sono diversi da zero solo nei casi in cui sussistano per i numeri quantici del momento angolare totale e delle singole particelle le relazioni

$$m = m_1 + m_2$$

$$|l_1 - l_2| \le l \le l_1 + l_2.$$
(2.36)

Nel nostro caso abbiamo $l_1 = 1$ e $m_1 = \{-1, 0, 1\}$ per cui l'impossibilità di una transizione è legata alla nullità dei due coefficienti :

$$\begin{cases} < 1l_2; 00|1l_2; l0 > \\ < 1l_2; (\pm 1, 0)m_2|1l_2; lm > \end{cases}$$
(2.37)

Il primo di questi porta, secondo le 2.36, alla regole $\Delta l = \pm 1$ per il numero quantico l legato al momento orbitale totale; mentre il secondo richiede che, affinche sia diverso da zero, $\Delta m = \pm 1$ e $\Delta m = 0$.

Applicate all'elemento di matrice $\langle f|\hat{r}|i\rangle$, legato all'operatore dipolo $e\hat{r}$, abbiamo le seguenti regole di selezione:

$$\begin{cases} \Delta l = \pm 1\\ \Delta m = \pm 1 \end{cases}$$
(2.38)

per le componenti $x \in y$. Mentre avremo:

$$\begin{cases}
\Delta l = \pm 1 \\
\Delta m = 0
\end{cases}$$
(2.39)

per la componente sull'asse z.

2.2 Interazione di un atomo col campo quantizzato

L'interazione elettrone-protone, come più fondamentale e semplice sistema *atomico*, è stata studiata considerando le transizioni tra autostati dell'hamiltoniano

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r},\tag{2.40}$$

dovute all'effetto della perturbazione dipendente dal tempo

$$\hat{W} = -\frac{e}{mc}(\hat{p}\hat{A}). \tag{2.41}$$

Il campo elettromagnetico interviene, nella precedente analisi, attraverso l'azione di operatori agenti esclusivamente sullo spazio di Hilbert legato agli stati dell'elettrone. Un primo importante passo verso la comprensione dei fenomeni legati all' interazione tra radiazione e materia porta all'inglobamento del campo come soggetto dell'interazione insieme alle particelle costituenti ciò che noi abbiamo indicato come materia. Sarà quindi descritto attraverso operatori agenti su un opportuno spazio degli stati (spazio di Fock) descrivente lo stato del campo e l'azione di questo sulla materia. Il metodo che porta a tale descrizione *attiva* della radiazione è, come abbiamo visto, il metodo della seconda quantizzazione. Nel nostro primo approccio al più semplice sistema atomico e allo studio delle transizioni dell'elettrone, il metodo di indagine rimarrà sostanzialmente invariato. Cercheremo infatti anche in questo caso di trovare gli autostati di un hamiltoniano imperturbato e di studiare le transizioni tra questi dovuti alla medesima perturbazione 2.41. Estenderemo però anche alle grandezze del campo tale trattazione e vedremo come, con questo passaggio, sarà possibile spiegare fenomeni nuovi e peculiari di tale descrizione, dimostrandone, almeno in tale approssimazione, una maggiore consistenza fisica.

2.2.1 Termini dell'interazione

L'hamiltoniano che descrive gli stati legati dell'elettrone é

$$\hat{H}_e = \frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{r}.$$
(2.42)

L'interazione con il campo elettromagnetico, descritta in maniera tale da essere invariante per trasformazioni di gauge, avviene attraverso l'accoppiamento minimale $\hat{P} \longrightarrow \hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}$.

Insieme con l'hamiltoniano H_{rad} , che descrive il campo libero, l'hamiltoniano che descrive gli stati del sistema totale atomo-radiazione diventa:

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \int \frac{\hat{E}^2 + \hat{B}^2}{8\pi} dx^3, \qquad (2.43)$$

nel quale compaiono oltre agli operatori \hat{r}
e \hat{p} che agiscono sullo stato dell'elettrone anche gli operatori di creazione e annichilazione (
 \hat{a} e \hat{a}^+) attraverso l'azione degli operatori legati alle grandezze del campo. Sviluppando il quadrato otteniamo che l'hamiltoniano è esprimibile come la somma di
 $\hat{H}_e,$ \hat{H}_{rad} più il termine:

$$\hat{H}_{int} = -\frac{e}{mc}\hat{p}\hat{A} + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{A}^2, \qquad (2.44)$$

dove è stata sfruttata, esattamente come nel caso quasiclassico studiato precedentemente, la commutatività degli operatori \hat{p} e \hat{A} a causa della condizione $\nabla\cdot\hat{A}=0$. Separando l'interazione in due termini, uno proporzionale ad \hat{A} e uno proporzionale ad \hat{A}^2 , e considerando la forma che il potenziale vettore assume nel formalismo della seconda quantizzazione abbiamo $\hat{H}_{int}=\hat{H}_{int}'+\hat{H}_{int}''$ con :

$$\hat{H}'_{int} = -\frac{e}{mc} \sum_{k,\sigma} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3\omega_k}} \hat{p}\epsilon_{k,\sigma} \left(\hat{a}_{k,\sigma} e^{i\hat{k}\hat{r}} + \hat{a}^*_{k,\sigma} e^{-i\hat{k}\hat{r}} \right)$$
(2.45)

е

$$\hat{H}_{int}'' = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_{k,\sigma} \sum_{k',\sigma'} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3} \right) \frac{\epsilon_{k,\sigma} \epsilon_{k',\sigma'}}{\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} \left(\hat{a}_{k,\sigma} \hat{a}_{k',\sigma'} e^{i(\hat{k}+\hat{k}')\hat{r}} + \hat{a}_{k,\sigma} \hat{a}_{k',\sigma'} e^{i(\hat{k}-\hat{k}')\hat{r}} + \hat{a}_{k,\sigma}^+ \hat{a}_{k',\sigma'} e^{i(-\hat{k}+\hat{k}')\hat{r}} + \hat{a}_{k,\sigma}^+ \hat{a}_{k',\sigma'}^+ e^{i(-\hat{k}-\hat{k}')\hat{r}} \right).$$
(2.46)

In assenza del termine \hat{H}_{int} l'hamiltoniano del sistema totale si presenta come la somma di due termini, $\hat{H}_e \in \hat{H}_{rad}$, ognuno contenente soltanto le osservabili relative alla particella o al campo di radiazione. In tal caso il sistema è *separabile* e lo spazio degli stati avrà la struttura di prodotto tensoriale tra lo spazio di Hilbert degli autostati di \hat{H}_e e lo spazio di Fock per la radiazione.

Il generico ket di questo spazio sarà indicato come

$$|elettrone + radiazione \rangle = |el \rangle |...n_{k,\sigma}.... \rangle$$
. (2.47)

In tal modo, sfruttando la relativa piccolezza del termine \hat{H}_{int} rispetto al resto dell'hamiltoniano, possiamo studiare transizioni tra tali stati trattando \hat{H}_{int} come perturbazione.

Esattamente come nel caso quasiclassico le probabilità per unità di tempo di una transizione è, al primo ordine dell'approssimazione, data dalla formula (regola d'oro di Fermi):

$$\frac{2\pi}{\hbar} \left| < f | \hat{V} | i > \right|^2 \delta(E_f - E_i), \qquad (2.48)$$

nella quale $|i\rangle \in |f\rangle$ rappresentano lo stato dell'intero sistema.

Alcune proprietà fisiche sul tipo di interazioni indotte dai termini \hat{H}'_{int} e da \hat{H}''_{int} emergono immediatamente qualora si analizzi come agiscono sugli autoket gli operatori di creazione e distruzione. E' facile comprendere come \hat{H}'_{int} contenendo combinazioni lineari di $\hat{a} \in \hat{a}_+$ descriverà transizioni in cui un solo fotone è coinvolto. Differentemente il termine \hat{H}'_{int} descriverà transizioni nelle quali intervengono due fotoni.

2.2.2 Assorbimento da parte di un atomo

Considerando il sistema elettrone-protone supponiamo l'elettrone inizialmente in uno stato $|E_i\rangle$ con energia E_i . E analizziamo una transizione verso uno stato eccitato $|E_f\rangle$ di energia E_f a causa dell'assorbimento di un fotone con energia $\hbar\omega = E_f - E_i$ di data polarizzazione σ e numero d'onda $k = \frac{\omega}{c}$.

Gli stati iniziali e finali saranno rappresentati dai ket:

$$|i\rangle = |E_i\rangle |\dots n_{k,\sigma} \dots \rangle \tag{2.49}$$

$$|f\rangle = |E_f\rangle |...n_{k,\sigma} - 1....\rangle,$$
 (2.50)

e le transizioni saranno dovute esclusivamente al termine \hat{H}'_{int} , come si può facilmente verificare analizzando gli elementi di matrice degli operatori di creazione e distruzione che sarebbero nulli tra ket differenti per l'occupazione



Figura 2.1: Assorbimento di un fotone con numero d'onda k.

di un solo fotone. La probabilità per unità di tempo per tale fenomeno è quindi data da :

$$\frac{2\pi}{\hbar} \left| < \dots n_{k,\sigma} - 1 \dots \right| < E_f |\hat{H}'_{int}|E_i > |\dots n_{k,\sigma} \dots > \Big|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3\omega_k}\right) \left| < E_f |\hat{p}\epsilon_{k,\sigma}e^{i\hat{k}\hat{r}}|E_i > < n_{k,\sigma} - 1|\hat{a}|n_{k,\sigma} > \Big|^2 \times \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \left| < E_f |\hat{p}\epsilon_{k,\sigma}e^{i\hat{k}\hat{r}}|E_i > \Big|^2 \sqrt{n_{k,\sigma}}\delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \quad (2.51) \right|$$

Osserviamo come tale espressione si annulli, oltre che per conservazione dell'energia, anche qualora il campo non presenti fotoni in analogia con i risultati ottenuti con l'approssimazione quasiclassica.

Il problema viene così ricondotto alla ricerca degli elementi di matrice < $E_f | \hat{p} \epsilon_{k,\sigma} e^{i \hat{k} \hat{r}} | E_i >$. Questi possono essere valutati utilizzando l'approssimazione dipolare esattamente come fatto in precedenza e portando così alle medesime regole di selezione per le transizioni, senza sostanziali modifiche rispetto al caso in cui non viene utilizzata la seconda quantizzazione.

2.2.3 Emissione da parte di un atomo

A differenza dell'assorbimento stimolato, l'analisi dell'emissione di un fotone da parte dell'elettrone che si trova inizialmente in uno stato eccitato, presenta degli aspetti peculiari che non trovano analogie nella descrizione quasiclassica della radiazione.

In questo caso abbiamo che gli stati del sistema globale sono:

$$|i\rangle = |E_i\rangle |...n_{k,\sigma}....\rangle$$
 (2.52)

$$|f\rangle = |E_f\rangle |...n_{k,\sigma} + 1....\rangle,$$
 (2.53)

e le transizioni tra questi avvengono, per il medesimo motivo espresso nel precedente paragrafo, solo a causa della perturbazione \hat{H}'_{int} .



Figura 2.2: Emissione di un fotone con numero d'onda k.

Procedendo nel calcolo del numero di transizioni per unità di tempo abbiamo:

$$\frac{2\pi}{\hbar} \left| < \dots n_{k,\sigma} + 1 \dots \right| < E_f |\hat{H}'_{int}|E_i > |\dots n_{k,\sigma} \dots > \left|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3\omega_k}\right) \left| < E_f |\hat{p}\epsilon_{k,\sigma}e^{-i\hat{k}\hat{r}}|E_i > < n_{k,\sigma} + 1|\hat{a}_+|n_{k,\sigma} > \right|^2 \times \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \left| < E_f |\hat{p}\epsilon_{k,\sigma}e^{-i\hat{k}\hat{r}}|E_i > \right|^2 \sqrt{n_{k,\sigma} + 1}\delta(E_f - E_i - \hbar\omega).$$

$$(2.54)$$

La probabilità di transizione per unità di tempo è quindi proporzionale al termine $\langle E_f | \hat{p} \epsilon_{k,\sigma} e^{-i\hat{k}\hat{r}} | E_i \rangle$ che, in approssimazine dipolare, si annulla secondo le regole di selezione precedentemente ricavate. Osserviamo come, se $n_{k,\sigma}$ il numero di fotoni del campo quantizzato, è uguale a zero, la probabilità di transizione non si annulla. Troviamo quindi che il metodo della seconda quantizzazione, applicato alle transizioni atomiche, spiega completamente il fenomeno dell'*assorbimento stimolato*, fenomeno che non ha alcuna corrispondenza nella descrizione del campo non quantizzato.

2.3 Scattering electrone-fotone

Dopo aver indagato gli effetti riguardanti l'interazione tra l'atomo e il campo di radiazione quantizzato, analizziamo ora quali sono i risultati che l'applicazione del formalismo della *seconda quantizzazione* porta nello studio dello *scattering* da parte di elettroni liberi.

Cerchiamo quindi di calcolare la probabilità per unità di tempo dell'evento di interazione monofotonica tra elettrone libero e campo descritto dal diagramma in figura 2.3.



Figura 2.3: Il fotone, rappresentato da una linea ondulata, urta con l'elettrone, rappresentato da una linea retta.

Per la ricerca delle funzioni d'onda descriventi lo stato dell'elettrone libero possiamo utilizzare l'aprossimazione con onde piane contenute in una scatola sufficientemente grande di spigolo L.

Le funzioni d'onda saranno quindi le autofunzioni simultanee dell'operatore impulso \hat{p} e dell'hamiltoniano \hat{H} , che in rappresentazione delle coordinate sono rappresentati dai seguenti operatori:

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \tag{2.55}$$

е

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m}.$$
(2.56)

Risolvendo, con le opportune condizioni al contorno sui bordi della scatola, abbiamo che lo stato dell'elettrone è rappresentato dall'onda piana

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}, \qquad (2.57)$$

con condizioni per l'autovalore

$$p_i = \frac{2\pi n_i}{\hbar},\tag{2.58}$$

dove n_i è un numero intero.

Le onde piane così definite soddisfano poi la condizione di ortonormalizzazione sul volume L^3 della scatola

$$\int_{L^3} \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \dot{\vec{p}} | \vec{r} \rangle dx dy dz = \delta_{\vec{p}, \dot{\vec{p}}}.$$
(2.59)

Passando al calcolo della probabilità di transizione abbiamo che gli stati interessati nel processo di *assorbimento di un fotone da parte dell'elettrone libero* sono:

$$|i\rangle = |\vec{p_i}\rangle|...n_{k,\sigma}....\rangle$$
 (2.60)

$$|f\rangle = |\vec{p}_f\rangle |...n_{k,\sigma} - 1....\rangle .$$
(2.61)

Transizioni tra questi due stati saranno provocate, essendo ad *un solo fotone*, esclusivamente dal termine \hat{H}'_{int} .

Per la valutazione della formula di Fermi, che fornisce una prima approssimazione per il calcolo della probabilità di transizione tra i due stati $|i\rangle$ e $|f\rangle$, calcoliamo il corrispettivo elemento di matrice di \hat{H}'_{int} :

$$< \vec{p}_{f}|i_{int}|i> =$$

$$< \vec{p}_{f}| < \dots n_{k,\sigma} - 1 \dots | \times \left\{ -\frac{e}{mc} \sum_{k,\sigma} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{L^{3}\omega_{k}}} \hat{p}\epsilon_{k,\sigma} \left(\hat{a}_{k,\sigma} e^{i\hat{k}\hat{r}} + \hat{a}_{k,\sigma}^{\dagger} e^{-i\hat{k}\hat{r}} \right) \right\} \times$$

$$\times |\vec{p}_{i}\rangle |\dots n_{k,\sigma} \dots > =$$

$$= \left(-\frac{e}{mc} \right) \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{L^{3}\omega_{k}}} < \vec{p}_{f}| \hat{p}\epsilon_{k,\sigma} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} |\vec{p}_{i}\rangle \sqrt{n_{k,\sigma}}$$

$$= \left(-\frac{e}{mc} \right) \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{L^{3}\omega_{k}}} (-\vec{p}_{f}\epsilon_{k,\sigma}) \sqrt{n_{k,\sigma}} \int \frac{e^{\frac{-i\vec{p}_{i}\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{L^{3}}} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \frac{e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{L^{3}}} dx dy dz \quad (2.62)$$

L'ultimo termine può essere visto come il prodotto scalare di due onde piane con differente impulso:

$$\int \frac{e^{\frac{-i\vec{p}_i\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{L^3}} \frac{e^{\frac{i(\vec{p}_f + \hbar\vec{k})\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{L^3}} dx dy dz = \delta_{\vec{p}_f, \vec{p}_i + \hbar\vec{k}} \qquad (2.63)$$

Tale risulato riflette la conservazione della quantità di moto

$$\vec{p}_f = \vec{p}_i + \hbar \vec{k}. \tag{2.64}$$

Oltre a questo vincolo un'altra restrizione deve essere considerata nel calcolo della probabilità di transizione. Abbiamo infatti che nella formula di Fermi compare $\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$ che aggiunge un ulteriore condizione per la possibilità dell'evento. Esprimendo l'energia dell'elettrone in termini della quantità di moto abbiamo:

$$\frac{\vec{p}_f^2}{2m} = \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \hbar \vec{k}.$$
(2.65)

Possiamo utilizzare il formalismo quadridimensionale della relatività ristretta, e le sue leggi di conservazione, per poter mostrare come sia impossibile soddisfare contemporaneamente le condizioni 2.64 e 2.65. Definito p_e il quadrimpulso dell'elettrone e p_{γ} quello relativo al fotone scriviamo l'equazione che esprime la conservazione della quantità di moto e dell'energia in notazione quadridimensionale:

$$(p_e^i + p_\gamma^i) = p_{e'}^i.$$
 (2.66)

La norma dei vettori p_e e p_{γ} è una grandezza *scalare* nella teoria della relatività ristretta. Il suo valore sarà quindi il medesimo indipendentemente dal sistema di riferimento inerziale in cui venga calcolato. In ognuno di tali sistemi abbiamo infatti i seguenti valori per la norma del quadrivettore relativo all'elettrone

$$|p_e|^2 = p_e^i p_{ie} = m_e^2 c^2 \tag{2.67}$$

e per la norma del quadrivettore relativo al fotone

$$\left|p_{\gamma}^{i}\right|^{2} = p_{\gamma}^{i} p_{i\gamma} = 0 \quad . \tag{2.68}$$

Utilizziamo ora questi risultati per il calcolo della norma del quadrivettore presente nell'equazione 2.66 che fissava la conservazione, prima e dopo l'urto, del quadrimpulso totale:

$$|p_e + p_\gamma|^2 = |p_e|^2 + |p_\gamma|^2 + 2p_e \cdot p_\gamma = |p_{e'}|^2 = |p_e|^2.$$
 (2.69)

Otteniamo così che la contrazione scalare dei due quadrivettori $2p_e \cdot p_{\gamma}$ è nulla e tale deve essere in ogni sistema di riferimento inerziale, essendo questa una grandezza scalare. In particolar modo si annullerà nel sistema in cui l'elettrone è a riposo e nel quale i quadrivettori assumono la forma:

$$p_e = (m_e c, 0)$$

$$p_\gamma = \left(\frac{E_\gamma}{c}, \vec{p}_\gamma\right)$$
(2.70)

dalla quale segue $E_{\gamma} = 0$ che significa che *nessun fotone è presente*. E' perciò impossibile per un elettrone libero assorbire un fotone.

Concludiamo quindi che non esistono contributi del primo ordine dati da \hat{H}'_{int} nell'interazione tra l'elettrone liberi e fotoni. Studieremo quindi processi del primo ordine causati da \hat{H}''_{int} , ovvero dal termine perturbativo rappresentato da una forma quadratica degli operatori di creazione e distruzione. Conseguentemente i processi descritti non saranno più ad un fotone. Calcoliamo ad esempio le transizioni dell'elettrone indotte dal termine $\hat{a}^+_{k,\sigma}\hat{a}_{k,\sigma}$. Descriviamo cioè interazioni del tipo rappresentato in figura 2.4 dove un fotone di impulso $\hbar \hat{k}$ e polarizzazione σ viene emesso.



Figura 2.4: Assorbimento di un fotone e riemissione da parte di un elettrone libero

Gli stati iniziale e finale di questo processo sono:

$$|i\rangle = |\vec{p}_i\rangle |...n_{k_i,\sigma_i}...n_{k_f,\sigma_f}...\rangle$$

$$(2.71)$$

$$|f\rangle = |\vec{p}_f\rangle |...n_{k_i,\sigma_i} - 1...n_{k_f,\sigma_f} + 1...\rangle, \qquad (2.72)$$

e la probabilità di transizione per unità di tempo diventa

$$\frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e^2}{2mc^2}\right)^2 \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}\right)^2 \frac{\left|\hat{\epsilon}_{k_f,\sigma_f} \times \hat{\epsilon}_{k_i,\sigma_i}\right|^2}{\omega_{k_i}\omega_{k_f}} \\ \times \left| < \vec{p}_f | \dots n_{k_i,\sigma_i} - 1 \dots n_{k_f,\sigma_f} + 1 \dots \right| \\ \times \left(\hat{a}_{k_i,\sigma_i} \hat{a}^+_{k_f,\sigma_f} e^{i(\hat{k}_i - \hat{k}_f)\hat{r}} + \hat{a}^+_{k_f,\sigma_f} \hat{a}_{k_i,\sigma_i} e^{i(\hat{k}_i - \hat{k}_f)\hat{r}}\right) \\ \times \left| \vec{p}_i > | \dots n_{k_i,\sigma_i} \dots n_{k_f,\sigma_f} \dots > \right|^2 \\ \times \delta \left(\hbar\omega_i + \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - \hbar\omega_f - \frac{\vec{p}_f^2}{2m} \right).$$
(2.73)

Per calcolare la 2.73 diventa ora necessario procedere alla determinazione dell'elemento di matrice dell'operatore $\left(\hat{a}_{k_i,\sigma_i}\hat{a}_{k_f,\sigma_f}^+e^{i(\hat{k}_i-\hat{k}_f)\hat{r}} + \hat{a}_{k_f,\sigma_f}^+\hat{a}_{k_i,\sigma_i}e^{i(\hat{k}_i-\hat{k}_f)\hat{r}}\right)$ tra gli stati iniziali e finali . Tale operatore può essere ricondotto alla forma 2 $\left(\hat{a}_{k_i,\sigma_i}\hat{a}_{k_f,\sigma_f}^+e^{i(\hat{k}_i-\hat{k}_f)\hat{r}}\right)$ sfruttando il fatto che gli operatori di creazione e distruzione agiscono su gradi di libertà differenti. E' conveniente procedere mettendo in evidenza la struttura di prodotto tensoriale dei ket globali 2.71 e 2.72 per poter separatamente analizzare i contributi all'elemento di matrice dell'operatore in esame. Il generico ket può essere fattorizzato nel seguente modo:

$$|\vec{p}\rangle|...n_{k,\sigma}...n_{k',\sigma'}...\rangle = |El\rangle|...\rangle|n_{k,\sigma}\rangle|n_{k',\sigma'}\rangle|...\rangle, \qquad (2.74)$$

e automaticamente l'elemento di matrice in esame viene fattorizzato nel prodotto di tre termini:

$$2 < \vec{p}_f | e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_f)} | \vec{p}_i > \times < n_{k_i, \sigma_i} - 1 | \hat{a}_{k_i, \sigma_i} | n_{k_i, \sigma_i} > \times < n_{k_f, \sigma_f} + 1 | \hat{a}_{k_f, \sigma_f}^+ | n_{k_f, \sigma_f} > \dots$$
(2.75)

Sfruttando le proprietà fondamentali degli operatori di creazione e distruzione arriviamo alla formula :

$$2 < \vec{p}_f | e^{i(\hat{k}_i - \hat{k}_f)} | \vec{p}_i > \sqrt{n_{k_f, \sigma_f} + 1} \sqrt{n_{k_i, \sigma_i}}.$$
(2.76)

In rappresentazione delle coordinate l'elemento di matrice $\langle \vec{p}_f | e^{i(\hat{k}_i - \hat{k}_f)} | \vec{p}_i \rangle$ può essere espresso come prodotto scalare tra onde piane, cioè tra autostati di impulso definito, e a causa della ortonormalizzazione di questi abbiamo:

$$\int \frac{e^{\frac{-i(\vec{p}_f + \hbar\vec{k}_f)\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{L^3}} \frac{e^{\frac{i(\vec{p}_i + \hbar\vec{k}_i)\vec{r}}{\hbar}}}{\sqrt{L^3}} dx dy dz = \delta_{\vec{p}_f + \hbar\vec{k}_f, \vec{p}_i + \hbar\vec{k}_i}, \qquad (2.77)$$

che esprime la conservazione dell'impulso

$$p_i + \hbar k_i = p_f + \hbar k_f. \tag{2.78}$$

Essendo possibile soddisfare simultaneamente la 2.78 insieme alla richiesta di conservazione dell'energia implicitamente contenuta nell'equazione 2.73 otteniamo che il primo termine dello sviluppo perturbativo è fornita da una transizione a due fotoni la cui probabilità dipende dal numero di fotoni del campo già presenti secondo la formula:

$$\left(\frac{num.trans.}{tempo}\right) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e^2}{2mc^2}\right)^2 \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}\right)^2 \frac{|\hat{\epsilon}_{k_f,\sigma_f} \cdot \hat{\epsilon}_{k_i,\sigma_i}|^2}{\omega_{k_i}\omega_{k_f}} \left(n_{k_f,\sigma_f} + 1\right) \left(n_{k_i,\sigma_i}\right)$$
(2.79)

Osserviamo come tale probabilità cresca se fotoni del tipo $k_f \sigma_f$ sono già presenti.

Capitolo 3

Il formalismo della seconda quantizzazione per un calcolo perturbativo

Il formalismo precedentemente sviluppato ci ha permesso di valutare le correzioni che il processo di quantizzazione per il campo libero ha indotto nei vari processi semplici rigurdanti la materia e la radiazione. Le formule che ci hanno fornito il numero di transizioni per secondo tra i diversi livelli di un sistema fisico, sia esso l'elettrone libero o il generico sistema atomico, coinvolgevano in maniera attiva i numeri quantici $n_{k,\sigma}$, portando così a nuovi risultati una volta abbandonata la descrizione semiclassica della radiazione.

In questo capitolo cercheremo di studiare in che modo la quantizzazione del campo interviene nella definizione della durata media di uno stato dell'atomo di idrogeno. E' impossibile, nello studio di tale oggetto fisico, ottenere dei risultati coerenti e considerevolmente in accordo con gli esperimenti prescindendo dalla teoria quantistica dei campi di cui la quantizzazione del campo libero rappresenta solo un incompleto abbozzo iniziale. D'altra parte elude dai fini di questo elaborato e soprattutto dalle conoscenze di chi lo scrive una padronanza dei metodi di tale teoria fisica.

La teoria quantistica dei campi interverrà quindi, nei successivi calcoli, solo attraverso i risultati fondamentali che riguardano le correzioni all'hamiltoniano imperturbato descrivente il moto dell'elettrone nel campo generato dal protone. Sarà sempre per i medesimi motivi che tale campo, così come quello generato dall'elettrone, sarà trattato nello studio della struttura fine e iperfine in maniera semiclassica.

Sarà solo successivamente, una volta calcolate in questo modo le energie dei vari livelli dell'idrogeno, che interverrà il formalismo della seconda quantizzazione per studiare le transizioni tra questi.

3.1 Trattazione semiclassica della radiazione per l'atomo d'idrogeno

3.1.1 Termini fondamentali

Il nostro modello di atomo di idrogeno sarà naturalmente formato da un elettrone e un protone con la ulteriore considerazione che, essendo quest'ultimo relativamente più pesante, sarà considerato fisso al centro del sistema di coordinate scelto. In questo modo la funzione d'onda sottoposta a trattazione sarà in realtà quella dell'elettrone, ma fornirà ovviamente, infomazioni riguardo a l'intero sistema atomico.

Consideriamo quindi l'elettrone nello schema precedentemente esposto. Come termine fondamentale per la definizione dei livelli energetici consideriamo la sola energia potenziale

$$\hat{V}(\hat{r}) = -\frac{e^2}{r}.$$
 (3.1)

Risolvendo l'equazione di Schroedinger per una particella in un potenziale del tipo 3.1 è noto che soluzioni normalizzabili, cioè gli stati legati, si ottengono soltanto per valori dell'energia E_n dati dalla formula:

$$E_n = -\alpha^2 m c^2 \left(\frac{1}{2n^2}\right) = \frac{-13.6eV}{n^2},$$
(3.2)

nella quale il numero quantico n assume solo valori interi positivi, mentre α è la costante di struttura fine data da

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}.\tag{3.3}$$

Come noto le funzioni d'onda corrispondenti sono fattorizzabili come prodotto di una parte radiale per una armonica sferica

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta,\phi), \qquad (3.4)$$

e sono indicizzate con tre numeri n, l ed m, legati agli autovalori degli operatori

$$\hat{E}, \hat{L}^2, \hat{M}_z, \tag{3.5}$$

le cui osservabili associate formano un insime completo per tale sistema.

Se il potenziale nell'hamiltoniano è dato solo dal termine 3.1 l'energia dipende esclusivamente dal numero quantico principale n. Tenendo conto che per ogni n, l assume solo valori interi da 0 a n - 1 e che per l fissato

esiston
o2l+1valori dim, variabile tr
a-le+l, possiamo calcolare quale è il numero di autofunzioni,
e quindi quale è il numero di stati, a cui corrisponde lo stesso valore dell'energia. Tale risultato lo otteniamo sommando su
i2l+1stati ottenuti variando l da 0
an-1ottenendo

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$
(3.6)

Il numero ottenuto, n^2 , rappresenta la degenerazione dell'n-esimo livello energetico.

3.1.2 Struttura fine

La struttura fine delle linee spettrali rivelano come sia incompleto il modello fisico precedentemente esposto per l'atomo di idrogeno. Correzioni all' hamiltoniano

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r},\tag{3.7}$$

che da ora in avanti sarà considerato l'hamiltoniano imperturbato per la trattazione perturbativa, si rendono necessarie per trovare un migliore accordo tra teoria e risultati sperimentali.

Ad una analisi più profonda possiamo renderci conto come la trattazione precedente sia stata sviluppata con la forma classica dell'energia cinetica. Dai risultati della teoria della relatività ristretta sappiamo come la forma da noi usata

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m},\tag{3.8}$$

rappresenti in realtà il limite per basse velocità della formula relativisticamente corretta :

$$\hat{T} = \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 = mc^2 \left(\sqrt{1 + (\frac{\hat{p}}{mv})^2} - 1 \right) = mc^2 \left(1 + \frac{1}{2} (\frac{\hat{p}}{mv})^2 - \frac{1}{8} (\frac{\hat{p}}{mv})^4 + \dots \right) - mc^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \dots$$
(3.9)

La correzione relativistica d'ordine minore è data aggiungendo all'hamiltoniano 3.7 il termine

$$\Delta \hat{H}_{rel} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}.$$
 (3.10)

La deviazione ΔE_{rel} dal valore dell'energia imperturbata (cioè associata all'hamiltoniano \hat{H}_0) che questa interazione induce sul j_{esimo} stato (dove j rappresenta una terna dei numeri quantici n, l ed m) è calcolata con la formula

$$\Delta E_j = \int \psi_j^* \left(\Delta \hat{H}_{rel} \right) \psi_j d^3 x. \tag{3.11}$$

Diventa quindi necessario calcolare il valore d'aspettazione della grandezza \hat{p}^2 nello stato ψ_j . Questo calcolo può essere ricondotto in funzione di valori d'aspettazione noti se consideriamo la seguente uguaglianza

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{H}_0 - \hat{V}, \qquad (3.12)$$

da cui discende che

$$\Delta E_{rel} = -\frac{1}{2mc^2} \left(E_n^2 - 2E_n \langle \hat{V} \rangle + \langle \hat{V}^2 \rangle \right). \tag{3.13}$$

Dal momento che il potenziale ha la forma 3.1 abbiamo così ricondotto il calcolo del valore medio della perturbazione relativistica a quello del valore medio delle grandezze $\frac{1}{r}$ e $\frac{1}{r^2}$ il cui valore è

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{n^3 a^2 (l + \frac{1}{2})} \tag{3.14}$$

dove a è il raggio di Bohr.

Otteniamo così la prima correzione all'energia imperturbata data dalla formula

$$\Delta E_{rel} = -\alpha^4 m c^2 \frac{1}{4n^2} \left[\frac{2n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{2} \right], \qquad (3.15)$$

dipendente dai numeri quantici $n \in l$, e proporzionale a α^4 , cioè più piccola di circa un fattore 10^{-4} rispetto alle intensità dei livelli imperturbati.

Procediamo nel definire le ulteriori correzioni per l'hamiltoniano imperturbato considerando i contributi causati dal fatto che l'elettrone è una particella dotata di spin.

Nel formalismo della meccanica quantistica lo stato di una particella dotata di spin è descritto non solo attraverso i valori assunti dalle osservabili orbitali, che in maniera del tutto generale sono funzioni delle coordinate e degli impulsi, ma anche dal valore che la proiezione del suo momento angolare intrinseco o spin \hat{S} ha su un asse scelto arbitrariamente. Matematicamente questo si traduce nella particolare struttura dello spazio degli stati (o meglio dei ket) per tale particella dato dal prodotto tensoriale tra la parte orbitale e lo spazio generato dagli autostati dell'operatore si spin. Lo spin dell'elettrone può essere valutato sperimentalmente e risulta che, scelto un asse, questo assume solo due valori distinti $\pm \frac{\hbar}{2}$ ai quali corrispondono due distinti autostati $|\pm\rangle$ dell'operatore di spin. Al momento angolare intrinseco è associato un momento di dipolo $\vec{\mu}$ al quale corrisponde l' operatore dato da:

$$\hat{\mu} = -\frac{e}{mc}\hat{S},\tag{3.16}$$

che comporta la presenza di ulteriori termini nell'hamiltoniano imperturbato causati dall'interazione tra campo magnetico e momento di dipolo

$$\hat{W} = -\hat{\mu} \cdot \hat{B}. \tag{3.17}$$

L'origine del campo magnetico che ci accingiamo a considerare, e che produce l'interazione del tipo 3.17, trova completa spiegazione nella teoria della relatività ristretta. Tale origine può essere intesa calandoci momentaneamente nel sistema di riferimento non inerziale nel quale l'elettrone è a riposo. Dal punto di vista dell'elettrone abbiamo che è il protone ad orbitargli intorno e, in quanto particella carica, a generare un campo magnetico di modulo

$$B = \frac{ev}{cr^3},\tag{3.18}$$

che in termini del momento angolare dell'elettrone diventa:

$$\vec{B} = \frac{e}{mcr^3}\vec{L}.$$
(3.19)

Mettere questo campo magnetico nella formula 3.17 per ottenere poi il corrispondente operatore sarebbe il metodo esatto qualora questo fosse stato calcolato in un sistema di riferimento inerziale. In meccanica classica è possibile descrivere i fenomeni in sistemi non inerziali tramite correzioni alle leggi del moto, quali ad esempio aggiungendo la forza di Coriolis o la forza centrifuga. Nel nostro caso è possibile ottenere il campo magnetico di cui risente l'elettrone semplicemente dividendo per due il risultato ottenuto.

Abbiamo così l'ulteriore correzione all'hamiltoniano imperturbato

$$\Delta \hat{H}_{SO} = \frac{e^2}{2m^2 c^2 r^3} \left(\hat{L} \cdot \hat{S} \right), \qquad (3.20)$$

che a causa dell'origine fisica viene indicata come interazione spin-orbita.

A causa dell'interazione proporzionale al prodotto $\hat{L}\cdot\hat{S}$ il momento angolare orbitale e quello intrinseco smettono di essere costanti del moto mentre si conserva il momento angolare totale $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$. Diventa quindi necessario passare da autofunzioni simultanee degli operatori 3.5 ad autofunzioni di un nuovo gruppo di operatori che includano anche l'operatore associato al momento angolare totale e allo spin della particella. Scegliendo gli autostati simultanei dell'insieme di operatori

$$\hat{E}, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z,$$
 (3.21)

e sfruttando la relazione

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2}{2}, \qquad (3.22)$$

rendiamo naturale il calcolo del valore di aspettazione di questa quantità in uno autostato degli operatori 3.21. L'operatore $\hat{L} \cdot \hat{S}$ è infatti diagonale in tale rappresentazione e sarà sufficiente sostituire agli operatori i corrispondenti autovalori. Indicando con j, l ed s i numeri quantici rispettivamente del momento angolare totale, di quello orbitale e di spin abbiamo:

$$\langle \hat{L} \cdot \hat{S} \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 \left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right].$$
 (3.23)

Per avere la forma completa della correzione che l'interzione spin-orbita comporta sarà sufficiente aggiungere il valore d'aspettazione dell'operatore $\frac{1}{r}$ che vale:

$$\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)n^3 a^3}.$$
 (3.24)

Combinando i risultati 3.23 e 3.24 e tenendo conto che per l'elettrone si ha sempre $s = \frac{1}{2}$, otteniamo la correzione indotta dall'interazione spin-orbita

$$\Delta E_{SO} = \alpha^4 mc^2 \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{4n^3 l(l+1)(l+\frac{1}{2})} \right].$$
 (3.25)

L'ordine di grandezza di tale correzione è il medesimo di quella indotta dalle correzioni relativistiche del'energia cinetica, essendo ambedue proporzionali alla quarta potenza della costante di struttura fine. I due effetti possono peraltro essere accomunati in una unica correzione ΔE_{sf} descrivente la *struttura fine* dei livelli energetici dell'idrogeno. Usando il fatto che *j* può assumere, addizionando i momenti angolare orbitale e di spin tra loro, solo i valori $l + \frac{1}{2}$ oppure $l - \frac{1}{2}$ otteniamo

$$\Delta E_f = -\alpha^4 m c^2 \frac{1}{4n^2} \left[\frac{2n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{2} \right], \qquad (3.26)$$

incidentalmente identica alla 3.15 con la sostituzione di l con j. Vediamo quindi come la presenza degli effetti perturbativi studiati, di ordine α^4 , comporti un abbassamento dei livelli energetici studiati (essendo tale correzione

negativa) e sollevi parzialmente la degenerazione tra gli stati con uguale numero quantico n e differente valore del momento angolare totale j. Quest'ultima osservazione è giustificata dal fatto che, assumendo il numero l valori interi da 0 a n-1, j assume tutti i valori seminteri che vanno da $\frac{1}{2}$ a $n-\frac{1}{2}$ creando così, per ogni valore dell'energia imperturbata E_n , n sottolivelli distinti.

3.1.3 Correzioni radiative: effetto Lamb

Come già discusso, il tentativo di fornire una spiegazione completa riguardo lo spettro dell'atomo di idrogeno, se effettuata esclusivamente con i metodi quì parzialmente esposti e prescindendo dalla teoria dell'elettrodinamica quantistica, è destinato a fallire. Ci troviamo infatti, assumendo come corretta la formula 3.26, in contrasto con i risultati sperimentali effettuati da Lamb e Rutherford nel 1947 e che dimostrarono come in realtà i due stati $2S_{\frac{1}{2}}~(n$ = 2,
 l = 1,
 j = $\frac{1}{2})$ e $2P_{\frac{1}{2}}~(n$ = 2,
 l = 1,
 j = $\frac{1}{2})$ non condividano la stessa energia. Esula dagli scopi prefissi da questo lavoro, nonchè dalle personali conoscenze di chi lo scrive, la giustificazione rigorosa delle correzioni da apportare utilizzando i metodi della teoria quantistica dei campi. Presenteremo quindi, esclusivamente per completezza, le correzioni radiative da apportare al nostro modello semiclassico, correzioni dedotte nell'ambito della teoria dell'elettrodinamica quantistica da Feynman, Bethe, Schwinger e Tomonaga, e che qualitativamente sono imputabili a tre differenti e peculiari effetti quantistici. Il primo di questi riguarda la formazione spontanea di coppie *elettrone-positrone* in prossimità del nucleo che schermando parzialmente gli elettroni dell'atomo dal campo nucleare ne variano l'energia complessiva. Il secondo riguarda la modifica dell'energia dell'elettrone a causa del suo moto nelle *fluttuazioni di vuoto* del campo elettromagnetico quantizzato. Il terzo effetto invece porta ad una modifica del momento magnetico di dipolo dell'elettrone di un fattore $(1 + (\alpha/2\pi)) = 1.00116$.

Le correzioni risultano in due differenti contributi dipendentemente dal valore del numero quantico l, per l = 0 si ha che la deviazione è:

$$\Delta E_{Lamb} = \alpha^5 m c^2 \frac{1}{4n^3} \left\{ k \left(n, 0 \right) \right\}, \qquad (3.27)$$

dove $\{k(n,0)\}$ è un fattore numerico che al variare di n da 0 a infinito copre i valori da 12.7 a 13.2; mentre per $l \neq 0$ abbiamo

$$\Delta E_{Lamb} = \alpha^5 mc^2 \frac{1}{4n^3} \left\{ k\left(n,l\right) \pm \frac{1}{\pi \left(j + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right)} \right\},$$
 (3.28)

dove $\{k(n, l)\}$ ha questa volta un valore minore di 0.05 ed è lentamente variabile con n ed l. Tale correzioni indicano come, a causa della loro dipendenza dal numero quantico l, sia sollevata la degenerazione per gli stati indicati con le medesime coppie di numeri n ed l.

3.1.4 Struttura iperfine

La struttura fine dello spettro dell'atomo d'idrogeno è dovuta, come abbiamo visto, a interazioni che hanno come causa principale la presenza di un momento di dipolo $\vec{\mu}$ associato allo spin dell'elettrone. Come è noto però anche al protone è associato un momento angolare intrinseco di medesima grandezza $(\frac{\hbar}{2})$ al quale però non corrisponde un momento di dipolo d'intensità comparabile con quello dell'elettrone. Osservando la relazione che lega le due quantità nel caso in cui la particella sia il protone abbiamo infatti :

$$\vec{\mu}_p = \gamma_p \frac{e}{m_p c} \vec{S}_p, \qquad (3.29)$$

nella quale compaiono il momento giromagnetico γ_p , del quale il valore sperimentale è circa 2.7928, e la massa del protone m_p , al denominatore e di circa 1836 volte maggiore della corrispettiva massa dell'elettrone. Sarà principalmente a causa di questa differenza tra ordini di grandezza dei dipoli associati che le interazioni che coinvolgono $\vec{\mu}_p$ possono essere considerate piccole rispetto alle interazioni generatrici della struttura fine.

Esattamente come nell'interazione spin-orbita per elettrone anche nel caso del protone abbiamo un dipolo $\vec{\mu}_p$ soggetto ad un campo magnetico generato dal moto di una carica orbitante intorno ad esso. A differenza del caso elettronico però nessuna correzione deve essere apportata essendo il sistema di riferimento in cui il protone è a riposo sicuramente inerziale. Ripetendo allora i medesimi ragionamenti fatti nel paragrafo precedente otteniamo che l'operatore per l'interazione spin-orbita nel caso protonico è dato da:

$$\Delta \hat{H}_{sop} = \frac{\gamma_p e^2}{m m_p c^2 r^3} \left(\hat{L} \cdot \hat{S}_p \right). \tag{3.30}$$

Allo stesso tempo il dipolo magnetico del protone interagisce con il corrispettico momento magnetico dell'elettrone dando origine ad una ulteriore sorgente di interazione.

Partiamo dai risultati della meccanica classica per cercare la forma dell' l'operatore in quest'ultimo tipo di interazione.

Se scegliamo di approssimare il campo del protone con quello generato da una spira di corrente di raggio ρ_0 abbiamo nei punti in cui $r > \rho_0$

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{1}{r^3} \left[3 \frac{(\vec{\mu} \cdot \vec{r}) \cdot \vec{r}}{r^2} - \vec{\mu} \right].$$
(3.31)

Nella descrizione classica del moto di una particella carica immersa in tale campo magnetico sappiamo come questa sia influenzata esclusivamente dal valore del campo nei punti attraversati lungo il moto. Potremmo perciò ignorare completamente la forma del campo magnetico nelle zone interne alle spira o, tenendo conto del nostro modello di atomo, nelle zone interne ad una sfera di raggio ρ_0 . In realtà avremo che, pur facendo tendere le dimensioni della spira fino a zero, le funzioni d'onda dell'elettrone che hanno valore non nullo all'origine delle coordinate risentiranno di un effetto non locale aggiuntivo, che potrà essere inglobato modificando il campo con un termine addizionale proporzionale a $\delta(\vec{r})$:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{1}{r^3} \left[3 \frac{(\vec{\mu} \cdot \vec{r}) \cdot \vec{r}}{r^2} - \vec{\mu} \right] + \frac{8\pi}{3} \vec{\mu} \delta(\vec{r}).$$
(3.32)

Le due formule per il campo generato dal protone sono equivalenti finchè siamo in zone lontane dall'origine ma, come vedremo successivamente, sarà proprio la presenza del termine aggiuntivo $\frac{8\pi}{3}\vec{\mu}\delta(\vec{r})$ che darà un contributo fondamentale nell'interazione generatrice della struttura iperfine.

E' ora possibile comprendere come la presenza del dipolo protonico $\hat{\mu}_p$ generi un campo magnetico della forma 3.32 la cui interazione con il corrispettivo elettronico comporti una interazione rappresentata dall'operatore:

$$\Delta \hat{H}_{ss} = -\hat{\mu}_e \cdot \hat{B} = \frac{\gamma_p e^2}{m m_p c^2} \left\{ \frac{1}{r^3} [3(\hat{S}_p \cdot \hat{r})(\hat{S}_e \cdot \hat{r}) - (\hat{S}_p \cdot \hat{S}_e)] + \frac{8\pi}{3} (\hat{S}_p \cdot \hat{S}_e) \delta(\vec{r}) \right\}.$$
(3.33)

Dove $\hat{S}_p \in \hat{S}_e$ sono lo spin del protone e dell'elettrone.

Insieme l'accoppiamento spin-orbita per il protone 3.30 e l'accoppiamento spin-spin in 3.33 sono responsabili della struttura iperfine dello spettro dell'idrogeno. Il calcolo delle deviazioni che questi termini producono dai valori dell'energia imperturbata è più complicato rispetto a quello dei corrispettivi termini della struttura fine e soprattutto consente un differente trattamento qualora ci interessiamo o meno degli stati il cui momento angolare orbitale l sia nullo.

In quest'ultimo caso il calcolo dello spostamento dei livelli energetici indotto dall'interazioni spin-orbita e spin-spin è più agevole a causa del fatto che alcuni termini di annulleranno immediatamente non dando alcun contributo.

Per gli stati con momento angolare nullo è infatti naturalmente assente il termine dovuto all'accoppiamento spin-orbita, mentre a causa della simmetria sferica delle corrispondenti funzioni d'onda (l'armonica sferica per questo stato è una costante) il valore di aspettazione del primo termine dell'equazione 3.33 è nullo. Rimane come unica origine, per la struttura iperfine, della deviazione ΔE tra i livelli caratterizzati dall'avere momento angolare orbitale nullo il termine della 3.33 proporzionale alla delta di Dirac e nato dalle correzioni di forma dell'equazione 3.31. Siamo arrivati quindi alla conclusione che la struttura iperfine dei livelli per cui si abbia l = 0 è fornita dal potenziale di interazione

$$\Delta \hat{H}_{hf} = \frac{8\pi\gamma_p e^2}{3mm_p c^2} \left[(\hat{S}_p \cdot \hat{S}_e) \delta(\vec{r}) \right], \qquad (3.34)$$

indicato come termine di contatto di Fermi.

Il calcolo del contributo dato dalla delta di Dirac al valore di aspettazione in uno stato di questo tipo è facilmente calcolabile se si considerano le proprietà che definiscono tale funzione. Utilizzando le autofunzioni $\psi_{nlm}(\vec{r})$ di \hat{H}_0 definito in 3.7 e che ora danno solo una descrizione parziale dello stato dell'atomo d'idrogeno abbiamo, fissando i numeri quantici l = 0 e m = 0, che il valore di aspettazione per la delta di Dirac è dato da:

$$\langle \delta(\vec{r}) \rangle = \int \psi_{n00}^*(\vec{r}) \delta(\vec{r}) \psi_{n00}(\vec{r}) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi = |\psi_{n00}(0)|^2, \qquad (3.35)$$

il cui valore, calcolato partendo dalla forma dei polinomi di Laguerre, risulta essere

$$\left|\psi_{n00}(0)\right|^2 = \frac{1}{\pi n^3 a^3}.$$
(3.36)

Rimane ora da determinare, per conoscere le deviazioni causate da 3.34 il valore di aspettazione dell'operatore $(\hat{S}_p \cdot \hat{S}_e)$ agente sulla parte non orbitale dello spazio degli stati delle due particelle coinvolte nell'interazione.

Per procedere nel calcolo definiamo prima il momento angolare totale

$$\hat{F} = \hat{L} + \hat{S}_e + \hat{S}_p = \hat{J} + \hat{S}_p,$$
(3.37)

spinti dal fatto che, per le medesime ragioni che ci hanno portato allo sviluppo dell'accoppiamento $\hat{L} \cdot \hat{S}$, sia solo questo ora a rappresentare una quantità conservativa e quindi commutante con l'hamiltoniano totale.

Per gli autostati delle grandezze

$$\hat{E}, \hat{L}^2, \hat{S}_e^2, \hat{S}_p^2, \hat{F}^2, \hat{F}_z,$$
 (3.38)

l'operatore $(\hat{S}_p \cdot \hat{S}_e)$ ha un valore definito come si evince dalla formula

$$\hat{F}^2 = \hat{S}_e^2 + \hat{S}_p^2 + 2(\hat{S}_p \cdot \hat{S}_e), \qquad (3.39)$$

nella quale si è tenuto conto che gli stati in esame sono quelli con $\hat{L} = 0$.

E' quindi possibile procedere agevomente nel calcolo del valore definito che l'operatore $\hat{S}_p \cdot \hat{S}_e$ ha negli autostati simultanei degli operatori 3.38 ottenendo:

$$\langle \hat{S}_{p} \cdot \hat{S}_{e} \rangle = \frac{\hbar^{2}}{2} \left[f(f+1) - s_{p}(s_{p}+1) - s_{e}(s_{e}+1) \right] = \frac{\hbar^{2}}{2} \left[f(f+1) - \frac{3}{2} \right],$$
(3.40)

che fornisce insieme hai risultati precedentemente calcolati il valore di aspettazione del termine di contatto di Fermi negli stati con momento angolare orbitale nullo:

$$\Delta E_{hf} = \left(\frac{m}{m_p}\right) \alpha^4 m c^2 \frac{4\gamma_p}{3n^3} \left[f(f+1) - \frac{3}{2}\right].$$
(3.41)

Comparata con i termini della struttura fine vediamo come siano entrambe proporzionali alla quarta potenza della costante di struttura fine

$$\alpha = \frac{1}{137},\tag{3.42}$$

e che quindi la differente grandezza tra i due contributi perturbativi sia dovuta fondamentalmente al rapporto tra le masse dell'elettrone e del protone

$$\left(\frac{m}{m_p}\right) = \frac{1}{1836}.\tag{3.43}$$

Per i livelli caratterizzati dall'avere momento angolare orbitale nullo abbiamo che l'addizione tra spin elettronico e protonico rappresenta il momento angolare totale. Come noto il numero quantico f potrà assumere allora solo due valori: f = 0 nell'unico stato corrispondente al caso in cui i due spin siano antiparalleli (stato di singoletto), ed f = 1 nei tre stati caratterizzati dall'avere i due spin paralleli.

Transizioni tra questi due stati riguarderanno emissioni o assorbimento di fotoni la cui energia è data dalla differenza $\Delta \epsilon = E_{f=1} - E_{f=0}$ che può essere calcolata dalla formula 3.41.

Il calcolo del gap energetico tra i livelli di singoletto e tripletto nel caso del livello fondamentale 1S dell'idrogeno porta, sostituendo i rispettivi valori di $n \in f$ in 3.41 a:

$$\Delta \epsilon = E_{f=1} - E_{f=0} = \frac{8}{3} \left(\frac{m}{m_p}\right) \alpha^4 m c^2 \gamma_p. \tag{3.44}$$

Dal calcolo del gap energetico possiamo conseguentemente calcolare la lunghezza d'onda della radiazione che viene emessa qualora lo stato di tripletto ad energia maggiore decada nello stato si singoletto per i livelli 1S dell'atomo di idrogeno. Il calcolo di tale lunghezza d'onda avviene sfruttando la relazione tra le grandezze ondulatorie e quelle corpuscolari del fotone

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{\Delta\epsilon} = 21.1cm, \qquad (3.45)$$

corrispondente ad una radiazione nel campo delle microonde. Diviene così possibile spiegare l'origine della *21-centimeter line* fondamentale nelle osservazioni radioastronomiche.

Consideriamo adesso gli effetti riguardanti la struttura iperfine nel caso di stati con momento angolare orbitale non nullo. Dalla forma che le funzioni d'onda assumono in prossimità dell'origine delle coordinate possiamo giustificare il differente trattamento riservato ai due casi. Se infatti negli stati con l = 0 abbiamo che il termine di contatto è l'unica sorgente di struttura iperfine, a causa del fatto che le funzioni d'onda vanno come r^l in prossimità dell'origine abbiamo che il contributo di questo termine è nullo per i casi in cui $l \neq 0$.

Fisicamente questo è dovuto al fatto che per valori del momento angolare orbitale non nullo la forza centrifuga allontana l'elettrone dal centro del nucleo atomico. I contributi alla struttura iperfine deriveranno allora, per tali stati, dall'accoppiamento $\hat{L} \cdot \hat{S}_p$ e dall'interazione spin-spin privato del termine di contatto di Fermi:

$$\langle \hat{H}_{hf} \rangle = \frac{\gamma_p e^2}{m m_p c^2} \langle \frac{1}{r^3} [3(\hat{S}_p \cdot \hat{r}) (\hat{S}_e \cdot \hat{r}) - (\hat{S}_p \cdot \hat{S}_e)] \rangle.$$
(3.46)

Per la valutazione di tale valore di aspettazione ci appoggiamo ai calcoli effettuati da *Bethe* e *Salpeter* che danno la formula:

$$\langle \Delta \hat{H}_{hf} \rangle = \left(\frac{m}{m_p}\right) \alpha^4 m c^2 \frac{\gamma_p}{2n^3} \frac{[f(f+1) - j(j+1) - \frac{3}{4}]}{j(j+1)(l+\frac{1}{2})}$$
(3.47)

che, come si può osservare ponendo l = 0, rappresenta una generalizzazione della formula 3.41.

3.2 Calcolo della vita media con il formalismo della seconda quantizzazione

Cercheremo adesso di utilizzare il formalismo della seconda quantizzazione del campo elettromagnetico libero per calcolare la vita media di quel particolare livello, dell'atomo di idrogeno, il cui decadimento è origine della riga a 21 centimetri nelle analisi spettroscopiche. Come osservato nell'introduzione a questo capitolo i risultati precedentemente ottenuti nel calcolo dei livelli energetici interverranno adesso come quantità da aggiugere *a posteriori* nello studio perturbativo delle interazioni tra campo quantizzato e atomo di idrogeno.

3.2.1 L'hamiltoniano per l'interazione tra lo spin dell'elettrone e il campo elettromagnetico

Per cominciare consideriamo il trattamento dell'interazione esistente tra un dipolo e il campo magnetico:

$$\hat{H}_q = -\hat{\mu} \cdot \hat{B},\tag{3.48}$$

nella quale, a differenza della descrizione quasiclassica della radiazione, il campo magnetico interviene come grandezza quantizzata derivante dall'operatore *potenziale vettore*

$$\hat{A} = \sum_{k,\sigma} N_k \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \left[\hat{a}_{k,\sigma}(t) e^{i\hat{k}\hat{r}} + \hat{a}^+_{k,\sigma}(t) e^{-i\hat{k}\hat{r}} \right], \qquad (3.49)$$

definito non più solo sulla parte orbitale dello spazio degli stati, ma anche, a causa della presenza degli operatori di creazione e distruzione, sullo spazio di Fock del campo di radiazione.

Il legame tra il campo magnetico in 3.48 e il potenziale vettore è espresso tramite la relazione operatoriale analoga alla formula classica

$$\hat{B} = \nabla \wedge \hat{A}.\tag{3.50}$$

Per effettuare il calcolo possiamo sfruttare la relazione che lega, in rappresentazione delle coordinate, l'operatore *nabla* con l'impulso dell'elettrone e il numero d'onda $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ delle autofunzioni di quest'ultimo.

Sappiamo infatti che l'operatore impulso agisce sulle generali funzioni d'onda come l'operatore ∇ a meno di una costante complessa, e sulle proprie autofunzioni moltiplicandole per il proprio autovalore.

Essendo le funzioni d'onda con impulso definito onde piane, con numero d'onda $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, possiamo collegare l'operatore impulso all'operatore \hat{k} corrispondente all'osservabile \vec{k} . Osserviamo infatti che

$$\hat{p}e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} = -i\hbar\nabla e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} = \vec{p}e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}, \qquad (3.51)$$

da cui discende che possiamo definire l'operatore k con

$$\hat{k}e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} = \frac{\hat{p}}{\hbar}e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} = -i\nabla e^{i\vec{k}\vec{r}} = \vec{k}e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}.$$
(3.52)

Possiamo adesso modificare l'espressione in 3.50 utilizzando l' operatore numero d'onda:

$$\hat{B} = \nabla \wedge \hat{A} = i\hat{k} \wedge \hat{A}, \qquad (3.53)$$

da cui discende

$$\hat{H}_q = -\frac{ie}{mc} \left(\hat{k} \wedge \hat{A} \right) \cdot \hat{S}, \qquad (3.54)$$

nella quale abbiamo utilizzato la relazione tra l'operatore del momento magnetico e di spin.

Inserendo la forma del potenziale vettore 3.49 nella 3.54 abbiamo che, essendo quest'ultima espressione una sovrapposizione di onde piane, l'azione dell'operatore \hat{k} provocherà la moltiplicazione per il corrispettivo autovalore \vec{k} dando così la forma definitiva per l'interazione di un dipolo magnetico col campo quantizzato:

$$\hat{H}_q = -\frac{ie}{mc} \sum_{k,\sigma} N_k \hat{S} \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right) \left[\hat{a}_{k,\sigma}(t) e^{i\hat{k}\hat{r}} + \hat{a}_{k,\sigma}^+(t) e^{-i\hat{k}\hat{r}}\right].$$
(3.55)

3.2.2 Calcolo della vita media per gli stati origine della 21 centimeter line

Abbiamo precedentemente dimostrato come per l'insieme dei livelli dell'atomo di idrogeno caratterizzati dai numeri quantici n = 1 e l = 0 sia solo il termine di contatto di Fermi la sorgente della struttura iperfine dello spettro. Dimostreremo ora come questo sia anche l'unica sorgente di separazione tra i livelli 1s dell'atomo. L'insieme degli stati appartenenti a tale livello possono essere discriminati a seconda delle coppie di valori che assumono gli autovalori di \hat{m}_e ed \hat{m}_p , cioè le componenti su un asse arbitrario dello spin dell'elettrone e del protone. Quindi possiamo descrivere il sottospazio 1s degli stati dell'atomo attraverso i vettori :

$$\left\{ |n=1; l=0; m=0; m_e = \pm \frac{1}{2}; m_p = \pm \frac{1}{2} > \right\},$$
(3.56)

indicizzati con i numeri quantici relativi agli operatori:

$$\left\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{M}_z, \hat{m}_e, \hat{m}_p\right\}.$$
 (3.57)

Essendo la componente dello spin suscettibile di sole due orientazioni abbiamo che il sottospazio ha dimensione quattro, tante quante sono le coppie dei valori di m_e ed m_p . Per quanto riguarda il termine legato alla correzione relativistica dell'impulso

$$\Delta \hat{H}_{rel} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2},$$
(3.58)

essendo funzione esclusivamente delle variabili orbitali non agisce sui termini $|m_e = \pm \frac{1}{2}; m_p = \pm \frac{1}{2} >$ che definiscono univocamente il sottospazio 1s . L'azione risulterà quindi esclusivamente in un cambiamento globale dell'energia del sottospazio senza dare origine ad alcuna struttura fine.

Il termine successivo è dovuto all'accoppiamento tra lo spin dell'elettrone e il proprio momento angolare orbitale ed è dato da:

$$\Delta \hat{H}_{SO} = \frac{e^2}{2m^2 c^2 r^3} \left(\hat{L} \cdot \hat{S}_e \right), \qquad (3.59)$$

che nel nostro sottospazio ha valore di aspettazione nullo dal momento che il calcolo comprenderebbe termini della forma

$$< l = 0; m = 0 | \hat{L}_{x,y,z} | l = 0; m = 0 >$$
 (3.60)

ovviamente nulli.

Possiamo quindi interessarci esclusivamente al termine di contatto e considerare le uniche transizioni possibili per lo stato fondamentale 1s date dal passaggio tra uno dei livelli del tripletto, triplamente degeneri con energia maggiore, e l'unico stato del singoletto.

I ket della forma 3.56 sono, come abbiamo mostrato, autostati simultanei degli operatori di spin \hat{m}_e ed \hat{m}_p mentre gli stati di singoletto e tripletto lo sono per gli operatori legati allo spin totale e dati dalle seguenti relazioni:

$$\hat{S}^2 = \left(\hat{S}_e + \hat{S}_p\right)^2 \tag{3.61}$$

е

$$\hat{m}_t = \hat{m}_e + \hat{m}_p. \tag{3.62}$$

Le due possibili rappresentazioni sono equivalenti e il cambiamento tra le due basi è identificato dai coefficienti di *Clebsch-Gordan* $\langle S; m_t | m_e; m_p \rangle$ che nel nostro spazio quadridimensionale definiscono il seguente passaggio:

$$|S; m_t \rangle = |1; 1 \rangle = |\frac{1}{2}; \frac{1}{2} \rangle = |m_e; m_p \rangle$$

$$|1; 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \rangle + |-\frac{1}{2}; \frac{1}{2} \rangle \right)$$

$$|1; -1 \rangle = |-\frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \rangle$$
(3.63)

per il tripletto degenere. Mentre per lo stato di singoletto abbiamo :

$$|0;0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle \right).$$
(3.64)

La transizione che definisce la vita media dello stato eccitato del tripletto è un decadimento nello stato di singoletto con emissione di un singolo fotone di lunghezza d'onda, come abbiamo visto, nello spettro delle microonde ($\lambda = 21.1cm$).

Sfruttando la libertà che la degenerazione del tripletto ci fornisce scegliamo come stato iniziale per l'atomo quello definito dal ket :

$$|i\rangle_{atomo} = |n; l\rangle |S; m_t\rangle = |1s\rangle |1, 1\rangle, \qquad (3.65)$$

e come stato finale :

$$|f\rangle_{atomo} = |n; l\rangle |S; m_t\rangle = |1s\rangle |0, 0\rangle =$$
$$= |1s\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\rangle \right), \qquad (3.66)$$

dove abbiamo sfruttato entrambe le basi per definire lo stato.

Insieme a questi il formalismo della seconda quantizzazione del campo elettromagnetico ci permette di associare lo stato della radiazione attraverso i numeri che indicano quanti sono i fotoni con data energia e polarizzazione. Essendo le transizioni ad un solo fotone, studiamo i casi in cui gli stati della radiazione vedono, dopo il decadimento dello stato, comparire un fotone con energia fissata e polarizzazione arbitraria. In questo modo considerando tutti gli stati finali della radiazione caratterizzati da una differente polarizzazione del fotone emesso, e sommando su tali stati la formula che fornisce la probabilità della transizione, otterremo una misura della durata media dello stato eccitato.

Gli stati globali dei quali calcoleremo la probabilità di transizione indotta dalla perturbazione saranno quindi quelli definiti dal prodotto tensoriale tra lo spazio degli stati dell'atomo e quello della radiazione. Nella base degli autostati di \hat{m}_e ed \hat{m}_p abbiamo:

$$|i\rangle = |1s\rangle |\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\rangle |vuoto\rangle,$$
 (3.67)

mentre come stato finale :

$$|f\rangle = |1s\rangle |\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\rangle \right) |...1_{k,\sigma}...\rangle .$$
(3.68)

Il calcolo della vita media τ dello stato eccitato sarà effettuato perturbativamente, e come precedentemente affermato avremo la seguente relazione:

$$\tau^{-1} = \sum_{statifinali} \frac{2\pi}{\hbar} \left| < f |\hat{H}_q| i > \right|^2 \delta(\Delta E - \hbar \omega).$$
(3.69)

L'accoppiamento tra il dipolo dell'elettrone e il relativo campo magnetico generato dal corrispondente protonico interviene in questo calcolo attraverso l'interazione ricavata precedentemente :

$$\hat{H}_q = -\frac{ie}{mc} \sum_{k,\sigma} N_k \hat{S}_e \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right) \left[\hat{a}_{k,\sigma}(t)e^{i\hat{k}\hat{r}} + \hat{a}^+_{k,\sigma}(t)e^{-i\hat{k}\hat{r}}\right], \qquad (3.70)$$

nel quale compaiono l'operatore dello spin elettronico \hat{S}_e insieme agli operatori di creazione e distruzione agenti sugli stati della radiazione. Poichè siamo interessati solo alla creazione di un fotone il termine che include $\hat{a}_{k,\sigma}$ può essere ignorato.

Riscriviamo l'interazione tenendo conto ora solo dei termini effettivi e ricordando il valore dato alla costante di normalizzazione N_k :

$$\hat{H}_q = -\frac{ie}{mc} \sum_{k,\sigma} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3\omega_k}} \hat{S}_e \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right) \left[\hat{a}_{k,\sigma}^+(t)e^{-i\hat{k}\hat{r}}\right].$$
(3.71)

Prima di inserire tale formula in 3.69 indichiamo con ω_0 la frequenza del fotone legata alla transizione che stiamo studiando, sfruttando la relazione $\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x)$ otteniamo quindi:

$$\tau^{-1} = \sum_{statifinali} \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}\right) \times \\ \times \sum_{k,\sigma} \frac{1}{\omega_k} \left| < f | \hat{S}_e \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right) \left[\hat{a}_{k,\sigma}^+(t) e^{-i\hat{k}\hat{r}} \right] |i\rangle \right|^2 \frac{1}{\hbar} \delta(\omega_0 - \omega_k).$$
(3.72)

La prima sommatoria può essere soppressa purchè si consideri la seconda anche agente non solo sugli indici per le diverse polarizzazioni delle onde progressive ma anche sulle polarizzazioni dei fotoni emessi negli stati finali

$$\tau^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}\right) \times \\ \times \sum_{k,\sigma} \frac{1}{\omega_k} \left| < f_{\sigma} | \hat{S}_e \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right) \left[\hat{a}_{k,\sigma}^+(t) e^{-i\hat{k}\hat{r}} \right] |i\rangle \right|^2 \frac{1}{\hbar} \delta(\omega_0 - \omega_k).$$
(3.73)

Applichiamo anche in questo caso l'approssimazione dipolare $e^{-i\hat{k}\hat{r}}\approx 1$ ed effettuiamo la sostituzione:

$$\sum_{k} \longrightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3k, \qquad (3.74)$$

passando così dalla descrizione in cui k è una variabile discreta a quello in cui prende un insieme continuo di valori.

In questo modo la formula 3.73 diventa:

$$\tau^{-1} = \frac{e^2}{2m^2\pi\hbar} \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{\omega_k} \left(\left| < f_{\sigma} | \hat{S}_e \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \right) \hat{a}_{k,\sigma}^+(t) | i > \right|^2 \delta(\omega_0 - \omega_k) \right)$$
(3.75)

e il calcolo si riduce alla determinazione dell'elemento di matrice :

$$M = <1s \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(<\frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right| - < -\frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right| \right) < \dots 1_{k,\sigma} \dots | \times \\ \times \left[\hat{S}_{e} \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma} \right) \hat{a}_{k,\sigma}^{+}(t) \right] | 1s > | \frac{1}{2}; \frac{1}{2} > | vuoto > .$$
(3.76)

L'unico operatore agente sulle variabili del campo è l'operatore di creazione di un fotone $\vec{k}\sigma$ (numero d'onda \vec{k} e polarizzazione σ), la cui azione fa si che i ket iniziale e finale della radiazione coincidano. Sfruttando questo risultato abbiamo che il calcolo dell'elemento 3.76 interesserà ora esclusivamente le variabili di spin.

L'operatore dello spin elettronico \hat{S}_e è, come noto, proporzionale alle matrici sigma di Pauli:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(3.77)

la cui azione sullo stato di spin $|\frac{1}{2}>$ dell'elettrone è data dalle relazioni seguenti:

$$\hat{\sigma}_x |\frac{1}{2} >= |-\frac{1}{2} >, \qquad \hat{\sigma}_y |\frac{1}{2} >= i|-\frac{1}{2} >, \qquad \hat{\sigma}_z |\frac{1}{2} >= |\frac{1}{2} >.$$
(3.78)

Possiamo vedere adesso come nel prodotto scalare in 3.76 :

$$\hat{S}_{e} \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right) = \frac{\hbar}{2} \left[\hat{\sigma}_{x} \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_{x} + \hat{\sigma}_{y} \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_{y} + \hat{\sigma}_{z} \cdot \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_{z} \right]$$
(3.79)

sopravvivano, a causa delle 3.77, solo i termini proporzionali alle matrici di Pauli non diagonali nella nostra base $\sigma_x \in \sigma_y$, portando l'elemento di matrice ad assumere la forma:

$$M = -\left(\frac{\hbar}{2}\right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_x + i \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_y \right].$$
(3.80)

La valutazione del prodotto scalare sarebbe più agevole se calcolata in un sistema di riferimento in cui il nuovo asse z, indicato con z' coincidesse con la direzione del vettore \vec{k} . Effettuiamo quindi una rotazione del sistema di riferimento come indicato in figura 3.1, passando a nuovi assi con il cambiamento di variabili:

$$\begin{cases} x = x' \cos \theta - z' \sin \theta \\ y = y' \\ z = x' \sin \theta + z' \cos \theta \end{cases}$$
(3.81)



Figura 3.1: Illustrazione della rotazione del sistema di coordinate.

In accordo con questa trasformazione cambieranno anche le componenti di qualsiasi vettore, perciò il termine in 3.75

$$\sum_{\sigma} |M|^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \sum_{\sigma} \frac{1}{2} \left[\left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_x^2 + \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_y^2 \right]$$
(3.82)

nel nuovo sistema di coordinate ruotato diventa:

$$\sum_{\sigma} |M|^2 =$$

$$\left(\frac{\hbar}{2}\right)^{2} \sum_{\sigma} \frac{1}{2} \left\{ \left[\left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_{x'} \cos \theta - \left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_{z'} \sin \theta \right]^{2} + \left[\left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_{y'} \right]^{2} \right\}.$$
(3.83)

Sfruttiamo adesso il fatto che i due versori di polarizzazione $\hat{\epsilon}_{k,1}$ e $\hat{\epsilon}_{k,2}$, con indice k fissato, e il vettore di propagazione \vec{k} , formano una sistema di assi ortogonali. Essendo θ l'angolo tra la direzione dello spin e il nuovo asse z' effettuiamo la rotazione del sistema in maniera tale che i nuovi versori $\hat{e}_{x'}$, $\hat{e}_{y'}$ e $\hat{e}_{z'}$ soddisfino:

$$\hat{e}_{x'} = \hat{\epsilon}_{k,1} \qquad \hat{e}_{y'} = \hat{\epsilon}_{k,2} \qquad k\hat{e}_{z'} = \vec{k},$$
(3.84)

e le componenti diventino:

$$\left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_{x'}^{2} = k^{2}$$

$$\left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_{z'} = 0$$

$$\left(\vec{k} \wedge \hat{\epsilon}_{k,\sigma}\right)_{y'}^{2} = k^{2}.$$

$$(3.85)$$

In questo modo la 3.83 si riduce nella forma più semplice:

$$\sum_{\sigma} |M|^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \frac{1}{2} k^2 \left(1 + \cos^2\theta\right)^2.$$
 (3.86)

Inseriamo ora quest'ultimo risultato nella formula per il calcolo della vita media 3.75. Otteniamo così un calcolo più agevole dato da:

$$\tau^{-1} = \frac{e^2\hbar}{8m^2\pi} \int \frac{d^3k}{\omega_k} \left(\frac{1}{2}k^2 \left(1 + \cos^2\theta \right) \delta(\omega_0 - \omega_k) \right).$$
(3.87)

A causa della presenza delle variabili angolari il calcolo dell'integrale nel secondo termine può essere reso più agevole se effettuato passando alle coordinate sferiche nello spazio dei vettori numero d'onda, effettuando la sostituzione

$$d^3k \longrightarrow k^2 \sin\theta dk d\theta d\phi, \qquad (3.88)$$

la 3.87 diventa:

$$\tau^{-1} = \frac{e^2\hbar}{8m^2\pi} \int \frac{1}{\omega_k} \left(\frac{1}{2} k^2 \left(1 + \cos^2\theta \right) \delta(\omega_0 - \omega_k) \right) k^2 \sin\theta dk d\theta d\phi.$$
(3.89)

Considerando la transizione in termini del numero d'onda e non della frequenza ω del fotone emesso, sviluppiamo la formula precedente considerando la relazione tra queste due grandezze $\omega = kc$:

$$\tau^{-1} = \frac{e^2\hbar}{8m^2\pi} \int \frac{1}{kc^2} \left(\frac{1}{2}k^2 \left(1 + \cos^2\theta \right) \delta(k_0 - k) \right) k^2 \sin\theta dk d\theta d\phi, \quad (3.90)$$

integrando rispetto a ϕ nell'intervallo $[0, 2\pi]$ abbiamo

$$\tau^{-1} = \frac{e^2\hbar}{8m^2c^2} \int_0^\infty k^3 \delta(k_0 - k) dr \int_0^\pi \left(1 + \cos^2\theta\right) \sin\theta d\theta, \qquad (3.91)$$

da cui, considerando che la primitiva della funzione $(1 + \cos^2 \theta) \sin \theta$ è la funzione $\theta - \frac{\cos \theta}{3}^3$, otteniamo la formula che definisce la vita media dello stato di tripletto del livello fondamentale :

$$\tau^{-1} = \frac{e^2\hbar}{m^2 c^2 3} k_0^3. \tag{3.92}$$

Sarà sufficiente inserire i risultati del paragrafo precedente, che come si ricorderà sono stati effettuati ignorando la quantizzazione del campo, nella formula 3.92 per poter ottenere la vita media dello stato considerato.

I nostri risultati prevedevano una transizione con emissione di un fotone di lunghezza d'onda $\lambda = 21.1cm$. Deduciamo quindi il valore di k_0 in 3.92 considerando che è ottenuto dividendo 2π per la lunghezza d'onda λ e calcoliamo in definitiva una durata del livello eccitato di circa:

$$\tau \approx 3.4 \cdot 10^{14} secondi \approx 10^7 anni. \tag{3.93}$$

3.2.3 La riga a 21 centimetri in cosmologia

Con questo calcolo risulta chiaro il motivo per cui la transizione non fosse praticamente mai stata osservata in laboratorio. La lunghissima longevità dello stato, in cui elettrone e protone presentano spin paralleli, fa si che per osservarne il decadimento sia necessario disporre di un numero enorme di atomi di idrogeno per tempi lunghi. Tale condizione, difficilmente ottenibile in laboratorio, può essere raggiunta considerando le nubi di idrogeno interstellare che permeano l'intera galassia. Difatti la possibilità teorica di rilevare la riga a 21 centimetri, avanzata nel 1945 da van de Hulst [15], fu sperimentalmente verificata analizzando sia lo spettro di emissione (Ewen e Purcell 1951[18], Muller e Oort 1951[19]) che di assorbimento (Hagen e McClain [17] e [16]). A causa delle sue proprietà penetranti, che permettono di rilevare idrogeno proveniente anche da regioni lontane dello spazio, l'analisi di questa radiazione si è dimostrata un potente strumento per la conoscenza della forma e della distribuzione della materia nella nostra galassia. In particolare è stata l'analisi delle curve di rotazione, dedotte da analisi spettroscopiche, a provare l'esistenza degli *aloni* di materia oscura che si estendono oltre la regione visibile del disco. Ripercorriamo adesso quali sono state le considerazioni teoriche che, sfruttando l'emissione sulla riga a 21 centimetri da parte delle nubi di idrogeno, hanno permesso di dedurre queste importanti scoperte.

La misura delle curve di rotazione è il più semplice metodo per la determinazione degli effetti gravitazionali della materia contenuta nella galassia. La curva di rotazione descrive la velocità orbitale di un punto in funzione della sua distanza dal centro. La relazione tra la massa di materia contenuta in una sfera di raggio r e la velocità degli oggetti a quella distanza può essere derivata considerando che per orbitare intorno al centro deve sussistere un equilibrio tra forza centripeta e forza gravitazionale. Scrivendo le grandezze in esame come funzione del raggio otteniamo l'uguaglianza:

$$\frac{GM(r)m}{r^2} = \frac{mv^2(r)}{r},$$
(3.94)

che comporta per la velocità orbitale la relazione

$$v(r) = \sqrt{\frac{GM(r)}{r}},\tag{3.95}$$

nella quale compaiono la costante di gravitazione universale G, M(r) che indica tutta la massa contenuta nella sfera di raggio r, e la massa m dell'oggetto orbitante. Dall'analisi spettroscopica, sia nel visibile che nelle onde radio con la riga a 21 centimetri, è possibile ottenere informazioni su entrambe le grandezze M(r) e v(r), ricavando sperimentalmente l'andamento della curva di rotazione. L'aderenza tra la distribuzione di massa risultante dalla curva così ottenuta e quella congetturata rappresenta quindi una misura della esattezza di quest'ultima. Se infatti supponiamo un modello di galassia con una densità uniforme verso il centro, come l'analisi dello spettro visibile sembra mostrare, l'andamento della velocità orbitale dovrebbe inizialmente essere lineare per poi decadere come $1/\sqrt{r}$. Questa congettura, che ha goduto di considerazione fino agli anni '50, è stata però messa in seria discussione dalle curve di rotazione ottenute con la radiazione di lunghezza d'onda di 21 centimetri, molto più penetranti, proveniente dall'idrogeno neutro. Queste mostrano come, superata la regione di densità di massa uniforme, la velocità orbitale non decada come $1/\sqrt{r}$, ma si stabilizzi verso un valore costante

indipendente dalla distanza. E' possibile rendere ragione di questo comportamento congetturando una distribuzione di materia differente da quella emersa dalle analisi con la radiazione visibile. Da questa si deduce come esista una significativa quantità di materia, la così detta *materia oscura*, distribuita sfericamente molto oltre la regione visibile del disco della galassia.

Appendice A

Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo

Lo studio dei vari fenomeni di interazione tra il campo di radiazione e la materia ha portato ad un massiccio utilizzo dei risultati della *teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo*. Le formule impiegate per ottenere le soluzioni al primo ordine dell'equazione di Schroedinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi,$$
 (A.1)

e le relative probabilità di transizione sono alcune delle conseguenze della teoria inizialmente sviluppata da P.A.M. Dirac e che trova fondamento nel metodo della variazione delle costanti arbitrarie per la risoluzione delle equazioni differenziali lineari. In questa appendice si presentano in maniera del tutto generale i metodi di risoluzione dell'equazione A.1 in maniera da sollevare ogni possibile fraintendimento sul significato fisico da collegare alle formule impiegate. Tali fraintendimenti riguardano, sopra ogni altro, le differenze fra transizioni che coinvolgono lo spettro discreto e quelle relative allo spettro continuo degli autovalori. Per alleggerire la notazione e facilitare i calcoli sarà sufficiente procedere nella descrizione del metodo calandoci nella rappresentazione delle coordinate, rappresenteremo cioè ogni ket $|\psi\rangle$ con la relativa funzione d'onda $\langle r | \psi \rangle = \psi(r,t)$. Sarà poi possibile, se necessario, passare alle formule con la notazione di Dirac degli stati sfruttando la medesima corrispondenza.

A.1 Perturbazioni nello spettro discreto

Il sistema che ci accingiamo ad analizzare è descritto, fino ad un certo tempo t che porremo come istante iniziale, da un hamiltoniano \hat{H}_0 . Tale hamilto-

niano, non dipendendo esplicitamente dal tempo, ammette un insieme completo di funzioni d'onda *stazionarie* aventi un valore definito dell'energia E_k^0 . Indichiamo con ψ_k^0 tali funzioni includendo il fattore temporale $e^{\frac{-iE_k^0 t}{\hbar}}$. Supponiamo inoltre, per una maggiore completezza, che \hat{H}_0 abbia oltre lo spettro discreto anche uno spettro di valori continui per l'energia, cioè esista α variabile continua appartenente ad un intervallo I tale che la generica funzione d'onda per un sistema con tale hamiltoniano sia esprimibile come sovrapposizione discreta e continua :

$$\psi = \sum_{k} \left(a_k \psi_k^0 \right) + \int_{\alpha \in I} a_\alpha \psi_\alpha^0 d\alpha.$$
 (A.2)

Se questo sistema viene sottoposto, successivamente all'istante da noi posto come iniziale, ad una perturbazione dipendente esplicitamente dal tempo $\hat{V}(t)$ considerata piccola rispetto ad \hat{H}_0 , l'energia non rappresenta più una costante del moto e conseguentemente gli autostati del sistema imperturbato cessano di essere stazionari. Diventa così possibile che uno stato rappresentato al tempo t = 0 da una funzione d'onda con un valore determinato dell' energia imperturbata E^0 possa evolversi verso un altro autostato dell'hamiltoniano imperturbato.

Cerchiamo di calcolare l'evoluzione temporale di uno stato che ha inizialmente un valore determinato dell'energia nello spettro discreto. In tal caso fissiamo come condizione iniziale $\psi(0) = \psi_k^0(0)$ e cerchiamo la soluzione dell'equazione

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right)\psi,\tag{A.3}$$

sotto la forma di uno sviluppo con coefficienti dipendenti dal tempo (in analogia con il metodo delle variazione delle costanti arbitrarie)

$$\psi = \sum_{k} \left(a_k(t) \psi_k^0 \right) + \int_{\alpha \in I} a_\alpha(t) \psi_\alpha^0 d\alpha.$$
 (A.4)

Inserendo questo sviluppo nell'equazione A.3 e ricordando che le funzioni ψ_k^0 e ψ_α^0 soddisfano :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi,$$
 (A.5)

otteniamo

$$i\hbar\sum_{k} \left(\psi_{k}^{0}\frac{\partial a_{k}}{\partial t}\right) + \int_{\alpha\in I} \frac{\partial a_{\alpha}}{\partial t}\psi_{\alpha}^{0}d\alpha = \sum_{k} a_{k}\hat{V}\psi_{k}^{0} + \int_{\alpha\in I} a_{\alpha}\hat{V}\psi_{\alpha}^{0}d\alpha.$$
(A.6)

Le autofunzioni di \hat{H}_0 sono ortonormalizzate nei differenti modi caratteristici dello spettro discreto e di quello continuo. Per studiare le transizioni interne allo spettro discreto moltiplichiamo per ψ_k^0 e integriamo ottenendo la equazione che determina l'evoluzione temporale della soluzione cercata:

$$i\hbar\frac{\partial a_m}{\partial t} = \sum_k \left(V_{m,k}(t)a_k\right) + \int a_\alpha V_{m,\alpha}(t)d\alpha, \qquad (A.7)$$

con $V_{m,j}(t) = \int \psi_m^{0*} \hat{V} \psi_j^0 dq = V_{m,j} e^{i\omega_{m,j}t}$ dove $\omega_{m,j}$ è la frequenza di Bohr riferita sia ai valori dell'energia dello spettro discreto che per lo spettro continuo.

Una volta trovato il sistema di (infinite) equazioni che determinano l'evoluzione temporale dei coefficienti la soluzione generale viene cercata in forma di sviluppo

$$a_j = a_j^0 + a_j^1 + a_j^2 \dots$$
(A.8)

nel quale a_j^1 è dello stesso ordine di \hat{V} , a_j^2 è del secondo ordine ecc ecc. Limitandoci alla ricerca delle correzioni al primo ordine dei coefficienti interrompiamo lo sviluppo ai primi due termini $a_j = a_j^0 + a_j^1$ e inseriamolo in A.7. La soluzione cercata dovrà tendere alla soluzione imperturbata corrispondente qualora l'intensità della perturbazione tenda ad annullarsi. E' naturale quindi, considerando che la funzione cercata è tale da soddisfare la condizione iniziale $\psi(0) = \psi_k^0(0)$, richiedere che i coefficienti di ordine zero dello sviluppo di A.8 siano tutti nulli fuorchè quello relativo al k-esimo coefficiente

$$a_n^0 = \delta_{n,k}.\tag{A.9}$$

Otteniamo allora per le correzioni al primo ordine dell' m-esimo coefficiente l'insieme di equazioni *separate*

$$i\hbar \frac{\partial a_m^1}{\partial t} = V_{m,k}(t), \qquad (A.10)$$

che può essere risolta per quadrature :

$$a_m^1 = -\frac{i}{\hbar} \int V_{m,k}(t)dt = -\frac{i}{\hbar} \int V_{m,k} e^{i\omega_{m,k}t} dt.$$
(A.11)

A.1.1 Perturbazione periodica

E' fondamentale per lo sviluppo della teoria considerare il caso in cui il sistema è sottoposto all'azione di un potenziale periodico del tipo

$$\hat{V} = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}^*e^{i\omega t}.$$
(A.12)

Tale sistema permette infatti di descrivere il caso delle perturbazioni costanti, ponendo $\omega = 0$, è fornisce il prototipo delle perturbazioni causate dalla radiazione. Per sfruttare i risultati del precedente paragrafo scriviamo l'elemento di matrice di \hat{V} calcolato con l'utilizzo delle autofunzioni dipendenti dal tempo ψ_k^0 , otteniamo:

$$V_{k,n}(t) = V_{k,n}e^{i\omega_{k,n}t} = F_{k,n}e^{i(\omega_{k,n}-\omega)t} + F_{n,k}^*e^{i(\omega_{k,n}+\omega)t}.$$
 (A.13)

Sostituendo nell'equazione A.11 e integrando otteniamo le approssimazioni al primo ordine dell'ampiezza di una transizione verso lo stato rappresentato da ψ_k^0 :

$$a_k^1 = -\frac{F_{k,n}e^{i(\omega_{k,n}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{k,n}-\omega)} - \frac{F_{n,k}^*e^{i(\omega_{k,n}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{k,n}+\omega)}.$$
(A.14)

Formula valida finche i denominatori siano diversi da zero ovvero finchè per tutti i k si ha $E^0_k-E^0_n\neq\pm\hbar\omega$

A.2 Transizioni nello spettro continuo

Consideriamo il caso delle transizioni tra stati dello spettro discreto e stati dello spettro continuo indotti da una perturbazione periodica del tipo studiato. Se all'istante iniziale il sistema si trova nell'i-esimo stato stazionario avremo transizioni negli stati dello spettro continuo se la frequenza della perturbazione è tale che sia soddisfatta la relazione $\hbar \omega > E_{min} - E_i^0$, dove E_{min} è il valore dell'energia nel quale comincia lo spettro continuo. Dai risultati del paragrafo precedente comprendiamo come saranno gli stati con energia prossima a quella di risonanza $E_i^0 + \hbar \omega$ a svolgere un ruolo principale nel calcolo della probabilità di transizione e, per il medesimo motivo, trascureremo dall'elemento di matrice A.13 il secondo termine, essendo il primo nettamente predominante a causa della piccolezza del denominatore. E' facile vedere come per il calcolo delle transizioni nello spettro continuo l'equazione differenziale che determina le correzioni sia identica, perciò otteniamo del tutto analogamente, che per una transizione verso lo stato stazionario ψ_f^0 dello spetto continuo il coefficiente dello sviluppo valga :

$$a_f^1 = -\frac{F_{f,i}e^{i(\omega_{f,i}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{f,i}-\omega)}.$$
(A.15)

Il quadrato del modulo diventa

$$\left|a_{f}^{1}\right|^{2} = \left|F_{f,i}\right|^{2} \frac{4\sin^{2}(\frac{\omega_{f,i}-\omega}{2}t)}{\hbar^{2}(\omega_{f,i}-\omega)^{2}},\tag{A.16}$$

che, differentemente dal caso discreto, indica ora la *densità di probabilità* per una transizione verso l'f-esimo stato. E' un fatto notevole che la formula precedente per tempi lunghi mostri una dipendenza lineare dal tempo. Possiamo capire l'origine di tale andamento sfruttando la formula

$$\lim_{t \to +\infty} = \frac{\sin^2(\alpha t)}{\pi t \alpha^2} = \delta(\alpha), \qquad (A.17)$$

che adattata al nostro caso, con $\alpha = \frac{\omega_{f,i}-\omega}{2}$, comporta che per grandi t si ottenga la formula

$$\left|a_{f}^{1}\right|^{2} = \frac{1}{\hbar^{2}} \left|F_{f,i}\right|^{2} \pi t \delta(\frac{\omega_{f,i} - \omega}{2}).$$
(A.18)

Con l'ulteriore sostituzione $\hbar \omega_{f,i} = E_f - E_i^0$ arriviamo alla più familiare formula per la densità di probabilità di transizione

$$\left|a_{f}^{1}\right|^{2} = \frac{2\pi}{\hbar} \left|F_{f,i}\right|^{2} t\delta(E_{f} - E_{i}^{0} - \hbar\omega).$$
(A.19)

Perciò se siamo interessati a trovare la probabilità per unità di tempo di una transizione verso una banda continua di stati, caratterizzati dalla variabile continua ν e compresi nell' intorno infinitesimo tra ν_f di $\nu_f + d\nu$ (dove ν_f è il valore del parametro continuo che caratterizza lo stato f-esimo), dobbiamo dividere la densità di probabilità per t e moltiplicarla per l'intervallo, ottenendo così la nota formula:

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| F_{f,i} \right|^2 \delta(E_f - E_i^0 - \hbar\omega) d\nu.$$
 (A.20)

Possiamo adesso interessarci al caso fondamentale per i calcoli perturbativi presenti in questo lavoro. Cercheremo di calcolare la probabilità di una transizione tra stati appartenenti allo spettro continuo indotta da una perturbazione costante. In particolare, tenendo conto della presenza della delta di Dirac nelle formule precedenti, ci chiediamo quale sia la probabilità che uno sistema all'istante iniziale, descritto da uno stato appartenente allo spettro continuo, possa transitare verso un'altro con la stessa energia. Per perseguire questo scopo modifichiamo la A.20 ponendo $\omega = 0$ e consideriamo una transizione verso stati descritti dalla variabile continua tra ν_f di $\nu_f + d\nu$. Modificando la A.20 otteniamo :

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{f,i}|^2 \,\delta(E_f - E_i^0) d\nu, \qquad (A.21)$$

che come ci aspettavamo è diversa da zero solo per transizioni senza variazione dell'energia. Tale espressione, come abbiamo visto, non può rappresentare direttamente la probabilità di transizione per stati appartenenti allo spettro continuo. Essa indica piuttosto quale sia, in prima approssimazione, il numero delle transizioni per unità di tempo dallo stato iniziale verso quello finale.

Appendice B

Passaggio alle variabili continue

B.1 Il limite continuo

Per effettuare la quantizzazione del campo elettromagnetico libero abbiamo, come primo passo, cercato di far dipendere questo da un insieme infinito ma discreto di variabili in modo da poterlo rappresentare come una infinita sovrapposizione di oscillatori. Il metodo utilizzato prevedeva di considerare il campo totalmente contenuto in una scatola di spigolo L in maniera tale che le condizioni al contorno portassero ad una famiglia discreta di *modi normali del campo*. Le formule da noi ottenute sarebbero quindi rigorosamente valide solo in questo caso definito, come la presenza del volume della scatola L^3 indica nelle formule ottenute con questo procedimento. Possiamo agevolmente estendere i risultati ottenuti con i modi normali discreti al caso più generale in cui il campo sia liberamente esteso e conseguentemente questi possano prendere un insieme continuo di valori.

Per fare questo consideriamo lo spazio tridimensionale con assi $n_x n_y$ ed n_z ; dove n_i prende valori interi positivi e negativi. Ogni terna di valori $\{n_x, n_y, n_z\}$ rappresenta un modo normale. Dentro un volume $\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z$ di tale spazio, nel quale le variabili n_i prendono valori inclusi nell'intervallo $[n_i, n_i + \Delta n_i]$, cadranno esattamente un numero $\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z$ di modi normali. Considerando la proporzionalità tra il vettore numero d'onda \vec{k} e il vettore \vec{n} , che rappresenta un modo normale nello spazio considerato, abbiamo che al volume $\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z$ corrisponde la gamma di numeri d'onda contenuti nel volume $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$ secondo la relazione:

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z. \tag{B.1}$$

Per passare al campo estes
o dobbiamo effettuare il passaggio $L^3 \longrightarrow \infty$

che comporta automaticamente un insieme sempre più fitto di modi normali finò ad arrivare a grandezze al limite continue. In questo modo la B.1 diventa

$$dn_x dn_y dn_z = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x dk_y dk_z,\tag{B.2}$$

fornendo automaticamente il modo di conteggio degli stati nel caso continuo.

Alla somma su tutti i modi normali discreti si sostituirà la somma continua (cioè l'integrale) su tutti i volumi infinitesimi dati da B.2. In questo modo le formule ottenute considerando il campo confinato in una scatola di spigolo L potranno facilmente essere generalizzate al caso continuo effettuando la sostituzione:

$$\sum_{k} \longrightarrow \frac{L^{3}}{(2\pi)^{3}} \int d^{3}k.$$
 (B.3)



Figura B.1: Rappresentazione dello spazio dei modi normali

Bibliografia

- [1] D.Griffiths, "Introduction to elementary particles", Wiley, 1987.
- [2] W.Greiner, "Quantum Mechanics. Special Chapters", Springer, 1998.
- [3] J.J.Sakurai, "Modern Quantum Mechanics. Revised edition", Addison-Wesley, 1994.
- [4] E. Schroedinger, "Quantization as an eigenvalue problem", Annalen der Physik, 1926.
- [5] W.Heisenberg, P.Jordan e M.Born, "On Quantum Mechanics II", Z.Phys, 1926.
- [6] P.A.M.Dirac, "The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation", Proc. Roy. Soc., 1927.
- [7] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu, F.Laloe, "Quantum Mechanics. Vol. 1", Wiley Interscience, 1977.
- [8] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu, F.Laloe, "Quantum Mechanics. Vol. 2", Wiley Interscience, 1977.
- [9] A. Einstein "On the Quantum Theory of Radiation", Physika Zeitschrift, 1917.
- [10] L.D.Landau, E.M.Lifsits "Meccanica Quantistica. Teoria non relativistica", Editori Riuniti. Edizioni Mir, 1976.
- [11] L.D.Landau, E.M.Lifsits "Meccanica Quantistica. Teoria relativistica", Editori Riuniti. Edizioni Mir, 1976.
- [12] L.D.Landau, E.M.Lifsits "Teoria dei Campi", Editori Riuniti. Edizioni Mir, 1976.
- [13] D.F.Walls, G.J.Milburn, "Quantum Optics", Springer, 1994.

- [14] P.A.M. Dirac, "I principi della meccanica quantistica", Boringhieri, 1976.
- [15] H.C van de Hulst e C.J.Bakker, Ned. Tijdschr. Natuurk., 1945.
- [16] J.P.Hagen e E.F. McClain 1954, ApJ, 120, 368.
- [17] J.P.Hagen, N.Hepburn e E.F. McClain 1954, AJ, 59, 323.
- [18] H.I.Ewen e E.M.Purcell 1951, Nature, 536, 540.
- [19] C.A.Muller e J.H.Oort 1951, Nature, 168, 357.