Università degli Studi di Milano

Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali

Corso di Laurea in Fisica

INTERFEROMETRIA DI NEUTRONI
E FONDAMENTI DI MECCANICA QUANTISTICA

Relatore: Prof. Ludovico LANZ
Correlatore: Prof. Daniela ZANON

Tesi di laurea di:
Bassano VACCHINI
Matr. 370760

Codice P.A.C.S. 03.65
Anno Accademico 1993-1994

... perchè dell'infinito tal parte n'è il molto che 'l poco e che il niente (perchè per arrivare, per esempio, al numero infinito tanto è l'accumular migliaia, quanto decine e quanto zeri)...

(G. Galilei, Dialogo sui massimi sistemi)

Desidero ringraziare il mio stimatissimo relatore, nonché maestro, professor Ludovico Lanz. A lui devo la possibilità di portare a compimento questo lavoro di tesi, ma soprattutto molti insegnamenti che hanno rinnovato in me l'interesse per la Fisica e per lo studio.

Ringrazio la correlatrice, professoressa Daniela Zanon, per la pazienza e la cortesia con cui mi ha seguito in questo lavoro.

Vorrei inoltre esprimere la mia più viva riconoscenza ad Andrea, per l'insostituibile assistenza tecnico-informatica.

Capitolo 1

Introduzione

1.1 Motivazioni e schema della tesi

Negli ultimi anni sono state messe a punto diverse tecniche finalizzate alla realizzazione di esperimenti statistici con una singola particella per volta e la raffinatezza dei risultati ottenibili ha ravvivato l'interesse per le questioni di fondamento in meccanica quantistica. Esperimenti di questo genere sono stati svolti con diversi tipi di microsistemi, atomi e ioni nel contesto del raffreddamento ottico e dell'intrappolamento elettromagnetico, e poi nella fisica dei neutroni, dando luogo a un filone di ricerca che viene oggi da alcuni soprannominato fisica *one by one*.

In questo lavoro di tesi si studiano, dal punto di vista teorico, una serie di esperimenti di interferometria di neutroni, condotti dal gruppo del prof. H. Rauch di Vienna, che si inseriscono proprio nell'ambito di questo filone di ricerca. La struttura dell'interferometro viene descritta nel Capitolo 2, ove si illustrano anche gli esperimenti effettuati. Nello stesso capitolo si introduce per sommi capi, facendo riferimento ai classici lavori di Sears, la teoria che viene generalmente usata per descrivere i risultati sperimentali, nota come ottica dei neutroni. Il fatto di maggior rilievo è l'alto grado di coerenza nell'interazione tra neutrone e cristallo ed i risultati ottenuti quando in uno dei due rami è presente un materiale che induce una variazione di fase sono ben descritti introducendo una funzione d'onda e un opportuno potenziale macroscopico. Le misure effettuate in presenza di un assorbitore posto in uno dei due bracci dell'interferometro manifestano invece una leggera discrepanza tra dati sperimentali e previsioni teoriche.

Alcuni fisici teorici (M. Namiki e S. Pascazio) hanno letto in questo una carenza della formulazione tradizionale della meccanica quantistica e ne hanno proposto una generalizzazione che prevede alcune modifiche ai postulati fondamentali usualmente accettati. L'applicazione di questa teoria agli esperimenti considerati, a nostro giudizio piuttosto artificiosa, è brevemente ricordata nel Capitolo 3.

Uno degli scopi di questa tesi è dare un fondamento più chiaro alla distinzione tra l'interazione del neutrone con la struttura fortemente ordinata e coerente del cristallo e lo scattering incoerente dovuto all'interazione con un altro materiale. Nella trattazione usuale dell'ottica dei neutroni infatti non si approfondisce molto la differenza tra scattering coerente ed incoerente, concentrando tutta l'attenzione sul primo dei due fenomeni fisici. La presenza di questo scattering incoerente richiede il passaggio dal formalismo della funzione d'onda a quello dell'operatore statistico, poiché solo così è possibile introdurre in modo soddisfacente la distinzione fra i due contributi allo scattering. Nel Capitolo 4 si introduce quindi la moderna formulazione operazionale della meccanica quantistica. Si presenta anche il concetto di dinamica ridotta, richiamando la struttura caratteristica dei generatori di operazioni corrispondenti a semigruppi dinamici, descriventi processi irreversibili come ad esempio l'interazione tra un microsistema ed un macrosistema in condizione di equilibrio termodinamico. Nel Capitolo 5 si sviluppa una descrizione in termini di dinamica ridotta per l'interazione fra neutrone e macrosistema e si ottiene una master-equation per l'evoluzione dell'operatore statistico associato al solo neutrone. Per ottenere questo risultato si sfrutta il formalismo dei superoperatori nel contesto della seconda quantizzazione sviluppando un calcolo perturbativo per l'interazione neutrone macrosistema. Tramite il calcolo della traccia parziale rispetto agli stati del macrosistema si ottiene la master-equation cercata e si verifica che questa conservi traccia e positività dell'operatore statistico. Il generatore dell'evoluzione temporale può essere scomposto in una parte hamiltoniana, strettamente collegata al termine di potenziale usualmente introdotto nell'ottica dei neutroni, e in un contributo incoerente tipico della descrizione dell'operatore statistico, che non trova corrispettivo nel formalismo della funzione d'onda.

È possibile dare una rilettura fisicamente molto intuitiva della master-equation riscrivendola in forma di equazione alla Boltzmann. Per ottenere questo risultato si introduce, nel Capitolo 6, la funzione di Wigner e si presentano brevemente le proprietà più importanti di questa funzione di distribuzione per particella singola, che permette di ritrovare una descrizione tipo spazio delle fasi in meccanica quantistica. Nello stesso capitolo si mostra in dettaglio come l'uso della funzione di Wigner permetta, sotto opportune ipotesi, di ottenere dalla master-equation un'equazione alla Boltzmann. L'aspetto nuovo che emerge da questo passaggio è il ruolo del termine non coerente, assente negli usuali studi di interferometria di neutroni, che può ora essere collegato al contributo di guadagno per collisione dell'equazione di Boltzmann. Ci si può aspettare che sia proprio la presenza di questo contributo non coerente, tanto più rilevante tanto maggiore è l'assorbimento, a dare ragione delle discrepanze osservate a livello sperimentale.

Nel Capitolo 7 si adotta il formalismo dell'operatore statistico per descrivere gli esperimenti considerati. Si recuperano quindi in una nuova luce i risultati teorici con cui si è confrontato il gruppo sperimentale, dando una veste rigorosa a formule spesso usate in maniera euristica nei primi lavori di Rauch, nonché in quelli di Namiki e Pascazio. Si riottengono poi gli stessi risultati nel formalismo della funzione di Wigner, evidenziando il collegamento tra fenomeni di interferenza e non definita positività della funzione di Wigner stessa. Da ultimo si accenna al possibile ruolo che possono avere i contributi non coerenti all'operatore statistico negli esperimenti di Rauch.

Capitolo 2

Interferometria di neutroni

2.1 Ottica dei neutroni

Il campo dell'ottica delle particelle ha avuto un grande sviluppo grazie al successo della interferometria di neutroni, che è in grado di operare con neutroni termici e freddi. Questi neutroni hanno lunghezze d'onda dell'ordine delle distanze interatomiche nella materia condensata e sono soggetti a interazioni gravitazionali, elettromagnetiche e forti. Queste proprietà rendono i neutroni uno strumento appropriato per ricerche nei campi della fisica fondamentale, nucleare e dello stato solido. In particolare essi sono particelle massive con molte proprietà ben definite come ad esempio la loro massa, lo spin ed il momento magnetico associato. La loro dinamica è tuttavia ben descritta dall'equazione delle onde di Schrödinger ed essi mostrano pertanto un ben definito comportamento ondulatorio, in accordo col principio di complementarietà della meccanica quantistica, candidandosi quindi come strumenti per una verifica sperimentale di alcune delle affermazioni basilari della meccanica quantistica stessa.

2.2 I primi tentativi

Diverse tecniche di interferometria di neutroni sono state escogitate e verificate sperimentalmente. Il primo interferometro per neutroni venne realizzato da Maier-Leibnitz e Springer attorno al 1962. In questo strumento la separazione spaziale dell'onda coerente era ottenuta tramite una tecnica di divisione del fronte d'onda realizzata per mezzo di un apparato sperimentale simile ad un biprisma di Fresnel. Poiché però l'indice di rifrazione dei neutroni è molto prossimo all'unità, si era solo in grado di ottenere una separazione utile fra i fasci coerenti di 0,06 mm, benché il cammino di volo fosse di circa 10 m. L'efficacia di questo strumento era ulteriormente ridotta quando dei materiali che inducono una variazione di fase venivano introdotti lungo il fascio. L'interesse per l'interferometria di neutroni venne risollevato con l'affermarsi dell'interferometro a cristallo perfetto, sviluppato da principio per raggi X da U. Bonse ed M. Hart (intorno al 1965) e poi esteso ai neutroni da H. Rauch, W. Treimer ed U. Bonse (intorno al 1974) [1,2].

2.3 Struttura dell'interferometro

L'interferometro a cristallo perfetto [3] consiste di un cristallo monolitico perfetto di silicio, ovvero senza impurità o irregolarità nella distribuzione degli atomi del cristallo. Esso ha dimensioni macroscopiche e può essere largo sino a circa 5 cm e lungo sino a circa 10 cm. Esistono due versioni di questo interferometro dette simmetrica e antisimmetrica, in funzione della struttura macroscopica del cristallo, come si vede dalla figura [4].

Ci soffermeremo solo sulla struttura dell'interferometro a cristallo perfetto in configurazione simmetrica, che è quella usata per gli esperimenti di nostro interesse. In questo caso il cristallo ha la forma di una E, ove le tre lastre sporgenti di silicio sono perfettamente allineate fra loro, equidistanziate e di ugual spessore (tipicamente attorno ai 4 mm). Se questa condizione di parallelismo viene meno anche per frazioni di un Å, si ha una sensibile riduzione della visibilità delle frange (comparsa di figure di Moiré [2]). Queste inaccuratezze nella struttura dell'interferometro possono essere causate anche solo da gradienti di temperatura, così come da un cattivo bilanciamento del peso del cristallo, ed è necessario compensare questi difetti per ottenere misure precise. In questo strumento si sfrutta una tecnica di divisione dell'ampiezza per separare spazialmente l'onda coerente incidente. Il fascio incidente ben collimato e monoenergetico viene diviso coerentemente in due parti tramite riflessione alla Bragg quando incide sulla prima lastra. La seconda lastra agisce dunque da specchio che riporta i due fasci coerenti a sovrapporsi sull'ultima lastra, l'analizzatore. Le figure di interferenza prodotte si possono poi osservare per mezzo di un rivelatore situato lungo il percorso del fascio O, oppure lungo il percorso del fascio H. La struttura dell'interferometro presenta perciò una certa analogia con l'interferometro Mach-Zender, usualmente utilizzato in ottica, con la differenza però che qui tutti gli specchi sono semiriflettenti. Alcuni dei vantaggi di questo interferometro come ad esempio l'ampia separazione che si può ottenere fra i due fasci sono fortemente collegati alla sua struttura; a questo si aggiungono delle notevolissime proprietà di coerenza, che ne hanno suggerito e permesso l'utilizzo in svariate situazioni. Il fascio incidente è costituito da neutroni emessi dal moderatore di un reattore, che agisce come sorgente termica di radiazione. Il fascio viene poi collimato e reso monocromatico ($\Delta\lambda/\lambda$ è tipicamente dell'1%) e l'intervallo di tempo caratteristico intercorrente fra il passaggio di un neutrone e l'altro è di circa 0,78 ms, mentre l'interferometro viene attraversato da un neutrone termico (E=1/40 eV, $\lambda \simeq$ 1,8-1,9 Å) in circa 35 μs ed è quindi corretto affermare che il neutrone successivo non è ancora stato emesso dai nuclei di uranio quando un certo neutrone sta attraversando l'interferometro. Tutti gli esperimenti sono dunque stati effettuati in regime di autointerferenza e non c'è interazione fra i neutroni, essi hanno subito solo la stessa preparazione, che determina la coerenza del fascio. I neutroni interessati dalle varie ripetizioni dell'esperimento costituiscono un ensemble statistico descritto dalla funzione d'onda soluzione dell'equazione di Schrödinger con le opportune condizioni al contorno. Fra i maggiori fattori di disturbo dell'apparato sperimentale sono da annoverare:

- la variazione di spessore e di distanza delle lastre del cristallo
- leggere deviazioni dalla struttura reticolare perfetta causate da impurità presenti nel cristallo o da un gradiente di temperatura
- vibrazioni causanti uno spostamento dei piani del reticolo durante il tempo di volo del neutrone attraverso l'interferometro
- limitata monocromaticità del fascio di neutroni.

Tutti questi effetti causano un sottofondo non interferente che può essere tenuto abbastanza bene sotto controllo e addirittura notevolmente ridotto con una accorta messa a punto delle varie strumentazioni.

2.4 Base teorica

Diamo ora una breve giustificazione delle formule usate da Rauch per le previsioni teoriche dei risultati dei vari esperimenti. Come si è detto il fascio di neutroni collimato e pressoché monocromatico incidente sull'interferometro subisce sulla prima lastra una riflessione alla Bragg in configurazione di Laue simmetrica (220) (i piani di Bragg sono perpendicolari alla lastra). Analoga riflessione avviene sulla seconda lastra, per portare i due fasci a sovrapporsi sulla terza lastra (o analizzatore) da dove poi fuoriescono nelle due direzioni O ed H. Il neutrone viene poi rivelato per assorbimento: si forma un nucleo composto con energia di eccitazione di diversi MeV (tipicamente intorno ai 7), che si diseccita emettendo raggi gamma, alfa o beta che vengono facilmente rivelati. L'interazione dell'onda associata al neutrone col potenziale strettamente periodico del cristallo perfetto è descritta dalla teoria della diffrazione dinamica, che fornisce la soluzione della equazione di Schrödinger per un tale potenziale, e costituisce la base teorica da cui ricavare le previsioni per le figure di intensità ottenute nei vari esperimenti [5,6]. Le teorie di scattering di neutroni da parte di sistemi macroscopici vengono classificate come dinamiche o cinematiche, se fenomeni di scattering multiplo vengono rispettivamente considerati o trascurati. La teoria cinematica dell'urto è asintoticamente esatta nel limite di campioni molto sottili. All'interno della teoria dinamica dello scattering di neutroni vi sono due approcci fondamentali . Il primo è la teoria del trasporto in cui il problema dello scattering multiplo è trattato classicamente in termini della equazione di Boltzmann. Il secondo è la teoria dinamica della diffrazione, in cui il problema dello scattering multiplo è trattato nell'ambito della meccanica quantistica. La differenza essenziale fra questi due approcci è che nella teoria della diffrazione dinamica effetti quantistici di interferenza fra i vari ordini di scattering sono presi in considerazione, mentre nella teoria del trasporto per neutroni questi effetti di interferenza vengono trascurati. Poiché il libero cammino medio di un neutrone termico in un solido od un liquido è dell'ordine di 1 cm, mentre la sua lunghezza d'onda di De Broglie è dell'ordine di 1 Å, è chiaro che solo in situazioni molto particolari gli effetti d'interferenza saranno importanti. Negli esperimenti in cui questi effetti sono importanti , come nel caso dell'interferometro da noi considerato, si osservano diversi fenomeni ottici che sono completamente assenti nell'ambito della teoria del trasporto per neutroni, che trascura appunto il comportamento ondulatorio delle particelle. Fra questi fenomeni spiccano l'effetto di interferenza di Pendellösung in riflessione alla Bragg da parte di cristalli perfetti e la cosiddetta estinzione primaria, che è sostanzialmente un effetto di attenuazione dell'onda dovuto non ad assorbimento, ma ad una riflessione alla Bragg multipla.

La fondamentale quantità di interesse nella teoria dinamica della diffrazione per neutroni è l'onda coerente associata alla particella che fornisce una descrizione completa di tutti i processi di scattering elastico coerente e che soddisfa l'equazione di Schrödinger macroscopica per particella singola:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{2.1}$$

ove $v(\mathbf{r})$ è il potenziale ottico, E l'energia del neutrone incidente ed m la massa del neutrone. Sottolineiamo che $v(\mathbf{r})$ e di conseguenza ψ sono quantità macroscopiche; ciò significa che esse dipendono solo dallo stato termodinamico del sistema e non dalla posizione istantanea degli atomi di cui esso è composto. In altre parole il sistema per quello che riguarda lo scattering elastico coerente si comporta come un mezzo macroscopico. In un gas od in un liquido $v(\mathbf{r})$ è costante, indipendente da r, mentre in un cristallo $v(\mathbf{r})$ è una funzione periodica con la stessa periodicità del cristallo. Nella teoria dinamica della diffrazione tutti i processi di collisione che non siano di scattering elastico coerente vengono detti collettivamente assorbimento. L'assorbimento include non solo l'effettivo assorbimento di neutroni da parte dei nuclei, ma anche scattering diffuso (ovvero incoerente ed inelastico). La presenza di assorbimento risulta in una attenuazione dell'onda coerente nel mezzo, cosicché, in una teoria autoconsistente, il potenziale ottico deve essere complesso. La teoria dinamica della diffrazione per neutroni è strettamente collegata alle corrispondenti teorie per i raggi X e gli elettroni. La differenza fondamentale sta nel fatto che, per i neutroni, l'onda coerente è solo debolmente assorbita nella più parte dei materiali, mentre per i raggi X e gli elettroni l'assorbimento è piuttosto forte. In effetti nei primi articoli comparsi nel 1974 Rauch e collaboratori fanno riferimento, per spiegare le distribuzioni di intensità misurate, alla teoria sino allora elaborata per i raggi X, citando i volumi di von Laue e Zachariasen sull'argomento. Solo più tardi nel 1978 compare l'articolo di Sears in cui si considera la teoria della diffrazione dinamica applicata al caso specifico dei neutroni, e da allora questo diventa il riferimento fondamentale. La teoria si divide naturalmente in due parti: la teoria della dispersione e la teoria di riflessione, rifrazione e diffrazione. La prima parte si occupa della derivazione della equazione di Schrödinger macroscopica per particella singola a partire dall'iniziale equazione di Schrödinger per molti corpi. Ovvero la teoria della dispersione giustifica l'affermazione che, per quello che riguarda lo scattering elastico coerente, il sistema di atomi si comporta come un mezzo macroscopico. Questo problema è analogo a quello di ricavare le equazioni di Maxwell macroscopiche a partire dalle equazioni elettrodinamiche microscopiche di Lorentz. La seconda parte si occupa di risolvere l'equazione così trovata per i diversi casi d'interesse, tenendo conto delle diverse condizioni al contorno.Nel caso di materiali non magnetici l'intera trattazione può essere fatta trascurando lo spin della particella. Una delle principali applicazioni della teoria della diffrazione dinamica per neutroni, ed in particolare delle misure interferometriche, è la determinazione sperimentale estremamente precisa di lunghezze di scattering coerente, che possono permettere di fare chiarezza riguardo all'interazione fra neutroni e nuclei o neutroni ed elettroni. Una ulteriore semplificazione è data dal fatto che l'interazione con gli elettroni è di secondaria importanza, purché non si considerino materiali magnetici, e può quindi essere trascurata. Oltretutto il termine di interazione è apprezzabilmente diverso da zero solo quando la distanza fra il neutrone ed il nucleo considerato è minore o dell'ordine del raggio nucleare. A distanze così piccole, con il neutrone in contatto fisico con il nucleo, la forza nucleare, che il neutrone esercita sul nucleo, è di diversi ordini di grandezza più intensa delle forze di legame chimico. È così evidente che durante il breve intervallo di tempo in cui avviene la collisione le forze di legame chimico possono essere trascurate. Si trattano cioè i nuclei come liberi. Queste sono caratteristiche peculiari della fisica dei neutroni, che rendono particolarmente semplice lo studio della loro interazione con la materia, a differenza ad esempio della radiazione elettromagnetica. Questa approssimazione è nota come approssimazione di impulso e ad essa corrisponde un potenziale detto pseudo-potenziale di Fermi della forma [7]:

$$v(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\langle b(\mathbf{r})\rangle \tag{2.2}$$

ove $b(\mathbf{r}) = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}} b_{\mathrm{i}}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mathrm{i}})$ è la densità di lunghezza di scattering legato (*bound scattering length*). L'indice i indica il nucleo i-esimo e la lunghezza di scattering legato è data da:

$$b = \frac{A+1}{A}a, \tag{2.3}$$

ove a è la lunghezza di scattering coerente ed $A = M/m$ è il rapporto fra la massa del nucleo e del neutrone. Il simbolo $\langle \ldots \rangle$ sta per:

$$\sum_{\alpha} P_{\alpha}\langle\alpha\,|\ldots|\,\alpha\rangle, \tag{2.4}$$

ove gli $|\alpha\,\rangle$ sono gli stati del sistema e P_{α} il fattore di Boltzmann, si tratta dunque di un valor medio sugli stati del sistema. La differenza essenziale tra la teoria cinematica e dinamica consiste nel fatto che nella prima fenomeni di diffrazione sono assenti, cosicché non vi è distinzione fra le onde interna ed esterna. Nella teoria dinamica si ha invece rifrazione e si mostra che gli indici di rifrazione, sia per l'onda trasmessa, che per l'onda di Bragg riflessa, ammettono due valori. Come risultato l'onda esterna incidente produce due onde interne trasmesse e due onde interne riflesse di Bragg. Queste onde emergono poi successivamente dal cristallo come una singola onda trasmessa e riflessa rispettivamente. Supponendo che l'assorbimento sia zero si ha che $R + T = 1$ ove R è il coefficiente di riflessione e T quello di trasmissione. È quindi sufficiente valutare R, che risulta essere dato, nel caso di Laue, da:

$$R = \frac{\sin^2(A\sqrt{1+y^2})}{1+y^2}$$

con A così definita:

$$A = \frac{k}{2}\left|\frac{V(\vec{K})}{E}\right|\frac{d}{\cos\theta_{\mathrm{b}}},$$

ove d è lo spessore attraversato, θ_{b} l'angolo di riflessione alla Bragg, $\vec{k}$ il vettore d'onda, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ l'energia del neutrone, $\vec{K}$ è un vettore del reticolo reciproco, $V(\vec{K})$ è la trasformata di Fourier del potenziale di interazione data da:

$$V(\vec{K}) = \frac{2\pi\hbar^2 b_{\mathrm{c}}}{m\Omega} F(\vec{K})$$

con b_{c} lunghezza di scattering coerente, m massa del neutrone, F fattore di struttura del piano riflettente, Ω volume della cella unitaria. Il fattore A può essere riscritto in maniera più significativa nel modo seguente:

$$A = \frac{\pi d}{\Delta_o} \qquad\qquad \Delta_o = \frac{\pi\Omega\cos\theta_{\mathrm{b}}}{b_{\mathrm{c}}\lambda|F|}$$

ove Δ_o è detta periodo di Pendellösung di cui vedremo il significato più avanti. L'altra grandezza da definire è y:

$$y = \frac{(\theta - \theta_{\mathrm{b}})\sin\theta_{\mathrm{b}}}{\left|\frac{V(\vec{K})}{E}\right|} \quad .$$

Questa componente sinusoidale del coefficiente di riflessione dà origine al cosiddetto effetto di Pendellösung e si giustifica nel modo seguente. Se l'onda del neutrone incidente soddisfa la condizione per la riflessione alla Bragg ($\vec{k} \cdot \vec{K} = \frac{1}{2}|K|^2$) tramite un certo vettore del reticolo reciproco, K_{h} , dopo la riflessione alla Bragg, il neutrone avrà un vettore d'onda $\vec{k}_1 \simeq \vec{k} - \vec{K}_{\mathrm{h}}$. Poiché $\vec{k}_1$ soddisfa la condizione per la riflessione alla Bragg tramite $\vec{K}_{-\mathrm{h}}$, se il neutrone viene riflesso una seconda volta riacquisterà il suo vettore d'onda originale. Così il neutrone tenderà ad essere riflesso avanti e indietro tra $\vec{k}$ e $\vec{k}_1$ sino a che non venga diffuso o assorbito oppure lasci il cristallo. L'effetto della riflessione di Bragg multipla sulla riflessività si può vedere in modo particolarmente chiaro considerando il caso di Laue simmetrico, con $\theta{=}\theta_{\mathrm{b}}$, cosicché $y{=}0$ e si ha:

$$R = \sin^2 A \qquad\qquad T = \cos^2 A$$

Il comportamento oscillatorio di R e T descrive il trasferimento coerente di energia tra due pendoli accoppiati. Per questo motivo questo risultato viene chiamato la soluzione del pendolo (Pendellösung). Si può poi considerare la soluzione delle equazioni della teoria della diffrazione dinamica nel caso specifico delle tre lastre, come è stato fatto da Rauch e Suda [2].

Il fascio uscente nella direzione O è dato dalla sovrapposizione di due fasci: il fascio che ha seguito il percorso I ed è stato prima trasmesso, poi due volte riflesso (ψ_o^{I}), il fascio che ha seguito il percorso II ed è stato prima riflesso, poi ancora riflesso e da ultimo trasmesso (ψ_o^{II}). Analogamente il fascio uscente nella direzione H è dato dalla sovrapposizione di altri due fasci: il fascio che ha seguito il percorso I ed è stato prima trasmesso, poi riflesso e da ultimo trasmesso ($\psi_{\mathrm{h}}^{\mathrm{I}}$); il fascio che ha seguito il percorso II ed è stato riflesso tutte e tre le volte ($\psi_{\mathrm{h}}^{\mathrm{II}}$). Dalla teoria si ottiene per le reciproche relazioni di fase, tra i due raggi uscenti in direzione frontale dietro l'interferometro

$$\frac{\psi_o^{\mathrm{I}}}{\psi_o^{\mathrm{II}}}, \tag{2.5}$$

e per il raggio in direzione di Bragg:

$$\frac{\psi_{\mathrm{h}}^{\mathrm{I}}}{\psi_{\mathrm{h}}^{\mathrm{II}}} = -\frac{1 - \frac{\sin^2(A\sqrt{1+y^2})}{1+y^2}}{\frac{\sin^2(A\sqrt{1+y^2})}{1+y^2}} = -r \tag{2.6}$$

Il risultato $\psi_o^{\mathrm{I}} = \psi_o^{\mathrm{II}}$ si poteva ottenere da considerazioni generali di simmetria notando che i due raggi vengono entrambi una volta trasmessi e due volte riflessi da lastre di cristallo dello stesso spessore. Nel caso dell'interferometro ideale si ha dunque che per il raggio uscente in direzione 0 il rapporto di ampiezza fra le due onde provenienti dai due diversi cammini è sempre 1 ovvero lo sfasamento è nullo. Per il raggio riflesso nella direzione di Bragg si ha invece fra le due componenti un angolo di fase di π ed il rapporto fra le ampiezze mostra una rapida oscillazione di Pendellösung in funzione di y, ovvero della deviazione dall'angolo di Bragg. Dalla sovrapposizione coerente di entrambi i raggi si ottiene quindi l'intensità dietro l'interferometro. Consideriamo il caso del raggio ordinario (ovvero quello indicato con O) lungo il quale si effettuano abitualmente le misurazioni (sull'altro raggio si osserva la figura di intensità complementare):

$$I_o(y) = \left|\psi_o^{\mathrm{I}} + \psi_o^{\mathrm{II}}\right|^2 = 4\left|\psi_o^{\mathrm{I}}\right|^2 \quad .$$

Le grandezze ψ_o^{I} e ψ_o^{II} sono da calcolarsi secondo la teoria della diffrazione dinamica. Questa prevede per il raggio trasmesso da una singola lastra:

$$\frac{|\psi_o|^2}{|\psi_{\mathrm{in}}|^2} = 1 - \frac{\sin^2(A\sqrt{1+y^2})}{1+y^2},$$

mentre per l'onda riflessa alla Bragg si ha:

$$\frac{|\psi_{\mathrm{h}}|^2}{|\psi_{\mathrm{in}}|^2} = \frac{\sin^2(A\sqrt{1+y^2})}{1+y^2} \quad .$$

Si ha allora, ricordando le scritture dei coefficienti di riflessione e trasmissione e operando una media sulle rapide oscillazioni di Pendellösung collegate ai termini in $\sin^2$ che non possono essere risolte sperimentalmente:

$$\frac{\overline{I_o(y)}}{I_{\mathrm{in}}} = \frac{1}{4}\frac{1+6y^2}{(1+y^2)^3}$$

Se θ=θ_{b}, y vale 0 e si ottiene il fattore $\frac{1}{4}$. Applicando lo stesso procedimento di media alla (2.6) otteniamo la più semplice relazione:

$$\frac{\psi_{\mathrm{h}}^{\mathrm{I}}}{\psi_{\mathrm{h}}^{\mathrm{II}}} = -1 \quad . \tag{2.7}$$

Come si è detto all'interno del cristallo perfetto si generano due onde propagantesi verificando la condizione di Bragg, con vettori d'onda solo leggermenti diversi fra loro. A causa dei processi di mutua interferenza sopra accennati si genera una figura di interferenza piuttosto complessa che muta sostanzialmente su una lunghezza caratteristica Δ_o (detta lunghezza di Pendellösung) tipicamente di 50 μm (per neutroni con lunghezza d'onda di 2 Å per riflessione (220) su silicio è di 61 μm). Per preservare le proprietà di coerenza nel passaggio attraverso l'interferometro il campione non deve presentare difetti su una scala di grandezze comparabili a questa. Δ_o è definita come il periodo di Pendellösung per y=0, ovvero θ=$\theta_{\rm b}$, cioè:

$$\sin^2 A = \sin^2 \frac{d}{\Delta_o} \qquad\qquad \Delta_o = \frac{\pi \Omega \cos\theta_{\rm b}}{b_{\rm c}\lambda |F|}$$

Eventuali deviazioni dalla geometria ideale (ad esempio differente spessore delle lastre o distanza fra di esse) possono essere espresse in funzione di questo parametro e provocano forti perdite di visibilità delle frange o modifiche della figura di interferenza qualora siano dell'ordine della lunghezza di Pendellösung. Sfruttando le eccezionali prestazioni dell'interferometro per neutroni a loro disposizione Rauch ed i suoi collaboratori hanno effettuato una magnifica serie di esperimenti tesi a verificare alcuni dei principi basilari della meccanica quantistica quali il principio di sovrapposizione lineare, la periodicità di 4π per gli spinori, la natura ondulatoria della materia.

2.5 Proprietà di coerenza

Supponendo di modificare per un fattore di fase χ l'onda trasmessa lungo il percorso II [3,4] [8], si ha:

$$\psi_o^{\rm II} = e^{i\chi}\psi_o^{\rm I} \quad .$$

Se poi si pensa di misurare l'intensità al rivelatore O, come si è abitualmente fatto per questa serie di esperimenti (si ricordi che le due intensità sono complementari e quindi una delle due misure è sufficiente), si vede in forza delle formule precedentemente introdotte che

$$I_o \propto \left|\psi_o^{\rm I} + \psi_o^{\rm II}\right|^2 = 2|\psi_o|^2(1+\cos\chi) \tag{2.8}$$

Questo fattore di fase si ottiene introducendo lungo un cammino dell'interferometro una sbarretta di un materiale del cui effetto sull'onda incidente si può tenere conto tramite un opportuno indice di rifrazione n, che può essere calcolato con la formula seguente, detta di Goldberger [9]:

$$n = 1 - \frac{\lambda^2 N}{2\pi}\sqrt{b_{\mathrm{c}}^2 - \left(\frac{\sigma_r}{2\lambda}\right)^2} + i\frac{\sigma_r N\lambda}{4\pi}, \tag{2.9}$$

ove N è la densità di particelle del materiale usato per ottenere il cambiamento di fase, b_{c} è la lunghezza di scattering coerente neutrone nucleo, σ_r la sezione d'urto relativa alla reazione, che tiene conto dell'assorbimento e di processi di scattering incoerente ($\sigma_r = \sigma_a + \sigma_{\mathrm{i}}$). Nel nostro caso si è usato dell'alluminio, materiale molto poco assorbente, per cui si ha $\sigma_r \approx 0$ e quindi:

$$n = 1 - \frac{\lambda^2 N b_{\mathrm{c}}}{2\pi} \quad .$$

Lo sfasamento è allora dato, nel caso di onda piana monocromatica, da

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \to \psi(\vec{x})e^{i(n-1)\vec{k}\cdot\vec{D}} = \psi(\vec{x})e^{-iNb_{\mathrm{c}}\lambda D_{\mathrm{eff}}} \equiv \psi(\vec{x})e^{i\vec{\Delta}\cdot\vec{k}} = \psi(\vec{x}+\vec{\Delta}) \tag{2.10}$$

ove $\vec{D} = D\vec{n}$ con $\vec{n}$ normale alla superficie del campione, $\vec{\Delta} = (n-1)\vec{D}$ e D_{eff} è lo spessore di alluminio realmente attraversato. Un modo alternativo e interessante per esprimere questo sfasamento si avvale dell'introduzione di un potenziale ottico così definito:

$$V_{\mathrm{op}} = \frac{2\pi\hbar^2 N b_{\mathrm{c}}}{m},$$

ovvero con la stessa struttura dello pseudo-potenziale di Fermi [5,7]. Si ha allora:

$$\vec{\Delta} = -\frac{1}{2}\vec{D}\frac{V_{\mathrm{op}}}{E},$$

con $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ è l'energia del neutrone incidente. Per effettuare l'esperimento si pone una sbarretta di alluminio nell'interferometro, facendola poi ruotare in modo da ottenere un cambiamento dello spessore di alluminio effettivamente attraversato dai due fasci; in questo modo si riesce a variare lo sfasamento χ, rendendo visibile la figura di interferenza. Per ogni posizione della sbarretta vengono conteggiati i neutroni rivelati in un intervallo di tempo fissato (tipicamente 100 s o più, in funzione dell'intensità del fascio). Questo conteggio viene effettuato per più posizioni del campione. La notevole coerenza ottenuta si manifesta nella possibilità di raggiungere ordini di interferenza molto elevati (n=300 e più). A ordini molto alti si ha una certa perdita di visibilità nella figura di interferenza dovuta alla larghezza finita della banda di lunghezze d'onda [10–13]. In generale l'ensemble statistico di neutroni è descrivibile da una opportuna miscela statistica (matrice densità) ϱ. Nel caso in esame la distribuzione dei momenti del fascio incidente era abbastanza ben descritta dalla somma di due gaussiane centrate su due valori del momento scelti opportunamente [11]. Per considerare il caso più semplice pensiamo ad una singola distribuzione gaussiana centrata in $\vec{p}_o$, ovvero (considerando il pacchetto a minima indeterminazione si ha $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$):

$$\psi(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{p}\, a(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}_o)} =$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\vec{x}-\vec{x}_o)^2 + \frac{i}{\hbar}\vec{p}_o\cdot(\vec{x}-\vec{x}_o)\right), \tag{2.11}$$

ove

$$a(\vec{p}) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma_p^2}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\vec{p}-\vec{p}_o)^2\right),$$

e il momento dei neutroni è determinato con notevole precisione ($\sigma_p \approx 10^{-21} g \frac{cm}{s}$). In questo caso, come si era visto nella (2.10), l'introduzione di uno sfasamento equivale ad una traslazione nelle coordinate:

$$\psi(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{p}\, a(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}_o)} \to \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{p}\, a(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}_o)} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{\Delta}} = \psi(\vec{x}+\vec{\Delta}) \quad .$$

Possiamo a questo punto considerare, in analogia a quanto si fa abitualmente in ottica, la seguente funzione di autocorrelazione:

$$\Gamma(\vec{\Delta}) = \langle \psi(\vec{x})\psi(\vec{x}+\vec{\Delta})\rangle,$$

ottenendo così per la figura di interferenza la seguente modulazione [13](si confronti anche la (7.13)):

$$I(\vec{\Delta}) \propto 1 + \left|\Gamma(\vec{\Delta})\right| \cos(\frac{\vec{\Delta}\cdot\vec{p}_o}{\hbar}) = 1 + e^{-\frac{|\vec{\Delta}|^2\sigma_p^2}{2\hbar^2}} \cos(\frac{\vec{\Delta}\cdot\vec{p}_o}{\hbar}) \quad .$$

Ricordiamo che nell'interferometro passa un solo neutrone per volta.

2.6 Simmetria 4π per gli spinori

Tenendo conto dello spin della particella è stata anche verificata la simmetria di 4π della funzione d'onda [3,4]. A causa dell'accoppiamento fra momento magnetico del neutrone e campo magnetico $\vec{B}$ ($H = \vec{\mu}\cdot\vec{B}$), se la particella propaga attraverso un campo magnetico $\vec{B}$ si ha la relazione:

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_o = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\mu}\cdot\vec{B}t}\psi_o = e^{-i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\alpha}}{2}}\psi_o$$

che formalmente descrive una rotazione attorno al campo magnetico con angolo uguale all'angolo di precessione di Larmor:

$$|\alpha| = \frac{2\mu}{\hbar}\int B\ dt \qquad\qquad \vec{\mu} = \mu\vec{\sigma}$$

Dalle scritture precedenti si ha la caratteristica simmetria di 4π per la funzione d'onda:

$$\psi(4\pi) = \psi(0) \qquad\qquad \psi(2\pi) = -\psi(0)$$

e di 2π per i valori di aspettazione:

$$|\psi(2\pi)|^2 = |\psi(0)|^2 \quad .$$

Per quello che riguarda l'intensità attesa si ha:

$$I_o \propto |\psi(0) + \psi(\alpha)|^2 = 2|\psi(0)|^2\left(1 + \cos\frac{\alpha}{2}\right)$$

e questa formula è stata verificata trovando per il valore del fattore di periodicità $\alpha = 715.87 \pm 3.8$deg. Il fatto poi che questo esperimento si sia potuto effettuare con successo usando fasci di neutroni sia polarizzati che non polarizzati mostra nuovamente le proprietà di autointerferenza di questo tipo di esperimenti.

2.7 Sovrapposizione lineare degli spin

Per verificare su scala macroscopica la legge di sovrapposizione lineare degli spin un fascio di neutroni polarizzato viene diviso coerentemente sulla prima lastra dell'interferometro e la direzione di polarizzazione lungo uno dei fasci viene poi invertita, col risultato che alla terza lastra si ha la sovrapposizione coerente di due fasci aventi stati di polarizzazione "$+z$" e "$-z$" che danno quindi un fascio risultante polarizzato nel piano xy [3,4]. Si realizza così un esperimento analogo a quello ipotizzato da Wigner nel 1963, in un suo articolo sulla teoria della misura [14]. Come visto precedentemente facendo attraversare ai neutroni un campo magnetico ed uno spessore di alluminio la loro funzione d'onda muta nel modo seguente:

$$\psi(\chi, \alpha) = e^{i\chi} e^{-i\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\alpha}}{2}} \psi(0,0),$$

e nel caso di una rotazione di Larmor di 180 gradi attorno all'asse y ($\vec{\alpha} = \pi\vec{y}$):

$$\psi(\chi, \alpha) = e^{i\chi} e^{-i\sigma_y \frac{\pi}{2}} |z\rangle = e^{i\chi} |-z\rangle \quad .$$

Le due funzioni d'onda con direzioni dello spin opposte si sovrappongono sulla terza lastra dando il seguente risultato:

$$\psi \propto (|z\rangle + e^{i\chi}|-z\rangle) \quad .$$

Il risultato finale per la polarizzazione del neutrone uscente è dunque

$$\vec{P} = \frac{\langle\psi|\vec{\sigma}|\psi\rangle}{I_o} = \begin{pmatrix} \cos\chi \\ \sin\chi \\ 0 \end{pmatrix}$$

ovvero lo spin della particella giace nel piano xy; è quindi perpendicolare ad entrambi gli stati di polarizzazione precedenti la sovrapposizione e può essere ruotato all'interno di questo piano mutando la variazione di fase nucleare. Anche questo esperimento rappresenta una semplice ma convincente verifica della legge quantomeccanica di sovrapposizione lineare.

2.8 Assorbitore statico e dipendente dal tempo

Un'altra serie particolarmente interessante di esperimenti, su cui si concentrerà in modo particolare la nostra attenzione, è stata eseguita inserendo più tipi di assorbitore lungo uno dei due percorsi dell'interferometro e studiando l'effetto di questi sulla figura di interferenza registrata in uscita [4,8] [15,16]. Il motivo per cui ci concentriamo su questo tipo di esperimenti è una leggera discrepanza fra risultati sperimentali e previsioni teoriche, che ha dato adito a molti lavori che leggono in questa discrepanza una vera e propria carenza della meccanica quantistica. Cercheremo di chiarire questo punto più tardi e ci accontentiamo ora di descrivere l'esperimento.

Supponiamo di porre un materiale solo parzialmente trasparente lungo uno dei due tragitti. In questo caso l'indice di rifrazione dato dalla formula di Goldberger prima introdotta contiene una parte complessa che non va più trascurata e che porge un fattore di assorbimento della forma:

$$a = \frac{I}{I_o} = \exp(-\sigma N D),$$

in modo tale che la funzione d'onda subisca la modifica seguente:

$$\psi \rightarrow e^{i\chi} e^{-\frac{\sigma N D}{2}} \psi_o = e^{i\chi} \sqrt{a} \psi_o \quad .$$

La modulazione dell'intensità dietro l'interferometro è dunque data da:

$$I_o \propto \left|\psi_o^{\mathrm{I}} + \psi_o^{\mathrm{II}}\right|^2 \propto \left|\psi_o^{\mathrm{I}}\right|^2 \left[(1+a) + 2\sqrt{a} \cos\chi\right] ,$$

ovvero l'ampiezza delle frange di interferenza è modulata da un fattore $\sqrt{a}$. Come assorbitore sono stati usati fogli di oro e indio dello spessore di 1 mm in numero variabile da 1 a 5, ottenendo una variazione della probabilità di trasmissione a tra il 48% e lo 0,9%. La determinazione di a è stata effettuata bloccando uno dei due fasci e misurando l'intensità proveniente dall'altro con e senza l'assorbitore. Per variare la fase ed ottenere così la figura di interferenza si è usato al solito una sbarretta di alluminio. Nel valutare la variazione della figura di interferenza si è anche dovuto tener conto della riduzione del contrasto dovuta alla dipendenza della variazione di fase nel materiale assorbente dalla lunghezza d'onda e della lunghezza finita dei pacchetti d'onde. Questo ha comportato solo una piccola correzione per le misure con l'indio, ma è stato più rilevante per l'oro. È stato poi anche utilizzato un assorbitore meccanico costituito da un disco di cadmio dentato rotante di circa 70 mm di diametro ed 1 mm di spessore. Il disco viene fatto ruotare con una frequenza piuttosto bassa, attorno ai 4-8 Hz. Benché il disco ruoti entro un contenitore di alluminio, frequenze di rivoluzione più elevate porterebbero a vibrazioni troppo sostenute, compromettenti il bilanciamento dell'interferometro. Nella posizione di chiusura la probabilità di assorbimento è non inferiore al 99,99%. I tempi di conteggio per ogni rilevazione erano multipli interi della frequenza di rivoluzione del disco. Nel caso di questo assorbitore statico la cui trasparenza varia nel tempo in funzione della frequenza di rivoluzione la probabilità di trasmissione è data dal rapporto fra il tempo in cui il fascio passa indisturbato (tempo di apertura) ed il tempo totale, ovvero:

$$a = \frac{t_{\text{aperto}}}{t_{\text{aperto}} + t_{\text{chiuso}}},$$

ed anche in questo caso a è stato misurato bloccando l'altro fascio e rilevando il rapporto delle intensità con e senza il disco. Sono stati usati diversi dischi con trasmissione del 25%, 50% e 75%. Per quello che riguarda la modulazione di ampiezza si ottiene:

$$I \propto \left[(1-a)\left|\psi_o^{\text{II}}\right|^2 + a\left|\psi_o^{\text{I}} + \psi_o^{\text{II}}\right|^2\right] \propto \left|\psi_o^{\text{I}}\right|^2 \left[(1+a) + 2a\cos\chi\right] \quad .$$

Si nota quindi subito che la figura di interferenza è modulata da un fattore a. A parità di coefficiente di assorbimento, e dunque a parità di neutroni assorbiti, si ha

Ampiezze di interferenza normalizzate per assorbimento stocastico e deterministico.

che la figura di interferenza nel caso di assorbitore stocastico (ovvero una sostanza quale oro o indio) è modulato da un fattore $\sqrt{a}$, mentre nel caso di assorbitore statico dipendente dal tempo compare un fattore a.

Questa differenza è particolarmente evidente in figura, dove il risultato ottenuto eseguendo misure con i due diversi tipi di assorbitore a parità di coefficiente di trasmissione è illustrato. La differenza fra i due risultati diventa particolarmente evidente a basse probabilità di trasmissione, come si può vedere anche dal rapporto delle visibilità nei due casi ($V = (I_{\mathrm{M}} - I_{\mathrm{m}})/(I_{\mathrm{M}} + I_{\mathrm{m}})$):

$$\frac{V_{\mathrm{stocastico}}}{V_{\mathrm{deterministico}}} = \frac{1}{\sqrt{a}} \quad .$$

Per comprendere come la differente ampiezza delle figure di interferenza a parità di neutroni assorbiti bisogna pensare al diverso tipo di informazioni disponibili nei due esperimenti. Nel caso dell'assorbitore rotante ideale due cose possono essere affermate con certezza: o i neutroni incidenti hanno incontrato l'interferometro libero, oppure uno dei due possibili tragitti era bloccato. In effetti si può vedere l'esperimento come la somma di due esperimenti distinti, effettuati uno dopo l'altro nel tempo, in rapida successione. Nel caso dell'assorbitore stocastico statico non è invece nemmeno in linea di principio possibile sapere, nell'ambito della meccanica quantistica, se un neutrone sarà assorbito dal nucleo oppure no. Tutto ciò che si può affermare è che la funzione d'onda della particella ha propagato con diverse ampiezze lungo i cammini destro e sinistro. Si potrebbe pensare che, se al disco rotante con frequenza di rivoluzione costante si sostituisse un assorbitore (con $a = 0$) inseribile casualmente, controllato ad esempio da una sorgente radioattiva, la maggior quantità di informazione che prima si aveva nel caso deterministico andrebbe persa. Non è però così, come si vede dalla formula che descrive la figura di interferenza, poiché anche se la presenza dell'assorbitore lungo il fascio non può essere predetta, la certezza che la particella venga assorbita in caso di presenza dell'assorbitore permane. Volendo evidenziare le due diverse caratteristiche degli assorbitori si può tracciare un grafico come quello seguente, in cui in ascissa è indicata la probabilità di trasmissione a ed in ordinata l'ampiezza della figura di interferenza normalizzata all'ampiezza della figura di interferenza ad interferometro vuoto (misurazione ripetuta ogni volta per tener conto delle piccole differenze sperimentali, come ad esempio il fatto che il fascio incide nei diversi esperimenti su parti differenti delle lastre dell'interferometro e la sua sezione può mutare di volta in volta). Questa differente dipendenza dell'ampiezza della figura di interferenza dal valore di a è particolarmente sorprendente per valori molto piccoli di a. Nel caso di assorbitore stocastico, per a=0,01 l'ampiezza della figura di interferenza è ancora il 10% di quella senza assorbitore. Rauch ha quindi condotto un'altra serie di esperimenti con campioni molto assorbenti. In particolare sono stati utilizzati soluzioni di gadolinio in acqua, racchiuse entro contenitori di quarzo, per avere un assorbimento sufficientemente forte, evitando però grossi sfasamenti che avrebbero causato perdite di coerenza (a=0,0046). In questo caso si è verificato uno scostamento dalle previsioni teoriche, poiché i dati giacciono lievemente sotto la curva $\sqrt{a}$. Questo scostamento imprevisto è stato oggetto, come si è detto, di una serie di speculazioni teoriche sulla validità della usuale teoria della misura in meccanica quantistica, anche se non si possono certo escludere, come argomenta lo stesso Rauch, errori sperimentali. È notevole il fatto che, se invece di un assorbitore per ridurre la probabilità di trasmissione si sfrutta la riflessione alla Bragg da un cristallo perfetto di silicio inserito nell'interferometro, anche per valori bassissimi di

a i dati sperimentali sono in accordo con le previsioni teoriche (a=0,000325).

Capitolo 3

Esperimenti di assorbimento e fondamenti di meccanica quantistica

3.1 Interferometria di neutroni come spunto per una verifica della teoria della misura in meccanica quantistica

I recenti esperimenti del gruppo di Vienna [3,4] [8] eseguiti nell'ambito della interferometria di neutroni hanno dato l'occasione ad un gruppo di fisici teorici, fra cui, in prima linea, M. Namiki e S. Pascazio, di *riaprire* il mai risolto problema della teoria della misura in meccanica quantistica. Namiki ed altri avevano infatti proposto negli anni ottanta una *nuova* teoria della misura in meccanica quantistica [17–19], e l'esito di questi esperimenti ha dato loro l'occasione di argomentare in favore di questa e a scapito della tradizionale teoria di von Neumann, anche se su questo punto vi sono non poche controversie [20]. La tradizionale interpretazione di Copenhagen del problema della misura si basa sul concetto di collasso del pacchetto d'onda introdotto da von Neumann [21]. In questa prospettiva per effettuare una misura è necessaria la presenza di un osservatore esterno. Questo fa sì che la teoria quantistica non sia di per sé chiusa e autosufficiente, le misurazioni sono necessariamente descritte in ambito classico. Più tentativi sono stati fatti per mutare questo stato di cose e cercare di descrivere il collasso del pacchetto d'onda in termini della meccanica quantistica stessa, senza far ricorso ad un osservatore esterno classicamente descritto. Si eviterebbe così un'ulteriore dualità all'interno della teoria, ammettendo per la funzione d'onda la sola evoluzione unitaria secondo l'equazione di Schrödinger e non anche l'evoluzione discontinua dovuta al processo di misurazione. Diciamo ulteriore poiché un'altra questione spinosa in meccanica quantistica, almeno da un punto di vista intuitivo, è la duplice caratterizzazione ondulatoria e particellare di alcune realtà microfisiche [14].

3.2 La teoria dei molti spazi di Hilbert come potenziale antagonista della teoria della misura di von Neumann

L'idea di fondo della teoria dei molti spazi di Hilbert di Namiki è mostrare che la riduzione della funzione d'onda avviene come conseguenza della interazione fra essa e l'apparato di misura, qualora entrambi i sistemi vengano *opportunamente descritti* nell'ambito della meccanica quantistica, tenendo conto degli sfasamenti casuali che la struttura macroscopica dell'apparato di misura inevitabilmente introduce. Abbiamo messo in corsivo le parole *opportunamente descritti* poiché di fatto la teoria di Namiki si discosta dalla usuale teoria della meccanica quantistica non solo per quello che riguarda gli aspetti di teoria della misura, ma muta anche l'ambiente matematico in cui gli oggetti macroscopici vengono descritti.

Per chiarire lo spirito di questa teoria si consideri il seguente esempio [22]. In un esperimento del tipo Stern e Gerlach un fascio viene diviso in due sottofasci da un'apparecchiatura, e viene poi rivelato solo se transita lungo uno dei due possibili tracciati, poiché solo lungo uno dei due tragitti è presente un rivelatore. Lo stato della particella è comunque noto anche se la misura può avvenire in due modi: per coincidenza o anticoincidenza (la particella viene emessa e viene poi segnalata dal rivelatore; la particella viene emessa e dopo un certo tempo non è ancora stata rivelata, ovvero ha seguito l'altro percorso). È questo un esempio di esperimento a risultato negativo. Se pensiamo poi di far fuoriuscire i due fasci da due fessure per misurarne la figura di interferenza su uno schermo, in accordo con la teoria di von Neumann che prevede il collasso del pacchetto d'onda, ci aspettiamo di non osservare alcuna figura di interferenza come in effetti accade. La distribuzione di probabilità che ci si aspetta descrivente la distribuzione di particelle sullo schermo è data da:

$$|\psi_1|^2 + |\psi_2'|^2 = P_1 + P_2$$

ove ψ_2' indica la funzione d'onda dopo che ha interagito con l'apparecchio di misura ed è stata quindi leggermente modificata. Namiki prevede lo stesso risultato argomentando però che esso viene da una media effettuata su tutte le particelle, ognuna delle quali aveva ricevuto dall'apparecchio uno sfasamento casuale, per cui si ha:

$$\sum_{\text{accumulazione}} \mathrm{Re}(\psi_1^* \psi_2') = 0$$

Il collasso del pacchetto d'onda non è quindi un avvenimento che avviene in ogni singolo processo di misura, ma una conseguenza del dover effettuare una inevitabile media, poiché le previsioni della meccanica quantistica sono probabilistiche e non applicabili, almeno a livello di verifica sperimentale, alla singola particella. Gli autori sopra citati riconoscono che la meccanica quantistica fornisca solo delle probabilità e che quindi il confronto sperimentale avvenga solo sulla ripetizione degli eventi, ma sembrano affermare o intendere che ad ogni evento o singola misura sia sensato associare una funzione d'onda, come se questa fosse associata alla particella ed al singolo evento, piuttosto che alla ripetizione, in condizioni macroscopicamente uguali, dell'esperimento. Anche dal punto di vista della meccanica quantistica ortodossa la scomparsa della figura di interferenza si verifica solo nella ripetizione degli eventi, ma è l'intero ensemble statistico di queste ripetizioni che viene descritto dalla matrice densità o, nel caso di stato puro, dalla funzione d'onda.

Vediamo ora più in dettaglio come si articola questa teoria proposta da Namiki, cominciando dall'esporre gli asserti fondamentali della teoria di von Neumann. Si supponga di avere un sistema in uno stato $|u\rangle$. Un apparecchio di misura adatto per questa sistema sarà caratterizzato da un'osservabile i cui autostati sono in corrispondenza 1 ad 1 con quelli del sistema. Sia esso descritto da $|\psi\rangle$. Se il sistema è nello stato $|u_i\rangle$ l'effetto della misura può essere descritto dalla sequenza

$$|u_i\rangle \otimes |\psi\rangle \rightarrow |u_i\rangle \otimes |\psi_i\rangle$$

ovvero, se il sistema era in uno stato dato dalla sovrapposizione lineare di più altri:

$$\sum_i c_i |u_i\rangle \otimes |\psi\rangle \rightarrow \sum_i c_i |u_i\rangle \otimes |\psi_i\rangle$$

poiché si assume che la legge di sovrapposizione lineare degli stati sia sempre valida. Secondo von Neumann il principio di sovrapposizione è sempre valido, in ogni possibile processo di misura [14], e quindi il collasso del pacchetto, con l'associata scomparsa dei termini di interferenza, si può verificare solo in connessione con l'intervento dell'osservatore esterno o *abstraktes Ich*, che interrompe la catena determinando l'acquisizione dell'informazione sull'effettivo stato del sistema. Questo è anche connesso al fatto che un sistema in un stato puro non può evolvere in una miscela statistica tramite trasformazioni unitarie. Secondo Namiki e Machida [23,24] l'ipotesi secondo cui l'apparecchio di misura sarebbe descrivibile da un osservabile in uno spazio di Hilbert è insostenibile proprio per la struttura macroscopica dell'apparato di misura stesso. Quella di von Neumann sarebbe solo un'utile ed efficace ricetta per descrivere i risultati, e non reggerebbe però a prove più severe, come quelle cui la raffinatezza degli esperimenti del gruppo di Vienna sottopone ogni teoria della misura [25,26]. Secondo Namiki il sistema interagisce con un sottosistema locale dell'apparato di misura (ad esempio singoli granelli all'interno dell'emulsione fotografica) che è ancora un sistema macroscopico di taglia finita, piccolo macroscopicamente, ma grande su scala microscopica. Per descrivere la interazione fra la particella o in generale il sistema e questo sottosistema dell'apparato di misura è necessario applicare la teoria dello scattering e descrivere tutto il processo tramite una matrice S che porga l'evoluzione unitaria e non acausale e probabilistica del sistema. La variabile di stato macroscopica che si associa al sistema di misura e si rileva in ogni misurazione non può essere considerata autovalore di una osservabile quantomeccanica, ma è piuttosto da considerarsi una sorta di media su variabili microscopiche che associo al sistema. Il procedimento di media produce una trasformazione dalla scala microscopica a quella macroscopica, permettendo così di introdurre la nozione di *sistema macroscopico in meccanica quantistica.* Prima di considerare un esempio che meglio illustri la teoria vediamo alcune differenze fra questa teoria dei molti spazi di Hilbert e il punto di vista detto dell'amplificazione ergodica, formulato ad esempio nel famoso lavoro di Daneri, Loinger e Prosperi [27]. Sfruttando la teoria statistica dinamica standard questi autori mostrano come il problema della misurazione sia analogo al problema dell'evoluzione di un corpo macroscopico verso il suo stato di equilibrio, ovvero al problema ergodico. L'interazione fra microsistema e rivelatore (si pensi alla rivelazione di una particella in camera a bolle) è descritto e interpretato come un processo termico irreversibile. È questo processo irreversibile che determina la riduzione del pacchetto d'onda, che diventa così un fenomeno spiegabile all'interno della meccanica quantistica. Su questa base, argomenta però Namiki, non è possibile spiegare gli esperimenti detti a risultato negativo, ove l'informazione certa sullo stato della particella, e quindi il collasso della funzione d'onda, avviene senza che la particella interagisca col rivelatore (si pensi all'esperimento alla Stern e Gerlach sopra descritto). Si potrebbe pensare che se la particella non interagisce col rivelatore, anche nel caso della teoria dei molti spazi di Hilbert il fattore di fase casuale, necessario per spiegare la scomparsa dei termini di interferenza , non possa venire introdotto. Namiki argomenta però che la funzione d'onda della particella interagisce comunque col rivelatore, anche se la particella procede lungo un altro cammino, e questa *inter-*

azione fra la funzione d'onda e il rivelatore introduce gli sfasamenti. Il collasso della funzione d'onda è dunque conseguenza di una interazione, ma non necessariamente di un processo termico irreversibile. Anche in questo caso si può essere scettici sulla proposta di Namiki , poiché la meccanica quantistica non attribuisce realtà fisica alla funzione d'onda, la quale non può pertanto interagire sensu strictu. È il microsistema che può interagire, mentre la funzione d'onda, definita come soluzione dell'equazione di Schrödinger con le opportune condizioni al contorno, fornisce la probabilità per i vari esiti della interazione e fornisce previsioni verificabili solo ripetendo più volte l'esperimento. Un'altra importante caratteristica dell'apparato di misura, agli occhi di Namiki, è il fatto che i suoi sistemi locali sono ancora macroscopici e di conseguenza non hanno un'energia ed un numero di particelle ben definito. Ogni sistema locale andrebbe quindi descritto da un operatore statistico della forma [23]:

$$\hat{\varrho} = \sum_{N \in I(N_o;\Delta N)} W_N \hat{\varrho}_N$$

$$\hat{\varrho}_N = \sum_{i=1}^{N} w_i^N |\phi_i^N\rangle\langle\phi_i^N|$$

ove $I(N_o;\Delta N)$ indica un intervallo con ampiezza ΔN attorno N_o, W indica un fattore peso normalizzato (negli esempi fatti dagli autori è perlopiù dato da una distribuzione gaussiana), $|\phi_i^N\rangle$ indica l'ennesimo autostato dell'hamiltoniano H per il sistema ad N particelle e w_i^N il fattore di Boltzmann. Nel limite $N_o \to \infty$ possiano rimpiazzare la somma con un integrale ed ottenere:

$$\hat{\sigma} = \lim_{N_o \to \infty} \hat{\varrho} = \vec{r} dl\, W(l)\hat{\varrho}(l) = \mathcal{M}\hat{\varrho}(l)$$

ove $l = aN$ è il parametro che dà la dimensione del sistema locale (es. N granuli di emulsione di dimensione a), $W(l)$ la funzione peso, piccata attorno $l = aN_o$ con larghezza $\Delta L \approx a\Delta N$, $\hat{\varrho}(l)$ è l'operatore statistico per un sistema locale con dimensione l, $\mathcal{M}$ rappresenta simbolicamente l'operazione di media. Il procedimento di media sull'operatore statistico non è altro che la formulazione matematica della natura macroscopica dell'apparato che si intende introdurre nella teoria della misura stessa. Come concedono gli stessi autori lo si può considerare come un nuovo postulato per l'introduzione dei sistemi macroscopici in meccanica quantistica. Come ad ogni sistema quantistico si può associare un operatore statistico avente determinate caratteristiche, così a quei particolari sistemi, che sono i sistemi macroscopici, intervenenti in modo essenziale nell'esecuzione di misure, si deve associare un operatore statistico ottenuto effettuando una media del tipo sopra indicato. Questo significa che l'operatore statistico e le *osservabili* associate a sistemi macroscopici non possono essere descritte in un singolo spazio di Hilbert, ma in uno spazio di Hilbert più grande dato dalla somma diretta e dall'integrale diretto di spazi di Hilbert [24]:

$$H = \sum_{\mathrm{i}} \oplus H_{\mathrm{i}} \oplus \int d\mu(\alpha)\, H(\alpha)$$

ove stati e operatori statistici hanno la seguente forma:

$$\psi = \sum_{\mathrm{i}} \oplus \psi_{\mathrm{i}} \oplus \int d\mu(\alpha)\, \psi(\alpha)$$

$$\hat{\varrho} = \sum_{\mathrm{i}} \oplus \hat{\varrho}_{\mathrm{i}} \oplus \int d\mu(\alpha)\, \hat{\varrho}(\alpha)$$

La riduzione del pacchetto d'onda è in generale conseguenza di questa media sui molti spazi che porta, per quello che riguarda i termini di interferenza, a integrali delle forma [23,24]:

$$\vec{r}dl\, W(l) e^{-\frac{i}{\hbar}pl} \ldots$$

ove i puntini possono indicare una qualche funzione che varia molto lentamente in funzione di l. Questo integrale risulta nullo per il teorema di Riemann-Lebesgue nell'ipotesi $p \gg \mathit{\Delta} P = \frac{\hbar}{\mathit{\Delta} L}$, ove $\mathit{\Delta} P$ e $\mathit{\Delta} L$ sono le incertezze relative rispettivamente al momento ed alla posizione dell'apparato macroscopico. L'ipotesi risulta quindi una sorta di condizione che ci dice se l'apparecchio preso in considerazione è o non è un buon apparato di misura che determinerà il collasso del pacchetto d'onda. L'operazione di media sui molti spazi di Hilbert serve anche a svincolarsi dalla restrizione altrimenti imposta dal fatto che in un singolo spazio di Hilbert uno stato puro non può diventare, tramite evoluzione unitaria, una miscela statistica. Se infatti rimuoviamo il procedimento di media $\mathcal{M} \equiv \int dlW(l)$ o poniamo $W(l) = \delta(l - l_o)$ non otteniamo più la riduzione del pacchetto d'onda poiché il lemma di Riemann-Lebesgue non è più valido ed è come tornare al caso di un singolo spazio di Hilbert. Per chiarire questo discorso si consideri il seguente esempio [17]. Uno specchio perfetto sia posto su di un carrellino che scorre su una rotaia, fissata ad esso una freccetta indichi su una riga lo spostamento dell'apparato. Una particella a energia sufficientemente alta incidente sul carrello subirà un urto elastico con lo specchio che, supponendo la massa del carrello molto maggiore di quella della particella, avrà come risultato $p' = -p$ e $P' = 2p$, ove p è il momento della particella prima dell'urto, p' il suo momento dopo l'urto, P il momento del carrello prima dell'urto, P' dopo l'urto. Namiki pensa di descrivere il centro di massa del sistema carrello + specchio tramite un pacchetto gaussiano centrato attorno a P e X indicato con $|P, X\rangle$. La posizione del centro di massa va però identificata con quella della freccetta sulla riga, che, essendo un punto macroscopico, non può essere ben definito a livello microscopico. Possiamo quindi assegnarle un valore microscopico, cioè esatto, solo a patto di introdurre una certa distribuzione statistica attorno ad esso, compiendo così quell'operazione di media che permette il passaggio da microscopico a macroscopico. Il centro di massa macroscopico è dunque da rappresentarsi tramite l'operatore statistico

$$\hat{\varrho}_{\mathrm{cm}}(P, X) = \vec{r} dX_o \ |P, X_o\rangle W(X_o - X) \langle P, X_o|$$

ove $W(X - X_o)$ è la funzione peso normalizzata che assumiamo data da una gaussiana centrata in X. Lo stato interno del sistema carrello + specchio verrà descritto in uno spazio di Hilbert che indichiamo con $\mathcal{H}(D)$ dipendente dallo spessore D dello specchio; vi è dunque corrispondenza 1 ad 1 fra i possibili valori di D che corrispondono alla precisazione della condizione al contorno e i diversi $\mathcal{H}(\mathcal{D})$. In questo spazio di Hilbert risolviamo il problema agli autovalori per la Hamiltoniana descrivente i gradi interni di libertà del sistema carrello + specchio, specificato dallo spessore D dello specchio:

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} |n, D\rangle = E^n_{\mathrm{int}} |n, D\rangle \tag{3.1}$$

Possiamo ora associare allo stato interno del sistema un operatore statistico della forma:

$$\hat{\sigma}_{\rm int}(d) = \vec{r}dD\, W(D-d)\hat{\varrho}_{\rm int}(D), \tag{3.2}$$

con

$$\hat{\varrho}_{\rm int}(D) = \sum_n w_n |n, D\rangle\langle n, D|, \tag{3.3}$$

ove $W(D-d)$ è un'altra gaussiana centrata sul valore macroscopico d con una larghezza microscopica δD, i vettori $|n, D\rangle$ sono gli autostati della Hamiltoniana descrivente i gradi interni di libertà ricavati nella (3.1). È ora abbastanza chiaro il significato delle (3.2) ed (3.3): l'apparecchio di misura è descritto da un operatore statistico dipendente da variabili macroscopiche (nel nostro caso X e d)introdotte attraverso uno sorta di processo di media. Il significato matematico della formula:

$$\hat{\sigma}_{\rm int}(d) = \vec{r}dD\, W(D-d) \sum_n w_n |n, D\rangle\langle n, D|$$

è quello di procedura di media su un gran numero di spazi di Hilbert, parametrizzati tramite D.

3.3 Applicazione della teoria dei molti spazi di Hilbert agli esperimenti di interferometria di neutroni

Le discrepanze che il gruppo di Vienna ha riscontrato fra dati sperimentali e previsioni teoriche nel caso di figure di interferenza di neutroni che avessero attraversato un forte assorbitore sono state interpretate da Namiki e Pascazio come prove a favore della teoria dei molti spazi di Hilbert. Quest'ultima, a differenza della teoria di von Neumann, dovrebbe essere in grado di dare ragione di queste discrepanze fra teoria ed esperimento proprio perché tiene conto della struttura macroscopica dell'assorbitore, o almeno così sostengono i promotori della teoria stessa. In quest'ottica Namiki e Pascazio hanno pubblicato parecchi lavori tutti però riconducibili al tentativo di introdurre una certa fluttuazione nel coefficiente di assorbimento, che determini la riduzione della figura di interferenza nel caso di forte assorbimento. Il problema viene impostato da Namiki e Pascazio nel seguente modo. Il pacchetto di neutroni incidente attraversa una sostanza che modifica la funzione d'onda solo per un fattore di fase, diciamo χ, e attraversa poi l'assorbitore che può essere descritto da un coefficiente di trasmissione T, che è in generale un numero complesso, cosicché, mentre uno dei due fasci, diciamo ψ, procede indisturbato, l'altro viene modificato in $e^{i\chi}T\psi$. La figura di interferenza viene così modificata:

$$I \propto \left|\psi + e^{i\chi}T\psi\right|^2 = 1 + |T|^2 + 2\mathrm{Re}(Te^{i\chi}) =$$

$$= 1 + t + 2\sqrt{t}\cos(\alpha + \chi), \tag{3.4}$$

ove si è posto $T = |T|e^{i\alpha}$, $t = |T|^2$ ovvero probabilità di trasmissione, ottenendo per la visibilità la formula seguente:

$$V = \frac{I_{\mathrm{M}} - I_{\mathrm{m}}}{I_{\mathrm{M}} + I_{\mathrm{m}}} = \frac{2\sqrt{t}}{1+t} \quad .$$

Prima di procedere ci preme rilevare che queste formule che abbiamo fedelmente riportato dagli articoli di Namiki, Pascazio e Rauch non sono del tutto chiare ed hanno piu che altro un valore simbolico, poiché ad esempio nella (3.4) la funzione d'onda andrebbe esplicitata ed il segno di uguaglianza prende significato se si pensa di compiere una integrazione rispetto alla variabile spaziale da cui dipende la funzione d'onda nella rappresentazione delle coordinate. Nel Capitolo 7 abbiamo riscritto queste formule in maniera più precisa e significativa (si confronti in particolare la (7.13)). Restando per ora nel formalismo usato da Namiki e Pascazio abbiamo che la correzione a queste formule di meccanica quantistica viene dal pensare, in accordo con la filosofia della teoria dei molti spazi di Hilbert, che ogni neutrone incidente incontri in realtà una diversa parte dell'assorbitore. Benché lo stato macroscopico dell'assorbitore sia ben definito e caratterizzabile da un unico parametro quale il coefficiente di trasmissione, lo stato microscopico con cui ogni singolo neutrone interagisce è diverso, ad esempio a causa della larghezza laterale finita del fascio oppure delle disomogeneità nell'assorbitore liquido di gadolinio. Ad ogni neutrone corrisponderà allora un diverso coefficiente di trasmissione, diciamo T_j per il neutrone j-esimo, e le uniche quantità significative a livello sperimentale saranno:

$$\overline{T} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} T_j \qquad \overline{|T|^2} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} |T_j|^2 \quad .$$

Identifichiamo ora T con t, ovvero la probabilità di trasmissione effettivamente misurata quando viene chiuso uno dei due percorsi dell'interferometro ed il neutrone è costretto a passare attraverso l'assorbitore. Si ha dunque:

$$\left|\overline{T}\right|^2 \leq \overline{|T|^2} = t$$

e ponendo $\left|\overline{T}\right|^2 = t(1-\epsilon)$ introduciamo un parametro, ϵ, che chiameremo parametro di decoerenza e che può variare fra 0 ed 1. Si può allora scrivere:

$$\epsilon = 1 - \frac{\left|\overline{T}\right|^2}{t} \quad .$$

Per l'intensità e la visibilità otteniamo ora:

$$I' \propto 1 + \overline{|T|^2} + 2\mathrm{Re}(\overline{T}e^{i\chi}) = 1 + t + 2\sqrt{t}\sqrt{1-\epsilon}\cos(\alpha+\chi)$$

$$V' = \frac{2\sqrt{t(1-\epsilon)}}{1+t} = V\sqrt{1-\epsilon}$$

da cui si vede chiaramente che per ϵ=1 la figura di interferenza scompare, ed in generale risulta inferiore a quella prevista dalla meccanica quantistica usuale. Si tratta ora, perché l'ipotesi introdotta prenda significato, di fornire qualche stima, se possibile quantitativamente precisa, per questo nuovo parametro, in modo da poter verificare sperimentalmente questa correzione. A questo proposito i nostri autori hanno proposto due approcci, l'uno a livello fondamentale, l'altro a livello fenomenologico. Nel primo caso [25] si riscrive il coefficiente di trasmissione nella forma T=$T_o(1+\Delta)$, ottenendo una espressione per ϵ in funzione di Δ e del suo scarto quadratico medio. Una stima di Δ viene data a livello perturbativo introducendo una Hamiltoniana di interazione in cui compare lo pseudo-potenziale di Fermi e la funzione densità delle particelle del mezzo. La stima si ottiene tramite uno sviluppo perturbativo e resta comunque ad un livello qualitativo. Per ottenere delle stime quantitative è necessario conoscere la funzione densità, compito definito dagli autori stessi troppo complesso, perché presuppone una descrizione a livello microscopico della soluzione di gadolinio ed acqua. La stima resta dunque di fatto qualitativa, anche perché l'eventuale risultato sarebbe ottenuto solo per via perturbativa. Vengono solo fornite delle previsioni sulle condizioni sperimentali che potrebbero evidenziare la presenza di questa correzione rispetto alle previsioni standard. Gli autori si aspettano che l'effetto venga rafforzato dall'aumentare della temperatura e delle fluttuazioni di densità dell'assorbitore. Considerano quindi una conferma delle loro previsioni il fatto che il fenomeno si verifichi proprio con assorbitore liquido, come la miscela di gadolinio, e non in presenza del cristallo di silicio. A questo riguardo ci sembra però necessario precisare che nel caso del cristallo di silicio il fenomeno fisico d'interesse non è l'assorbimento, ma la riflessione alla Bragg. Per ottenere una stima non perturbativa per ϵ, che desse ragione del forte scostamento dai dati sperimentali, Namiki e Pascazio hanno proposto a più riprese degli approcci fenomenologici al problema [28,29], uguali nella sostanza, anche se leggermente diversi nei particolari. In un primo tentativo hanno generalizzato la formula di Goldberger per il coefficiente di rifrazione dei neutroni in gadolinio e acqua, introducendo una dipendenza dal punto nella densità dei nuclei di gadolinio ($\langle\rho_g\rangle = \langle\rho_g(x)\rangle$) e pensando invece costante la densità dell'acqua. Tramite alcune ipotesi di carattere fenomenologico su queste densità e sulle loro fluttuazioni giungono ad una espressione esplicita per t e per ϵ in funzione di un parametro fenomenologico libero g e di $\langle\rho_g\rangle$. Quest'ultima quantità non è però a priori nota e viene valutata a partire dalle misure trovate per t. Esplicitamente si ha:

$$\epsilon = 1 - \exp\left(-\frac{g}{k^2}\langle\rho_g\rangle D\right)$$

ove D è lo spessore di soluzione di gadolinio e acqua attraversato. In figura sono riportati alcune curve corrispondenti ad un valore di $\langle\rho_g\rangle = 5\times 10^{26} m^{-3}$ e a diversi valori di g (g può oscillare fra 0 ed 1 e g=0 porge i risultati dell'usuale meccanica

Raffronto fra risultati teorici e sperimentali, per $g = 0$ si recupera la meccanica quantistica tradizionale.

quantistica). Analogamente in un lavoro seguente [29] si è considerato variabile anche lo spessore dell'assorbitore, con risultati perfettamente analoghi. La differente rilevanza delle fluttuazioni del valore di T, rispetto a quelle di χ, sfasamento dato dall'attraversamento della sbarretta di alluminio, viene giustificata dagli autori considerando la variazione dello spessore del campione e il moto interno dei singoli atomi costituenti il campione, nonché le dimensioni finite del fascio. Non è ben chiaro, almeno agli occhi di chi scrive, perché questi fattori non debbano intervenire anche nel caso dell'alluminio. Questo approccio fenomenologico offre dunque una possibile giustificazione per la diminuizione della figura di interferenza e gli autori ritengono i dati raccolti sufficienti per discriminare *sperimentalmente* la teoria dei molti spazi di Hilbert da quella di von Neumann, ritenendo i risultati del gruppo di Vienna una prova determinante. Oggetto di questo lavoro di tesi è lo studio del problema con un diverso atteggiamento, teso a verificare se una più approfondita e corretta descrizione e conoscenza dell'apparato sperimentale e della interazione non possano rendere ragione, in maniera più ortodossa e fondamentale, di questi risultati.

Capitolo 4

Il formalismo moderno della meccanica quantistica

4.1 Motivazioni fisiche dello studio

Come si è preannunciato nei capitoli precedenti, ci riproponiamo di descrivere in maniera opportuna le interazioni che il neutrone subisce in questo tipo di esperimenti, cercando di evidenziare i diversi *regimi* di interazione. Con questa affermazione intendiamo sottolineare l'estrema coerenza della struttura dell'interferometro e quindi dell'interazione del neutrone con il potenziale periodico del cristallo, ma anche la ben diversa struttura dell'interazione dei neutroni con, ad esempio, l'assorbitore di gadolinio. Troviamo infatti stupefacente l'esito di questi esperimenti, ovvero il fatto che un' interazione così intensa con una soluzione assorbente lasci pressochè immutata la coerenza fra i due fasci. Capire come questo sia possibile significa anche individuare la possibile sorgente delle discrepanze così fortemente sottolineate da Pascazio e Namiki. L'interazione del neutrone con l'interferometro e quindi con la struttura reticolare del silicio è ben studiata e descritta in quel ramo della fisica detto ottica dei neutroni, della quale si è occupato in particolare V. F. Sears [2] [5,6], e che offre una corretta descrizione dei fenomeni coerenti in cui prevale la natura *ondulatoria* dei neutroni. I lavori di Sears fanno infatti riferimento agli analoghi studi per la diffrazione dei raggi X. Di fatto l'attraversamento di uno spessore di alluminio o di una delle altre sostanze usate per mutare il cammino ottico sembra ben descritto da un semplice indice di rifrazione, proprio come avviene ad esempio per i raggi luminosi. Anche l'interazione con il gadolinio, ovvero con l'assorbitore liquido, viene caratterizzata con un semplice parametro, il coefficiente di assorbimento. I lavori di Namiki non sembrano scostarsi molto da questa prospettiva, semplicemente introducono delle fluttuazioni statistiche su questo parametro. Vogliamo perciò indagare la validità di queste approssimazioni. Vorremmo chiarire se davvero la dinamica dei neutroni in questi esperimenti è correttamente descritta solo in termini di proprietà ondulatorie, con un linguaggio spesso semplicemente mutuato dall'ottica.

4.2 Stati e osservabili

Introduciamo dapprima la struttura matematica [30]. I concetti usualmente considerati fondamentali in meccanica quantistica, alla base di ogni esperimento, sono le nozioni duali di stato ed osservabile, entrambi definiti, nella loro formulazione più generale, in termini di operatori agenti su uno spazio di Hilbert. Nella formulazione più moderna della meccanica quantistica, la cosiddetta formulazione operazionale, introdotta da Davies [31] negli anni 70 e poi via via raffinata, l'enfasi è spostata sui più generali concetti di preparazione e trasformazione della preparazione stessa, che forniscono lo schema più soddisfacente per lo studio della fisica dei macrosistemi, portando con sé in modo naturale anche un concetto più elastico e realistico di osservabile, quello cioè di misura a valori di effetto. In questo paragrafo introdurremo lo spazio degli stati e lo spazio in cui vengono usualmente descritti le osservabili, passando poi, nel paragrafo successivo, alla descrizione delle operazioni e del formalismo connesso. Sia $\mathcal{H}$ lo spazio di Hilbert associato al sistema $\mathcal{S}$ che si intende descrivere. Si indichi poi con $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ l'insieme degli operatori limitati su $\mathcal{H}$. Introduciamo ora un sottoinsieme particolarmente importante, quello degli operatori di classe traccia, $\mathcal{T}(\mathcal{H})$, così definito:

$$\mathcal{T}(\mathcal{H}) = \left\{ \hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) : \mathrm{Tr}\left(\hat{A}\hat{A}^\dagger\right)^{\frac{1}{2}} < +\infty \right\} \quad . \tag{4.1}$$

Esso è uno spazio di Banach con la norma seguente:

$$\|\hat{A}\|_1 = \mathrm{Tr}\left(\hat{A}\hat{A}^{\dagger\,\frac{1}{2}}\right) = \mathrm{Tr}\,|\hat{A}|,$$

che nel caso di operatori autoaggiunti diventa:

$$\|\hat{A}\|_1 = \mathrm{Tr}\left(\hat{A}^2\right) = \mathrm{Tr}\,|\hat{A}| \quad .$$

Il duale topologico di $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ è proprio lo spazio $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, ove la formula di dualità è data da

$$\langle\hat{A}|\hat{B}\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) \qquad \hat{B} \in \mathcal{T}(\mathcal{H}), \quad \hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \quad . \tag{4.2}$$

Indicheremo con $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ gli operatori positivi con traccia uguale ad uno:

$$\mathcal{K}(\mathcal{H}) = \left\{ \hat{T} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) : \hat{T} \geq 0, \quad \|\hat{T}\|_1 = 1 \right\} \quad . \tag{4.3}$$

Lo spazio $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ è generato dagli elementi di $\mathcal{K}(\mathcal{H})$, infatti ogni $\hat{V} \in \mathcal{T}(\mathcal{H})$ può essere rappresentato nella forma:

$$\hat{V} = \alpha_1\hat{\varrho}_1 - \alpha_2\hat{\varrho}_2 \qquad \alpha_{1,2} \in \mathbb{R}^+, \quad \hat{\varrho}_{1,2} \in \mathcal{K}(\mathcal{H}) \quad . \tag{4.4}$$

Identifichiamo ora gli stati del nostro sistema con gli elementi dell'insieme $\mathcal{K}(\mathcal{H})$, che chiameremo operatori statistici, i quali godono dunque delle seguenti proprietà:

$$\hat{\varrho} \geq 0 \qquad\qquad \mathrm{Tr}\,\hat{\varrho} = 1 \quad . \tag{4.5}$$

Fra gli operatori positivi con traccia uno vi sono in particolare i proiettori sugli spazi monodimensionali, che indicheremo con $\hat{P}[\phi]$. Si verifica che $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ è un insieme convesso, cioè:

$$\hat{T}_1, \hat{T}_2 \in \mathcal{K}(\mathcal{H}) \Longrightarrow \hat{T} \in \mathcal{K}(\mathcal{H}) \quad \text{se} \quad \hat{T} = w\hat{T}_1 + (1-w)\hat{T}_2 \qquad 0 \leq w \leq 1 \quad . \tag{4.6}$$

I proiettori monodimensionali sono i punti estremi di questo insieme convesso. Un elemento $\hat{T} \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ è estremo se la condizione $\hat{T} = w\hat{T}_1 + (1-w)\hat{T}_2$, con $0 < w < 1$ e $\hat{T}_1$, $\hat{T}_2 \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ implica $\hat{T} = \hat{T}_1 = \hat{T}_2$. Ma $\hat{T}$ è un punto estremo se e solo se è idempotente ($\hat{T}^2 = \hat{T}$), come è infatti quando $\hat{T}$ è della forma $\hat{P}[\phi]$ per un qualche vettore unitario $\phi \in \mathcal{H}$. L'insieme degli elementi estremi genera $\mathcal{K}(\mathcal{H})$, nel senso che un qualsiasi $\hat{T} \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ può essere espresso come combinazione convessa di punti estremi ($\hat{P}[\phi_i]$): $\hat{T} = \sum_i w_i \hat{P}[\phi_i]$, dove i w_i sono degli opportuni pesi, ovvero $0 \leq w_i \leq 1$, $\sum_i w_i = 1$. Questa decomposizione può essere ottenuta in particolare a partire dalla scomposizione spettrale di $\hat{T} = \sum_i t_i \hat{P}_i$. In questo caso $\hat{T}$ è scomposto in proiettori monodimensionali mutuamente ortogonali, e i pesi sono i relativi autovalori. In questa cornice l'usuale nozione di vettore di stato coincide con quella di punto estremo, o stato puro. In notazione più familiare ai fisici possiamo infatti scrivere:

$$\hat{\varrho} = \sum_i^{\mathrm{n}} w_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \tag{4.7}$$

e per $\mathrm{n} = 1$ si ottiene proprio uno stato puro. Un primo motivo per la scelta di questa struttura matematica è dunque subito evidente, grazie alla struttura convessa dello spazio è possibile preparare nuovi stati come miscela di altri stati, permettendo così una descrizione più realistica e corretta delle preparazioni sperimentali. Il caso in cui la preparazione del sistema è rappresentata da uno stato puro, ovvero non può essere ulteriormente decomposta in una miscela poiché non si può operare un ulteriore controllo sperimentale è solo un caso molto particolare.

4.3 Moderno formalismo operazionale in meccanica quantistica

Nell'ambito del formalismo presentato nel paragrafo precedente diventa particolarmente naturale rappresentare ogni preparazione statisticamente determinata del sistema in oggetto tramite una mappa affine, sia $\mathcal{A}$, da $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ in $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ che può essere estesa ad un endomorfismo (lo indicheremo con $\mathcal{F}$) su $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ (si confronti la (4.4)). Ricordiamo che per una mappa affine $\mathcal{F}$ vale la seguente:

$$\hat{V} = \alpha\hat{V}_1 + \beta\hat{V}_2 \Longrightarrow \mathcal{F}\hat{V} = \alpha\mathcal{F}\hat{V}_1 + \beta\mathcal{F}\hat{V}_2 \quad .$$

Le mappe di questo genere, se positive e contrattive, vengono chiamate *operazioni* [32][33][34] e sono in particolare elementi di $\mathcal{B}(\mathcal{T}(\mathcal{H}))$ (con questa notazione si sono intesi gli operatori limitati sullo spazio di Banach $\mathcal{T}(\mathcal{H})$):

$$\mathcal{F} : \mathcal{T}(\mathcal{H}) \longrightarrow \mathcal{T}(\mathcal{H})$$

$$\mathrm{Tr}(\mathcal{F}(\hat{A})) \leq \mathrm{Tr}\,\hat{A} \quad \text{e} \quad \mathcal{F}(\hat{A}) \geq 0 \quad \text{se} \quad \hat{A} \geq 0 \quad . \tag{4.8}$$

Se in particolare vale il segno di uguaglianza nella prima delle due disuguaglianze la mappa conserva la traccia e viene detta conservativa. Consideriamo a titolo esemplificativo la trasformazione $\mathcal{F}_A$ indotta su un operatore statistico $\hat{W}$ come conseguenza della misura della grandezza fisica associata all'operatore autoaggiunto $\hat{A}$, il cui spettro supponiamo puramente discreto ($\hat{A} = \sum_a \hat{P}_a$). Si ha:

$$\mathcal{F} : \mathcal{T}(\mathcal{H}) \longrightarrow \mathcal{T}(\mathcal{H})$$

$$\mathcal{F}\hat{W} = \sum_a \hat{V}_a \qquad \hat{V}_a = \hat{P}_a\hat{W}\hat{P}_a \qquad 0 < \mathrm{Tr}(\hat{V}_a) = \mathrm{Tr}(\hat{P}_a\hat{W}) < 1 \tag{4.9}$$

ove $\mathrm{Tr}(\hat{P}_a\hat{W})$ è appunto la probabilità per il verificarsi dell'evento: la grandezza fisica associata all'operatore $\hat{A}$ ha assunto il valore a. L'operazione considerata può essere facilmente scomposta nel modo seguente: $\mathcal{F} = \sum_a \mathcal{F}_a$ ove $\mathcal{F}_a(\hat{W}) = \hat{V}_a$. La nuova preparazione ottenuta selezionando i sistemi per i quali il risultato della misura ha porto il valore a è data da $\hat{W}_a = \hat{V}_a/\,\mathrm{Tr}(\hat{V}_a)$. Possiamo ora generalizzare questi risultati facendo riferimento alla teoria classica delle probabilità. Al posto dei singoli eventi $A = a$ consideriamo famiglie di eventi definite su uno spazio misurabile (Ω, Σ), (Ω è un insieme, tipicamente $\mathbb{R}$, Σ una σ-algebra di sottoinsiemi di Ω, tipicamente $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ ovvero i borelliani di $\mathbb{R}$); in particolare identificheremo questi eventi con elementi della σ-algebra Σ. Possiamo ora considerare, dato un insieme $\omega \in \Sigma$, la probabilità p_ω che una misura della grandezza A porga un valore $a \in \omega$ e considerare in corrispondenza la sottocollezione di sistemi $\hat{V}_\omega$ in cui l'operatore statistico iniziale viene scomposto in seguito all'operazione:

$$\mathcal{F}(\omega)\hat{W} = \hat{V}_\omega \qquad \hat{V}_\omega = \sum_{a\in\omega} \hat{V}_a \qquad p_\omega = \sum_{a\in\omega} \mathrm{Tr}(\hat{P}_a \hat{W})$$

$$p_\omega = \mathrm{Tr}(\hat{V}_\omega) \qquad \hat{W}_\omega = \frac{\hat{V}_\omega}{\mathrm{Tr}(\hat{V}_\omega)} \quad . \tag{4.10}$$

Queste conclusioni possono essere riformulate in maniera più significativa e compatta tramite il concetto di misura a valori di operazione, che ad ogni insieme $\omega \in \Sigma$ associa un'operazione $\mathcal{F}(\omega)$:

$$\mathcal{F}(\omega)\cdot = \sum_{a\in\omega} \hat{P}_a \cdot \hat{P}_a$$

con le seguenti proprietà:

i) normalizzazione e positività

$$\mathcal{F}(\omega) \geq \mathcal{F}(\emptyset) \quad \forall \omega \in \Sigma \qquad \mathcal{F}(\emptyset) = 0$$

$$\mathcal{F}(\Omega) = \sum_a \hat{P}_a \cdot \hat{P}_a \qquad \mathrm{Tr}\left(\mathcal{F}(\Omega)\hat{\varrho}\right) = \mathrm{Tr}\left(\hat{\varrho}\right) \quad \forall \hat{\varrho} \in \mathcal{T}(\mathcal{H})$$

ii) σ-additività

$$\mathcal{F}(\bigcup_l \omega_l)\hat{X} = \sum_l \mathcal{F}(\omega_l)\hat{X}, \quad \omega_l \in \Sigma, \quad \omega_l \cap \omega_i = \emptyset \quad \text{se} \quad i \neq l$$

iii) interpretazione fisica

$$\hat{V}_\omega = \mathcal{F}(\omega)\hat{W} \qquad p_\omega = \mathrm{Tr}(\mathcal{F}(\omega)\hat{W}) \quad .$$

Si noti in particolare l'operazione associata all'intero spazio, che descrive la perturbazione prodotta dalla misura. Le misure a valore di operazione in letteratura sono usualmente chiamate strumenti [30].
Siamo così condotti ad associare in modo naturale ad ogni misura di una grandezza $\hat{A}$ una misura a valori di operazione $\mathcal{F}_A$ definita su uno spazio Ω (tipicamente $\mathbb{R}$). Tenendo conto della dualità tra gli spazi $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ e $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ si può associare ad ogni misura a valore di operazione su $\mathbb{R}$ una misura a valori di operatore positiva F_A definita dalla relazione:

$$\mathrm{Tr}(\mathcal{F}_A(\omega)\hat{X}) = \mathrm{Tr}(\hat{I}\mathcal{F}_A(\omega)\hat{X}) = \mathrm{Tr}[(\mathcal{F}'_A(\omega)\hat{I})\hat{X}] = \mathrm{Tr}(\hat{F}_A(\omega)\hat{X}) \quad \forall \hat{X} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \tag{4.11}$$

ove $\hat{F}_A(\omega)$ è un effetto, ovvero un operatore positivo $\in [0, \hat{I}]$. Questa associazione fra elementi della σ-algebra considerata ed effetti è una misura a valori di effetto che gode delle seguenti proprietà:

$$0 \leq \hat{F}_A(\omega) \leq \hat{I} \quad \hat{F}_A(\emptyset) = 0 \quad \hat{F}_A(\mathbb{R}) = \hat{I}$$

$$\hat{F}_A(\bigcup_l \omega_l)f = \sum_l \hat{F}_A(\omega_l)f \qquad f \in \mathcal{H},$$

ove ω_l sono sottoinsiemi borelliani disgiunti di $\mathbb{R}$. Siamo così molto naturalmente arrivati ad una generalizzazione del concetto usuale di osservabile. Invece di considerare come osservabili solo le misure a valori di proiettore, cui è associato in modo biunivoco un operatore autoaggiunto, estenderemo il concetto di osservabile alle misure a valore di effetto, alle quali si può associare, in generale in maniera non più biunivoca, un operatore simmetrico (che risulterà essere autoaggiunto solo in un sottoinsieme dei casi). Abbiamo allora visto come il semplice passaggio $\psi \Longrightarrow \hat{\varrho}$ porti con sé il passaggio *operatori agenti su* $\psi \Longrightarrow$ *mappe agenti su* $\hat{\varrho}$ e quindi al più generale concetto di misurazione. Per descrivere l'interazione neutrone materia giungeremo proprio alla espressione esplicita di una particolare sottoclasse di queste mappe. Questo nuovo approccio alla nozione di osservabile porta ad una generalizzazione della nozione di compatibilità: una collezione di effetti (osservabili) *coesistente* (ottenibile cioè per restrizione da un effetto descriventeli simultaneamente) non è più necessariamente data da operatori commutanti fra loro. Si hanno misure ad effetto corrispondenti a misure congiunte dette *imprecise* di grandezze che nel formalismo tradizionale non sono compatibili. Un caso particolarmente significativo e rilevante per questo lavoro è dato dal prendere in considerazione posizione e momento della singola particella. Diventa ora giustificato pensare, per la descrizione di alcuni fenomeni, ad una trattazione tipo spazio delle fasi in meccanica quantistica, come faremo più avanti facendo riferimento alla funzione di Wigner [35]. Proprio nell'ambito della teoria degli effetti diventa significativo associare ad essa un osservabile [36]. Lo stesso formalismo dell'operatore statistico esibisce una forte analogia rispetto alla descrizione statistica dei sistemi fisici in meccanica classica. A livello classico per la descrizione della singola particella si considera $L^1(\mathbb{R}^6, \mathcal{B}(\mathbb{R}^6), d\mu)$ ove $\mathcal{B}(\mathbb{R}^6)$ indica i borelliani di $\mathbb{R}^6$ e $d\mu$ la misura di Lebesgue. In questo spazio lineare normato si può considerare poi il seguente sottoinsieme di funzioni (*stati*):

$$\mathcal{K}(L_1) = \{\rho \in L_1 : \rho \geq 0, \quad \|\rho\|_1 = 1\} \tag{4.12}$$

che risulta essere un sottoinsieme convesso che ha in L_1 la stessa funzione che $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ ha in $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ (si confronti formalmente la (4.12) con la (4.3)) . Si noti peraltro che la condizione di appartenenza a $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ nel caso di operatori di moltiplicazione si riconduce proprio a chiedere che gli elementi diagonali formino una successione di l_1. La dualità fra $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ e $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ si riflette nella dualità fra L_∞ e L_1. L'operatore statistico è dunque un elemento di $\mathcal{K}(\mathcal{H})$ così come la ρ di Liouville è a livello classico un elemento di $\mathcal{K}(L_1)$. Scritture del tutto simili si ottengono anche per il calcolo dei valori medi. Nel caso quantistico, dato $\hat{\varrho} \in \mathcal{K}(\mathcal{H})$ e $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ si ha:

$$\langle \hat{A} \rangle_{\hat{\varrho}} = \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{\varrho}) \tag{4.13}$$

mentre a livello classico data una funzione $F \in L_\infty$ definita sullo spazio delle fasi si ha:

$$\langle F \rangle_\rho = \int_{\mathbb{R}^6} \rho F \; d\mu \quad .$$

Si badi che non vogliamo ascrivere a questa analogia nessuna rigorosa legge di corrispondenza, ci è solo parsa sufficientemente interessante dal punto di vista fisico per essere degna di menzione, soprattutto perché muove nella stessa direzione dei risultati rigorosi sopra menzionati. Ovviamente questa analogia non è scevra di difficoltà, i due ambienti matematici restano significativamente diversi, si pensi ad esempio al fatto che non si ha un esatto corrispondente dello spazio delle fasi classico.

4.4 Sistemi composti

Ora che abbiamo mostrato, anche se per linee molto generali, la struttura ed i vantaggi di questa moderna formulazione della meccanica quantistica, procediamo nel descrivere le strutture formali di cui faremo uso per lo studio esplicito dell'interazione.

Siano dati due sistemi fisici $\mathcal{S}$ ed $\mathcal{A}$, descritti rispettivamente negli spazi di Hilbert complessi separabili $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ e $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$. Secondo gli schemi usuali della meccanica quantistica il sistema composto $\mathcal{S}+\mathcal{A}$ è descritto nello spazio di Hilbert dato dal prodotto tensoriale dei due: $\mathcal{H}=\mathcal{H}_{\mathcal{S}}\otimes\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$. Se $\{\psi_i\}$ e $\{\phi_k\}$ sono rispettivamente sistemi ortogonali completi per $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ e $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$, allora $\{\psi_i\otimes\phi_k\}$ è una base per $\mathcal{H}$ e il generico elemento $\Psi\in\mathcal{H}=\mathcal{H}_{\mathcal{S}}\otimes\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ può essere scritto $\Psi=\sum_{i,k}\langle\psi_i\otimes\phi_k|\Psi\rangle\psi_i\otimes\phi_k$. Gli insiemi $\mathcal{B}(\mathcal{H}_{\mathcal{S}}\otimes\mathcal{H}_{\mathcal{A}})$ e $\mathcal{T}(\mathcal{H}_{\mathcal{S}}\otimes\mathcal{H}_{\mathcal{A}})$ sono definiti analogamente a prima. In particolare ogni coppia di operatori $\hat{A}_{\mathcal{S}}\in\mathcal{B}(\mathcal{H}_{\mathcal{S}})$ e $\hat{B}_{\mathcal{A}}\in\mathcal{B}(\mathcal{H}_{\mathcal{A}})$ determina un elemento di $\mathcal{B}(\mathcal{H}_{\mathcal{S}}\otimes\mathcal{H}_{\mathcal{A}})$ dato dal loro prodotto tensoriale così definito:

$$\left(\hat{A}_{\mathcal{S}}\otimes\hat{B}_{\mathcal{A}}\right)(\psi\otimes\phi)=\hat{A}_{\mathcal{S}}\psi\otimes\hat{B}_{\mathcal{A}}\phi\qquad\psi\in\mathcal{H}_{\mathcal{S}},\phi\in\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$$

e analogamente per gli operatori di classe traccia. È notevole da un punto di vista fisico il fatto che gli operatori con struttura di prodotto tensoriale non esauriscano i possibili operatori dello spazio.

Nell'ambito della teoria dei sistemi composti assume un significato particolarmente importante la nozione di traccia parziale su uno dei due spazi. La traccia parziale sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H}_\mathcal{A}$ è definita dalla mappa lineare:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{A}} : \mathcal{T}(\mathcal{H}_\mathcal{S} \otimes \mathcal{H}_\mathcal{A}) \Longrightarrow \mathcal{T}(\mathcal{H}_\mathcal{S})$$

che agisce nel modo seguente:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{S}}[\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{A}}(\hat{W})\hat{A}_\mathcal{S}] = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{S}\otimes\mathcal{H}_\mathcal{A}}[\hat{W}(\hat{A}_\mathcal{S} \otimes \hat{I}_\mathcal{A})], \tag{4.14}$$

ove $\hat{W} \in \mathcal{T}(\mathcal{H}_\mathcal{S} \otimes \mathcal{H}_\mathcal{A})$, $\hat{A}_\mathcal{S} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_\mathcal{S})$ e $\hat{I}_\mathcal{A}$ è l'operatore identità su $\mathcal{H}_\mathcal{A}$. Se $\{\phi_i\}$ e $\{\psi_k\}$ sono rispettivamente sistemi ortogonali completi per $\mathcal{H}_\mathcal{S}$ e $\mathcal{H}_\mathcal{A}$, $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{A}}(\hat{W})$ può essere scritto:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{A}}(\hat{W}) = \sum_{ijk} \langle \phi_i \otimes \psi_k | \hat{W}(\phi_j \otimes \psi_k)\rangle |\phi_i\rangle\langle\phi_j| \quad . \tag{4.15}$$

Qui $|\phi_i\rangle\langle\phi_j|$ è da intendersi come l'operatore di $\mathcal{B}(\mathcal{H}_\mathcal{S})$ definito da $|\phi_i\rangle\langle\phi_j|(\varphi) = \langle\phi_j|\varphi\rangle\phi_i$, $\varphi \in \mathcal{H}_\mathcal{S}$. In modo del tutto analogo si definisce la traccia parziale su $\mathcal{H}_\mathcal{S}$. Come già accennato gli operatori della forma $\hat{T}_\mathcal{S} \otimes \hat{T}_\mathcal{A}$ non esauriscono $\mathcal{T}(\mathcal{H}_\mathcal{S} \otimes \mathcal{H}_\mathcal{A})$. Se $\hat{W} = \hat{T}_\mathcal{S} \otimes \hat{T}_\mathcal{A}$, allora $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{A}}(\hat{W}) = \hat{T}_\mathcal{S}$ e $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{S}}(\hat{W}) = \hat{T}_\mathcal{A}$, ma in generale si ha che $\hat{W} \neq \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{A}}(\hat{W}) \otimes \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{S}}(\hat{W})$. In particolare, considerando stati puri, se $\hat{W} = \hat{P}[\Psi]$, allora:

$$\hat{P}[\Psi] = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{A}}(\hat{P}[\Psi]) \otimes \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{S}}(\hat{P}[\Psi]) \iff$$

$$\Psi = \psi \otimes \phi \quad \text{per qualche} \quad \psi \in \mathcal{H}_\mathcal{S} \quad \text{e} \quad \phi \in \mathcal{H}_\mathcal{A} \quad .$$

Ed in questo caso si ha anche $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{A}}(\hat{P}[\Psi]) = \hat{P}[\psi]$ e $\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{S}}(\hat{P}[\Psi]) = \hat{P}[\phi]$. Questo risultato dimostra l'importante fatto che il prodotto tensoriale degli elementi estremi degli insiemi $\mathcal{K}_\mathcal{S}(\mathcal{H})$ e $\mathcal{K}_\mathcal{A}(\mathcal{H})$ non esaurisce l'insieme degli elementi estremi dello spazio $\mathcal{K}(\mathcal{H}_\mathcal{S} \otimes \mathcal{H}_\mathcal{A})$. Nel caso di sistemi quantistici isolati l'evoluzione del sistema in esame viene descritta tramite un gruppo ad un parametro di trasformazioni unitarie. Se al tempo $t = 0$ il sistema è descritto dall'operatore $\hat{\varrho}_o$ il suo evoluto al tempo generico t è dato da:

$$\hat{\varrho}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{\varrho}_o\hat{U}(t) \doteq \mathcal{U}_t(\hat{\varrho}_o) \tag{4.16}$$

ove $\hat{U}^\dagger(t) = \exp(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)$ è il gruppo unitario ad un parametro indotto dall'Hamiltoniana $\hat{H}$ associata al sistema. Il gruppo $\mathcal{U}_t$ è in particolare un gruppo di operazioni conservative detto in letteratura gruppo dinamico quantistico. La forma differenziale del processo sopra descritto è data dall'equazione di *Liouville – von Neumann*:

$$\frac{d}{dt}\hat{\varrho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\varrho}(t)] \doteq \mathcal{L}[\hat{\varrho}(t)] \quad . \tag{4.17}$$

4.5 Dinamica ridotta e generatori di Lindblad

Nello studio dei sistemi fisici cosiddetti *aperti*, ovvero tali da non poter essere ragionevolmente considerati isolati, si è da più parti constata l'opportunità di considerare forme di evoluzione temporale più generali, corrispondenti a famiglie di mappe $\mathcal{V}_t$ su $\mathcal{T}(\mathcal{H})$. Una classe piuttosto generale di trasformazioni degli stati del sistema $\mathcal{V}_t$ è data dalle mappe lineari, positive e conservanti la traccia su $\mathcal{T}(\mathcal{H})$, ovvero le operazioni sopra introdotte [34]. Queste sono ottenute in modo naturale tramite il concetto di *dinamica ridotta* [37,38] [39]. Sia $\mathcal{H}_\mathcal{S} \otimes \mathcal{H}_\mathcal{A}$ lo spazio di Hilbert associato ad un sistema composto $\mathcal{S} + \mathcal{A}$, sia $\mathcal{U}_t$ il gruppo dinamico (unitario) associato alla sua evoluzione temporale, e sia $\hat{\varrho}_\mathcal{S} \otimes \hat{\varrho}_\mathcal{A}$ lo stato rappresentante la preparazione al tempo iniziale ($t = 0$). L'evoluzione di $\mathcal{S}$ è ottenuta applicando la traccia parziale ad ogni istante di tempo, ottenendo la seguente famiglia $\mathcal{V}_t$ di trasformazioni lineari sugli stati:

$$\mathcal{V}_t(\hat{\varrho}_\mathcal{S}) \doteq \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_\mathcal{A}}(\mathcal{U}_t(\hat{\varrho}_\mathcal{S} \otimes \hat{\varrho}_\mathcal{A})) \quad . \tag{4.18}$$

Se consideriamo una mappa, sia $\mathcal{V}$, agente sugli stati del sistema considerato, ovvero su $\mathcal{T}(\mathcal{H})$, descrivente l'evoluzione dinamica unitaria, essa, portando in forza dell'unitarietà stati puri in stati puri, avrà la struttura unitaria $\mathcal{V}\hat{\varrho} = \hat{X}\hat{\varrho}\hat{X}^\dagger$, $\hat{X}^\dagger = \hat{X}^{-1}$. Descrive pertanto una dinamica reversibile. Se si considera invece un sistema non isolato, che mostri una dinamica irreversibile, come ad esempio nel caso di approccio all'equilibrio termodinamico (particella o più in generale microsistema in interazione con un bagno termico) o in processi di misura, le possibili mappe che descrivono il sistema avranno un carattere più generale, come si vede dalla struttura della (4.18). Se un sistema non è isolato la sua evoluzione in un determinato ambiente dipenderà dall'intero processo di preparazione, ovvero, pensando di descrivere il sistema tramite $\hat{\varrho}_t$, si avrà che $\hat{\varrho}_t$ dipenderà anche da $\hat{\varrho}_{t'}$ per ogni $t' \leq t$. Infatti questi stati precedenti del sistema (in generale tipicamente un microsistema), memorizzati nell'evoluzione dell'ambiente (o macrosistema) forniscono, proprio tramite l'interazione, effetti di memoria sul microsistema, che rendono in generale particolarmente difficile risolvere le equazioni descriventi la dinamica. Ci sono però dei casi in cui questi effetti di memoria possono venire trascurati, ed il sistema presenta un tipo di evoluzione detta *markoffiana*, che si verifica per una espressione che assuma la forma seguente:

$$\hat{\varrho}_{t+\tau} = \mathcal{V}_{t+\tau}(\hat{\varrho}) = \mathcal{V}_t(\hat{\varrho}) + \tau \mathcal{L}(t) \mathcal{V}_t(\hat{\varrho}), \tag{4.19}$$

ove τ è un opportuno tempo infinitesimo e $\mathcal{L}(t)$ è il generatore di quello che risulta essere il semigruppo di evoluzione temporale. Per un tempo finito la (4.19) diventa:

$$\hat{\varrho}_t = \mathcal{A}^t_{t_o} \hat{\varrho}_{t_o}, \tag{4.20}$$

ove $\mathcal{A}^{t''}_{t_o}$ è una famiglia di mappe irreversibili con la struttura di semigruppo seguente:

$$\mathcal{A}^{t'''}_{t'} = \mathcal{A}^{t'''}_{t''} \mathcal{A}^{t''}_{t'}, \quad t_o \leq t' \leq t'' \leq t''' \quad . \tag{4.21}$$

La struttura markoffiana, ovvero senza memoria, dell'evoluzione è collegata al comparire nel membro di destra della (4.19) del termine lineare nell'intervallino di tempo su cui si calcola l'evoluzione. In casi più complessi si deve in linea di principio risolvere una equazione integrodifferenziale per determinare la dipendenza temporale di $\hat{\varrho}$ [40]. Naturalmente per dare ragione di questi fenomeni irreversibili è necessario rinunciare all'unitarietà degli operatori che descrivono l'evoluzione temporale, ottenendo così solo una struttura di semigruppo e assegnando pertanto una direzione allo scorrere del tempo. Si tratta di individuare le condizioni sotto le quali sia ragionevole una descrizione markoffiana dell'interazione. Questa si rivela adeguata a descrivere l'interazione con un sistema di misura. Un'altra classe piuttosto ampia di sistemi fisici in cui gli effetti di memoria possono essere trascurati è data dai casi in cui il microsistema è studiato su una scala di tempi molto più lunghi del tipico tempo di decadimento delle correlazioni del macrosistema come ad esempio nel caso di una particella in moto browniano in un liquido, oppure quando l'interazione non perturba lo stato di equilibrio del macrosistema. In particolare tenendo conto delle proprietà che è ragionevole chiedere a queste mappe si è riusciti a dare un'espressione molto generale per la struttura dei generatori di quelli che vengono chiamati semigruppi dinamici quantistici [41,42] (che sono appunto famiglie di mappe con opportune proprietà gruppali).

Consideriamo l'azione della mappa che genera un'evoluzione temporale infinitesima:

$$\mathcal{A}_t^{t+dt}\hat{\varrho} = [1 + \mathcal{L}(t)dt]\mathcal{A}_t\hat{\varrho} \quad . \tag{4.22}$$

Ad essa chiederemo di essere un'operazione con l'ulteriore proprietà di semigruppo (come nella (4.21)). Una delle ipotesi deve essere resa più stringente per ottenere una descrizione che sia davvero fisicamente significativa. Al posto della positività occorre chiedere la completa positività, ovvero $\mathcal{A}$ deve restare positiva anche se interpretata come mappa su $\mathcal{T}(\mathcal{H} \otimes \mathbb{C}^n)$ per qualsiasi n. É questa una condizione particolarmente importante e restrittiva che porta ad identificare la espressione del generico generatore del semigruppo nella forma (lavoriamo ora in descrizione di Schrödinger):

$$\mathcal{L}(t)\hat{\varrho} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{\varrho}] + \sum_{j=1}^{n}\left[\hat{L}_j(t)\hat{\varrho}\hat{L}_j^\dagger(t) - \frac{1}{2}\left\{\hat{L}_j^\dagger(t)\hat{L}_j(t), \hat{\varrho}\right\}\right], \tag{4.23}$$

ove gli $\hat{L}_j(t)$ sono operatori connessi alla descrizione di processi irreversibili. Alternativamente si può scrivere:

$$\mathcal{L}(t)\hat{\varrho} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{\varrho}] + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\left([\hat{L}_j(t)\hat{\varrho}, \hat{L}_j^\dagger(t)] + [\hat{L}_j(t), \hat{\varrho}\hat{L}_j^\dagger(t)]\right) \quad .$$

Può essere interessante da ultimo considerare la medesima espressione in descrizione di Heisenberg:

$$\mathcal{L}'(t)\hat{X} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{X}] + \sum_{j=1}^{n} \left(\hat{L}_j^\dagger(t)\hat{X}\hat{L}_j(t) - \frac{1}{2}\left\{ \hat{L}_j^\dagger(t)\hat{L}_j(t), \hat{X} \right\} \right) \quad . \tag{4.24}$$

Equazioni di questo genere vengono dette alla Lindblad [41]. Un altro importante risultato relativamente ai semigruppi dinamici quantistici è il fatto che queste mappe completamente positive possono sempre essere viste come descriventi la dinamica ridotta di un sistema composito. Consideriamo infatti due sistemi fisici $\mathcal{S}$ ed $\mathcal{R}$ e sia $\hat{\varrho}_o$ lo stato iniziale del sistema $\mathcal{R}$. Se consideriamo il sistema $\mathcal{S} + \mathcal{R}$ come chiuso, la sua evoluzione è specificata da un operatore unitario agente su $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\mathcal{S} \otimes \mathcal{H}_\mathcal{R}$, che chiamiamo $\hat{U}$. Si ha allora che in descrizione di Heisenberg l'evoluzione del generico operatore del sistema $\mathcal{S}$ è data, in analogia alla (4.18), da:

$$\hat{X} \Longrightarrow \mathcal{A}\hat{X} = \mathrm{Tr}_\mathcal{R}\left[\hat{\varrho}_o \hat{U}^\dagger (\hat{X} \otimes \hat{I}) \hat{U} \right] \quad . \tag{4.25}$$

Un teorema (Ozawa) dimostra che ogni mappa completamente positiva può essere scritta in questa forma.

Tornando all'equazione (4.23) è immediato vedere, usando la proprietà di ciclicità della traccia, che $\mathrm{Tr}(\mathcal{A}_t^{t+dt}\hat{\varrho}) = \mathrm{Tr}(\hat{\varrho})$. Per vedere la positività e l'irreversibilità possiamo riscrivere il membro di destra della (4.22) fermandoci al primo ordine in dt ed osservando che per la scelta $dt \geq 0$ si ha

$$\begin{gathered}
[1 + \mathcal{L}(t)dt]\,\hat{\varrho} = \\
= \left[1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}dt - \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2}\hat{L}_j^\dagger(t)\hat{L}_j(t)dt \right] \hat{\varrho} \left[1 + \frac{i}{\hbar}\hat{H}dt - \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2}\hat{L}_j^\dagger(t)\hat{L}_j(t)dt \right] + \\
+ \sum_{j=1}^{n} \hat{L}_j(t)\hat{\varrho}\hat{L}_j^\dagger(t)dt > 0 \quad \text{se} \quad \hat{\varrho} > 0 \quad .
\end{gathered} \tag{4.26}$$

Si noti come l'irreversibilità giunga dall'ultimo termine, lineare in dt, mentre il primo contributo è positivo per ogni segno dell'intervallino di tempo, essendo della forma

$\hat{A}\hat{\varrho}\hat{A}^{\dagger}$ con $\hat{\varrho} > 0$. Il termine della forma $\hat{L}_j(t)\hat{\varrho}\hat{L}_j^{\dagger}(t)dt$ è infatti il più caratteristico di questa equazione. L'anticommutatore dà ragione di un'eventuale parte immaginaria negli autovalori, che si traduce fisicamente in un effetto di assorbimento, che sarebbe però descrivibile anche introducendo un potenziale non autoaggiunto nella equazione di Schrödinger. L'ultimo termine invece è tipico di una descrizione statistica ove si pensi ad una preparazione data da una vera e propria miscela, in cui si può avere mescolamento fra le varie componenti della miscela. Se anche si considera come dato iniziale un operatore statistico della forma $\hat{\varrho}_o = |\phi\rangle\langle\phi|$ corrispondente ad uno stato puro ($\phi \in \mathcal{H}$, $\|\phi\| = 1$), il suo evoluto ad un generico tempo t non potrà più essere scritto in forma fattorizzata. Avrà quindi la più generale forma data dalla (4.7), prendendo gli elementi di matrice della quale non si recupera più una struttura del tipo:

$$\langle\vec{x}|\hat{\varrho}|\vec{x}'\rangle = \phi(\vec{x})\phi^*(\vec{x}') \tag{4.27}$$

ma piuttosto una espressione più generale della forma:

$$\langle\vec{x}|\hat{\varrho}|\vec{x}'\rangle = \sum_i^n w_i\phi_i(\vec{x})\phi_i^*(\vec{x}') \tag{4.28}$$

che si avvicina a quella precedente solo nel caso in cui uno dei pesi sia nettamente prevalente sugli altri ($w_k \gg w_i \quad i \neq k$), nel qual caso si ha

$$\begin{aligned}\langle\vec{x}|\hat{\varrho}|\vec{x}'\rangle &= w_k\phi_k(\vec{x})\phi_k^*(\vec{x}') + \sum_{i\neq k} w_i\phi_i(\vec{x})\phi_i^*(\vec{x}') \approx \\ &\approx w_k\phi_k(\vec{x})\phi_k^*(\vec{x}') \quad . \end{aligned} \tag{4.29}$$

Capitolo 5

Deduzione della master-equation

5.1 Scelta dell'ambiente matematico

Vogliamo ora dare una descrizione in termini di dinamica ridotta dell'interazione fra il neutrone e gli atomi del mezzo assorbente derivando un'equazione per l'evoluzione dinamica degli operatori relativi al neutrone del tipo (4.18) che mostreremo essere della forma (4.23). Il formalismo più conveniente è quello cosiddetto di seconda quantizzazione in descrizione di Heisenberg. La scelta è legata alla semplificazione fornita dall'applicazione delle regole di commutazione fra gli operatori che riconduce parte del calcolo perturbativo ad un conto algebrico. Lavoriamo dunque nello spazio di Fock $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathcal{N}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{M}}$ prodotto tensoriale degli spazi di Fock ove pensiamo descrivere rispettivamente il neutrone incidente e i nuclei del macrosistema. Indicheremo, secondo l'uso consueto in letteratura [43], con $a_k(a_k^\dagger)$ il distruttore (creatore) di un neutrone con momento $\mathbf{k}$, mentre b_η $(b_\eta^\dagger)$ indicherà il distruttore (creatore) di un nucleo con momento $\boldsymbol{\eta}$ (per semplicità notazionale per il pedice dei vari operatori adotteremo la convenzione $k \equiv \mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$, inoltre useremo sempre gli indici latini in riferimento al neutrone e quelli greci per i nuclei del macrosistema). Non introduciamo per semplicità indici di spin poichè la dinamica dello spin non è rilevante per il problema da noi trattato (si veda quanto osservato nel Capitolo 2). Le parentesi di commutazione fra gli operatori di creazione e distruzione relativi al neutrone sono le seguenti:

$$[a_p, a_k]_+ = 0 \tag{5.1a}$$

$$\left[a_p^\dagger, a_k^\dagger\right]_+ = 0 \tag{5.1b}$$

$$[a_p, a_k^\dagger]_+ = \delta_{p,k}, \tag{5.1c}$$

$$\text{ove} \qquad [a_p, a_k^\dagger]_+ \equiv \{a_p, a_k^\dagger\} = a_p a_k^\dagger + a_k^\dagger a_p \quad .$$

Non facciamo invece ipotesi relativamente alle parentesi fra gli operatori di creazione e distruzione relativi ai nuclei, poiché, come vedremo, queste servirebbero soltanto per calcolare correzioni di ordine superiore. Supporremo però che valgano le seguenti:

$$[b_\eta, a_k^\dagger]_- = 0 \quad [b_\xi^\dagger, a_k^\dagger]_- = 0 \quad [b_\eta, a_k]_- = 0 \quad [b_\xi^\dagger, a_k]_- = 0 \quad . \tag{5.2}$$

Porremo all'inizio il sistema in un volume finito (diciamo un cubo di lato L) ottenendo così dei valori discreti per i momenti delle varie particelle, in particolare, imponendo per semplicità condizioni di periodicità al contorno, abbiamo:

$$\mathbf{k} \equiv \left(\frac{2\pi\hbar}{L}k_x, \frac{2\pi\hbar}{L}k_y, \frac{2\pi\hbar}{L}k_z\right) \qquad k_x, k_y, k_z \in \mathbb{Z}$$

e analogamente

$$\boldsymbol{\xi} \equiv \left(\frac{2\pi\hbar}{L}\xi_x, \frac{2\pi\hbar}{L}\xi_y, \frac{2\pi\hbar}{L}\xi_z\right) \qquad \xi_x, \xi_y, \xi_z \in \mathbb{Z} \quad .$$

Valgono pertanto le seguenti:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_q a_q \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \qquad a_q = \int d^3x \, \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}) \tag{5.3}$$

e ancora

$$\psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_p a_p^\dagger \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \qquad a_p^\dagger = \int d^3x \, \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \psi^\dagger(\mathbf{x}) \quad . \tag{5.4}$$

Nel corso del calcolo perturbativo passeremo poi al limite del continuo, detto limite termodinamico, ottenendo così una notevole semplificazione. Non si tratta però di un passaggio banale, poiché implica il trascurare le effettive condizioni al contorno, il che non è sempre fisicamente ammissibile: si pensi al caso dell'interferometro ove conoscere la geometria dell'apparato è essenziale per poter predire il comportamento dei neutroni nell'attraversamento dello stesso. Il concetto stesso di periodicità ai bordi appare definibile solo per forme geometriche particolari. Assegniamo anzitutto l'Hamiltoniana descrivente il sistema che supponiamo avere la forma seguente:

$$\hat{H} = \sum_\xi \frac{\xi^2}{2M} b_\xi^\dagger b_\xi + \frac{1}{2} \sum_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4} b_{\xi_1}^\dagger b_{\xi_2}^\dagger b_{\xi_3} b_{\xi_4} \bar{V}_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4}$$

$$+ \sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^\dagger a_p + \sum_{p\xi q\eta} a_p^\dagger b_\xi^\dagger a_q b_\eta V_{p\xi q\eta} \quad . \tag{5.5}$$

Nell'espressione abbiamo indicato con m la massa del neutrone e con M quella dei nuclei, $\bar{V}$ è il potenziale di interazione fra i nuclei, mentre V è il potenziale di interazione fra neutroni e nuclei. Pensando ad una interazione dipendente solo dal modulo della reciproca distanza possiamo evidenziare nell'espressione del potenziale una delta di Kronecker che esprima la conservazione del momento:

$$V_{p\xi q\eta} = \langle \mathbf{p}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathrm{V}}|\mathbf{q}\boldsymbol{\eta}\rangle = \frac{1}{L^6} \int d^3x_1 \int d^3x_2 e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}_1} e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{x}_2} V(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_1} e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\eta}\cdot\mathbf{x}_2} =$$

$$= \delta_{p+\xi,q+\eta} \frac{1}{L^3} \int d^3x \, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\mathbf{p}-\boldsymbol{\xi}}{2} - \frac{\mathbf{q}-\boldsymbol{\eta}}{2}\right)\cdot\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) = \delta_{p+\xi,q+\eta} \tilde{V}\left(\frac{\mathbf{p}-\boldsymbol{\xi}}{2} - \frac{\mathbf{q}-\boldsymbol{\eta}}{2}\right) \quad . \tag{5.6}$$

Conoscere la dinamica del neutrone significa essere in grado di calcolare i valori di aspettazione delle varie osservabili ad esso associate. Supponiamo ora di descrivere il sistema complessivo neutrone più nuclei tramite un operatore statistico che al tempo $t = 0$ sia dato dal seguente prodotto tensoriale:

$$\hat{\varrho} = \hat{\varrho}_{\mathcal{N}} \otimes \hat{\varrho}_{\mathcal{M}} \tag{5.7}$$

che equivale all'ipotesi di sistemi inizialmente separati [37,38] e viene spesso scritta nella forma più sbrigativa $\hat{\varrho} = \hat{\varrho}_{\mathcal{N}} \hat{\varrho}_{\mathcal{M}}$. Presa in considerazione la generica osservabile associata al neutrone $\hat{A}$ (si noti che ogni operatore $\hat{B}$ su $\mathcal{H}_{\mathcal{N}}$ può essere visto im modo naturale come operatore su $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\mathcal{N}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{M}}$ pur di pensarlo della forma $\hat{B} \otimes \hat{I}_{\mathcal{M}}$) e pensando di osservare solo la dinamica del neutrone si ha, in accordo con la (4.18), che la quantità di interesse è data da:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \mathrm{Tr}_{\mathcal{N}} \left(\hat{A} \, \mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}(\hat{\varrho}(t)) \right) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(\hat{A} \hat{\varrho}(t)), \tag{5.8}$$

ove $\hat{\varrho}(t)$ è l'evoluto al tempo t dell'operatore statistico descrivente il sistema. Posto

$$\mathcal{L} \cdot = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \cdot] \tag{5.9}$$

abbiamo

$$\hat{\varrho}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{\varrho} e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} = \exp\big(\mathcal{L}(t)\big) \hat{\varrho}, \tag{5.10}$$

con $\hat{H}$ data dalla (5.5). Considerare l'espressione (5.8) equivale a lavorare in descrizione di Schrödinger ove gli operatori non dipendono dal tempo e si considera l'evoluto temporale dello stato identificato in questo caso con l'operatore statistico dato dalla (5.7). In particolare noi siamo interessati a esperimenti in cui si osserva la dinamica di un singolo neutrone e non si hanno fenomeni di correlazione fra due o più neutroni. Lo stato del nostro sistema è dunque caratterizzato dall'essere annichilato da tutti gli operatori contenenti più di un operatore di distruzione di neutroni. Gli operatori di interesse riguardanti il neutrone avranno dunque la forma seguente:

$$\hat{F} = \sum_{pq} f(\mathbf{p}, \mathbf{q}) a_p^\dagger a_q, \tag{5.11}$$

e per quello che riguarda i valori di aspettazione degli evoluti temporali considereremo espressioni della forma:

$$\sum_{pq} f(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \, \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(a_p^\dagger a_q e^{\mathcal{L}(t)} \hat{\varrho}) \quad . \tag{5.12}$$

La (5.11) può essere utilmente riscritta nella forma seguente:

$$\hat{F} = \sum_{pq} a_p^\dagger \langle \mathbf{p} | \hat{\mathsf{F}}^{(1)} | \mathbf{q} \rangle a_q, \tag{5.13}$$

che stabilisce una relazione [34] fra operatori di seconda quantizzazione monoparticellari ed operatori di prima quantizzazione, che indicheremo in generale con $\hat{A}^{(1)}$, ove l'indice (1) sta ad indicare il loro essere definiti sullo spazio di Hilbert di particella singola, diciamo $\mathcal{H_N}^{(1)}$, in cui si può descrivere il neutrone e a partire dal quale otteniamo lo spazio di Fock $\mathcal{H_N}$; analogamente useremo in seguito l'indice (2) per indicare operatori agenti sullo spazio di Hilbert di due particelle (come avviene ad esempio per gli operatori che traducono il termine di potenziale). La relazione (5.13) si mostrerà particolarmente significativa anche più avanti, in connessione con la scelta dell'operatore statistico. Torniamo ora alla (5.12) concentrandoci sul termine

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(a_p^\dagger a_q e^{\mathcal{L}(t)} \hat{\varrho}) \quad . \tag{5.14}$$

Essendo $\hat{\varrho}$ in generale un operatore molto complesso, contenente moltissimi operatori di creazione e distruzione, non è conveniente lavorare in descrizione di Schrödinger, portando l'operatore $\hat{H}$ ad agire direttamente sull'operatore statistico, ma è molto più conveniente passare in descrizione di Heisenberg ove si tratta di valutare l'azione di $\hat{H}$ su un semplice operatore di creazione o distruzione. Questa scelta si rivelerà di cruciale importanza per lo sviluppo della serie perturbativa. Consideriamo dunque al posto di $\mathcal{L}$ l'operatore aggiunto $\mathcal{L}'$ agente sullo spazio duale (si confronti quanto detto relativamente alla (4.2)) e definito da:

$$\mathcal{L}' \cdot = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \cdot] \quad . \tag{5.15}$$

Si ha allora:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \left(a_p^\dagger a_q e^{\mathcal{L}(t)} \hat{\varrho} \right) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \left(e^{\mathcal{L}'(t)} (a_p^\dagger a_q) \hat{\varrho} \right),$$

ma

$$e^{\mathcal{L}'(t)} \hat{X} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{X} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

e quindi in forza dell'unitarietà degli operatori considerati abbiamo anche, in tutta generalità:

$$e^{\mathcal{L}'(t)}(\hat{A}\hat{B}) = \left(e^{\mathcal{L}'(t)}\hat{A}\right)\left(e^{\mathcal{L}'(t)}\hat{B}\right) \quad . \tag{5.16}$$

Sfruttando la proprietà di fattorizzazione data dalla (5.16) abbiamo:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(a_p^\dagger a_q e^{\mathcal{L}(t)}\hat{\varrho}) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\left((e^{\mathcal{L}'(t)}a_p^\dagger)(e^{\mathcal{L}'(t)}a_q)\hat{\varrho}\right),$$

ed il calcolo di interesse si riconduce quindi alla valutazione della sola espressione

$$\exp\bigl(\mathcal{L}'(t)\bigr)a_p^\dagger, \tag{5.17}$$

poiché vale per ogni operatore $\hat{A}$ di $\mathcal{H}$ la seguente identità:

$$\left(\mathcal{L}'(t)\hat{A}\right)^\dagger = \mathcal{L}'(t)\hat{A}^\dagger, \tag{5.18}$$

che si ottiene immediatamente ricordando che:

$$\mathcal{L}'\cdot = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\cdot] \quad . \tag{5.19}$$

Per valutare ora concretamente l'espressione (5.17) distinguiamo nella Hamiltoniana di interazione due termini, un termine cinetico libero ed uno di interazione:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V},$$

$$\hat{H}_o = \sum_p \frac{p^2}{2m}a_p^\dagger a_p + \sum_\xi \frac{\xi^2}{2M}b_\xi^\dagger b_\xi, \tag{5.20}$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4} b_{\xi_1}^\dagger b_{\xi_2}^\dagger b_{\xi_3}b_{\xi_4}\bar{V}_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4} + \sum_{p\xi q\eta} a_p^\dagger b_\xi^\dagger a_q b_\eta V_{p\xi q\eta} \quad . \tag{5.21}$$

Corrispondentemente definiamo i seguenti superoperatori:

$$\mathcal{L}_o\cdot = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}_o,\cdot] \qquad \mathcal{V}\cdot = -\frac{i}{\hbar}[\hat{V},\cdot] \quad . \tag{5.22}$$

Diventa a questo punto opportuno richiamare alcune identità formali, in parte già utilizzate, che chiarifichino il legame fra le varie descrizioni, usando superoperatori agenti su $\mathcal{T}(\mathcal{H})$ (ed i loro aggiunti agenti sullo spazio duale $\mathcal{B}(\mathcal{H})$), corrispondenti degli usuali operatori agenti su $\mathcal{H}$ usati nel formalismo della funzione d'onda.

All'operatore di evoluzione temporale in descrizione di Schrödinger per la funzione d'onda, $\exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)$, si sostituisce come si è visto $\exp\big(\mathcal{L}(t)\big)$ dato da:

$$\exp\big(\mathcal{L}(t)\big)\cdot = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \cdot \exp\left(+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \tag{5.23}$$

che è appunto l'operatore aggiunto rispetto a (5.19). All'operatore di evoluzione temporale in descrizione di interazione che per la funzione d'onda risulta essere dato, utilizzando anche lo sviluppo formale fornito dalla formula di Schwinger, dalla seguente espressione:

$$\hat{U}(t,0) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_o t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\,\hat{V}(t')\right)$$

ove T indica la prescrizione di prodotto cronologicamente ordinato nello sviluppo dell'esponenziale e

$$\hat{V}(t') = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_o t'}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_o t'},$$

corrisponde il seguente superoperatore [33] da applicare all'operatore statistico:

$$\exp\big(\mathcal{L}_o(-t)\big)\exp\big(\mathcal{L}(t)\big) = T\exp\left(\int_0^t dt'\,\mathcal{V}(t')\right) \quad . \tag{5.24}$$

Nella (5.24) si ha:

$$\mathcal{V}(t') = \exp\big(\mathcal{L}_o(-t')\big)\mathcal{V}\exp\big(\mathcal{L}_o(t')\big) \quad . \tag{5.25}$$

Queste identità mostrano come $\mathcal{L}$, $\mathcal{L}'$ ed $\mathcal{V}(t)$ possano essere letti come generatori del gruppo che induce la dinamica del sistema in descrizione rispettivamente di Schrödinger, Heisenberg e di interazione. In particolare siamo interessati ad uno sviluppo in serie perturbativa del generatore in descrizione di Heisenberg, che possiamo ottenere dalla (5.24), passando alla corrispondente per gli operatori aggiunti:

$$\exp\big(\mathcal{L}'(t)\big) = T\exp\left(\int_0^t dt'\,\mathcal{V}'_{\mathrm{sx}}(t')\right)\exp\big(\mathcal{L}_o{}'(t)\big), \tag{5.26}$$

ove si è definito:

$$\mathcal{V}'_{\mathrm{dx}}(t') = \exp\big(\mathcal{L}_o{}'(t')\big)\mathcal{V}'\exp\big(\mathcal{L}_o{}'(-t')\big) \quad . \tag{5.27}$$

L'indice sx è stato introdotto poiché nella (5.26) il termine di potenziale $\mathcal{V}'_{\mathrm{sx}}(t')$ compare a sinistra, mentre più avanti introdurre una diversa espressione in cui compare a destra e che distingueremo da questa apponendo un indice dx. Possiamo ora sviluppare l'espressione ottenuta in serie:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} = e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} + \int_0^t dt'\, e^{\mathcal{L}_o{}'(t')}\mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t')} +$$

$$+ \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, e^{\mathcal{L}_o{}'(t')}\mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t''-t')}\mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t'')} + \dots \tag{5.28}$$

Operando un semplice cambio di variabile del tipo $t - t' = \tau$ nel primo integrale e analogamente per tutti i termini successivi si ottiene l'espressione seguente:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} = e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} + \int_0^t dt'\, e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t')}\mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t')} +$$

$$+ \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t')}\mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t'-t'')}\mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t'')} + \dots \tag{5.29}$$

che può essere nuovamente espressa in maniera compatta:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} = e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} \left[1 + \int_0^t dt'\, \mathcal{V}'_{\mathrm{dx}}(t') + \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, \mathcal{V}'_{\mathrm{dx}}(t')\mathcal{V}'_{\mathrm{dx}}(t'') + \dots \right] =$$

$$= e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} T \exp\left(\int_0^t dt'\, \mathcal{V}'_{\mathrm{dx}}(t') \right) = e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} T \exp\left(\int_0^t dt'\, e^{\mathcal{L}_o{}'(-t')}\mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t')} \right), \tag{5.30}$$

ove si è definito:

$$\mathcal{V}_{\mathrm{dx}}{}'(t') = \exp\bigl(\mathcal{L}_o{}'(-t')\bigr)\mathcal{V}' \exp\bigl(\mathcal{L}_o{}'(t')\bigr) \quad . \tag{5.31}$$

Quest'ultima è l'espressione cui faremo riferimento per lo sviluppo del nostro calcolo perturbativo e nel prosieguo ometteremo perciò sempre il pedice dx. In particolare siamo interessati ad espressioni del tipo:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} = e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} \left[1 + \int_0^t dt'\, \mathcal{V}'(t') + \right.$$

$$\left. \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, \mathcal{V}'(t')\mathcal{V}'(t'') + \dots \right] a^\dagger_{p_1} \dots a^\dagger_{p_n} a_{q_1} \dots a_{q_m} b^\dagger_{\xi_1} \dots b^\dagger_{\xi_k} b_{\eta_1} \dots b_{\eta_j} \quad . \tag{5.32}$$

Per valutare queste espressioni notiamo anzitutto le seguenti notevoli uguaglianze:

$$e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} a^\dagger_p = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} a^\dagger_p \qquad e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} a_q = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q^2}{2m}t} a_q, \tag{5.33a}$$

$$e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} b^\dagger_\xi = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{\xi^2}{2M}t} b^\dagger_\xi \qquad e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} b_\eta = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\eta^2}{2M}t} b_\eta \quad . \tag{5.33b}$$

Le relazioni contenute nella (5.33a) si ottengono a partire dalle (5.20) e (5.22), nonché dalla seguente identità operatoriale:

$$e^{t\hat{A}}\hat{B}e^{-t\hat{A}} = \hat{B}e^{\alpha t} \quad \text{se} \quad [\hat{A},\hat{B}] = \alpha\hat{B} \quad . \tag{5.34}$$

Nel nostro caso possiamo infatti fare le seguenti identificazioni:

$$\hat{A} = \sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^\dagger a_p \quad \text{e} \quad \hat{B} = a_k^\dagger$$

e in forza delle (5.1) abbiamo:

$$\left[\sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^\dagger a_p, a_k^\dagger\right] = \frac{k^2}{2m} a_k^\dagger \quad . \tag{5.35}$$

Per dimostrare le uguaglianze espresse dalla (5.33b) procediamo allo stesso modo notando che l'analoga della (5.35):

$$\left[\sum_\xi \frac{\xi^2}{2M} b_\xi^\dagger b_\xi, b_\eta^\dagger\right] = \frac{\eta^2}{2M} b_\eta^\dagger, \tag{5.36}$$

è verificata a prescindere dalla statistica cui gli operatori b soddisfano, ovvero vale se essi commutano, ma anche se anticommutano. Poiché inoltre la (5.35) resta vera anche per operatori soddisfacenti parentesi di commutazione, le (5.33) valgono anche per gli operatori b a prescindere dalle parentesi cui essi soddisfano. Sfruttando ripetutamente la (5.16) e la (5.34) abbiamo anche:

$$\begin{aligned} e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} &\left(a_{p_1}^\dagger \dots a_{p_n}^\dagger a_{q_1} \dots a_{q_m} b_{\xi_1}^\dagger \dots b_{\xi_k}^\dagger b_{\eta_1} \dots b_{\eta_j}\right) = \\ = \exp &\left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{i=1}^n \frac{{p_i}^2}{2m} - \sum_{i=1}^m \frac{{q_i}^2}{2m} + \sum_{i=1}^k \frac{{\xi_i}^2}{2M} - \sum_{i=1}^j \frac{{\eta_i}^2}{2M} \right] \right\} \\ &\left(a_{p_1}^\dagger \dots a_{p_n}^\dagger a_{q_1} \dots a_{q_m} b_{\xi_1}^\dagger \dots b_{\xi_k}^\dagger b_{\eta_1} \dots b_{\eta_j}\right) \quad . \end{aligned} \tag{5.37}$$

Questo risultato può essere letto in maniera particolarmente significativa interpretando gli operatori $a_{p_1}^\dagger \dots a_{p_n}^\dagger a_{q_1} \dots a_{q_m} b_{\xi_1}^\dagger \dots b_{\xi_k}^\dagger b_{\eta_1} \dots b_{\eta_j}$ come base lineare di *autooperatori* per il superoperatore $\mathcal{L}_o{}'$, definito da $\mathcal{L}_o{}' \cdot = i/\hbar[\hat{H}_o, \cdot]$ e dalla (5.20), relativi all'autovalore:

$$\frac{i}{\hbar} \left[\sum_{i=1}^n \frac{{p_i}^2}{2m} - \sum_{i=1}^m \frac{{q_i}^2}{2m} + \sum_{i=1}^k \frac{{\xi_i}^2}{2M} - \sum_{i=1}^j \frac{{\eta_i}^2}{2M} \right] \quad .$$

Per vedere questo consideriamo un arbitrario autostato $|\Phi\rangle$ di $\hat{H}_o$, che possiamo caratterizzare assegnando i numeri di occupazione, dicendo cioè il numero di particelle presenti con un determinato momento. Abbiamo in particolare $\hat{H}_o|\Phi\rangle = E_o|\Phi\rangle$ ove E_o è la somma delle energie cinetiche relative alle singole particelle, ovvero l'energia dello stato. Pensando al significato degli operatori come creatori e distruttori di particelle abbiamo:

$$\mathcal{L}_o{}' \left(a^\dagger_{p_1} \dots a^\dagger_{p_n} a_{q_1} \dots a_{q_m} b^\dagger_{\xi_1} \dots b^\dagger_{\xi_k} b_{\eta_1} \dots b_{\eta_j} \right) |\Phi\rangle =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}_o \left(a^\dagger_{p_1} \dots a^\dagger_{p_n} a_{q_1} \dots a_{q_m} b^\dagger_{\xi_1} \dots b^\dagger_{\xi_k} b_{\eta_1} \dots b_{\eta_j} \right) + \right.$$

$$\left. - \left(a^\dagger_{p_1} \dots a^\dagger_{p_n} a_{q_1} \dots a_{q_m} b^\dagger_{\xi_1} \dots b^\dagger_{\xi_k} b_{\eta_1} \dots b_{\eta_j} \right) \hat{H}_o \right] |\Phi\rangle =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \left[E_o + \sum_{i=1}^{n} \frac{{p_i}^2}{2m} - \sum_{i=1}^{m} \frac{{q_i}^2}{2m} + \sum_{i=1}^{k} \frac{{\xi_i}^2}{2M} - \sum_{i=1}^{j} \frac{{\eta_i}^2}{2M} - E_o \right] \left(a^\dagger_{p_1} \dots a^\dagger_{p_n} a_{q_1} \dots a_{q_m} \right.$$

$$\left. b^\dagger_{\xi_1} \dots b^\dagger_{\xi_k} b_{\eta_1} \dots b_{\eta_j} \right) |\Phi\rangle \quad . \tag{5.38}$$

Questi passaggi ed in particolare le (5.33), (5.37) e (5.38) mostrano l'opportunità della scelta degli operatori di creazione e distruzione di particelle con un determinato momento; in tal modo è immediato esplicitare la parte di evoluzione libera.

5.2 Sviluppo della serie perturbativa

Possiamo ora procedere alla valutazione esplicita della (5.17):

$$\exp\big(\mathcal{L}'(t)\big) a^\dagger_p,$$

per la quale desideriamo ottenere un'espressione della forma:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} a^\dagger_p = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t} \left[a^\dagger_p + \sum_{q_2 \xi_2 \eta_2} g_{p q_2 \xi_2 \eta_2}(t) a^\dagger_{q_2} b^\dagger_{\eta_2} b_{\xi_2} \right] , \tag{5.39}$$

che si concretizzerà nella (5.70) e per il termine aggiunto

$$e^{\mathcal{L}'(t)} a_q = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q^2}{2m}t} \left[a_q + \sum_{q_2 \xi_2 \eta_2} g^*_{q q_2 \xi_2 \eta_2}(t) b^\dagger_{\eta_2} b_{\xi_2} a_{q_2} \right] \tag{5.40}$$

nella (5.71).

Sviluppando la (5.17) abbiamo:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} a_p^\dagger = \left[e^{\mathcal{L}_o{}'(t)} + \int_0^t dt'\, e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t')} \mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t')} + \right.$$

$$\left. + \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t')} \mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t'-t'')} \mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t'')} + \ldots \right] a_p^\dagger = \tag{5.41}$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} a_p^\dagger + \int_0^t dt'\, e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t')} \mathcal{V}' e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t'} a_p^\dagger +$$

$$+ \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t')} \mathcal{V}' e^{\mathcal{L}_o{}'(t'-t'')} \mathcal{V}' e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t''} a_p^\dagger + \ldots$$

Osservando che in forza delle (5.1) e della (5.21):

$$\mathcal{V}' a_p^\dagger \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat{V}, a_p^\dagger] = \frac{i}{\hbar} \left[\frac{1}{2} \sum_{\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4} b^\dagger_{\xi_1} b^\dagger_{\xi_2} b_{\xi_3} b_{\xi_4} \bar{V}_{\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4} + \right.$$

$$\left. + \sum_{p_1 \xi_1 q_1 \eta_1} a^\dagger_{p_1} b^\dagger_{\xi_1} a_{q_1} b_{\eta_1} V_{p_1 \xi_1 q_1 \eta_1} \;,\; a_p^\dagger \right] = \frac{i}{\hbar} \sum_{p_1 \xi_1 \eta_1} a^\dagger_{p_1} b^\dagger_{\xi_1} b_{\eta_1} V_{p_1 \xi_1 p \eta_1}, \tag{5.42}$$

abbiamo:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} a_p^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} a_p^\dagger + \frac{i}{\hbar} \sum_{p_1 \xi_1 \eta_1} \int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t'} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m} + \frac{{\xi_1}^2}{2M} - \frac{{\eta_1}^2}{2M}\right)(t-t')} a_p^\dagger b^\dagger_{\xi_1} b_{\eta_1} V_{p_1 \xi_1 p \eta_1} +$$

$$+ \frac{i}{\hbar} \sum_{p_1 \xi_1 \eta_1} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t''} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m} + \frac{{\xi_1}^2}{2M} - \frac{{\eta_1}^2}{2M}\right)(t'-t'')}$$

$$e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t')} \mathcal{V}' (a^\dagger_{p_1} b^\dagger_{\xi_1} b_{\eta_1}) V_{p_1 \xi_1 p \eta_1} + \ldots \tag{5.43}$$

A questo punto abbiamo valutato i termini all'ordine zero e uno, ma per valutare opportunamente il termine successivo di ordine due dobbiamo stimare:

$$\mathcal{V}'\mathcal{V}'a_p^\dagger = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{1}{2}\sum_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4} b_{\xi_1}^\dagger b_{\xi_2}^\dagger b_{\xi_3} b_{\xi_4} \bar{V}_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4} + \right.$$

$$\left. + \sum_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger a_{q_1} b_{\eta_1} V_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} \ , \ \frac{i}{\hbar}\sum_{p_2\xi_2\eta_2} a_{p_2}^\dagger b_{\xi_2}^\dagger b_{\eta_2} V_{p_2\xi_2 p\eta_2}\right] \quad . \tag{5.44}$$

È ora opportuno introdurre alcune approssimazioni, che tengano conto del particolare contesto che ci interessa. Negli esperimenti considerati transita per l'apparecchio un solo neutrone per volta, trascuriamo perciò tutti i commutatori fra gli operatori del tipo b che portino ad avere più di un operatore di creazione di neutroni. Inoltre tralasciamo per semplicità i termini in $\bar{V}$ che tengono conto delle correlazioni e interazioni intermolecolari pensando per il momento trascurabile il potenziale di interazione fra le molecole del mezzo rispetto a quello neutrone-nucleo . Ci ritroviamo pertanto con il risultato seguente:

$$\mathcal{V}'\mathcal{V}'a_p^\dagger = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} \sum_{\xi_2\eta_2} a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1} b_{\xi_2}^\dagger b_{\eta_2} V_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} V_{q_1\xi_2 p\eta_2} \quad . \tag{5.45}$$

Introduciamo ora due tempi τ_o e τ_1 che caratterizzano il processo fisico. Il tempo τ_o corrisponde alla durata di una singola collisione, mentre il tempo τ_1 è il tempo intercorrente fra una collisione e l'altra $(\tau_o \ll \tau_1)$. Per ottenere la master-equation lavoriamo su una scala di tempi τ molto maggiore del tempo τ_o di durata di una singola collisione, ma minore o uguale del tempo intercorrente fra una collisione e l'altra τ_1, abbiamo cioè $\tau_o \ll \tau \leq \tau_1$. La scala di tempi su cui intendiamo lavorare e sulla quale la master-equation può essere considerata valida corrisponde ad un tempo già asintotico rispetto al tempo microfisico di durata dell'interazione, ma minore o prossimo al tempo corrispondente al libero cammino medio. Questa ipotesi ci induce a trascurare termini contenenti più di una coppia $b^\dagger b$ che abbiano origine dal verificarsi di più di una collisione. Trascuriamo inoltre termini con più operatori del tipo b che abbiamo origine da collisioni a più di due corpi, queste infatti sono estremamente rare in mezzi non particolarmente densi; inoltre considerare questi contributi implicherebbe il tenere anche i termini contenenti $\bar{V}$ e li trascuriamo perciò per coerenza con le ipotesi precedenti. Per selezionare i contributi procediamo all'ordinamento normale degli operatori di tipo b usando una tecnica analoga a quella usata in [36]. Si noti che per compiere questi passaggi non è necessaria alcuna ipotesi sulla natura delle parentesi di commutazione fra gli operatori del tipo b, la statistica cui essi obbediscono influenza solo gli eventuali termini correttivi contenenti più operatori b e descriventi quindi urti multipli. Otteniamo così dalla (5.45) la seguente:

$$\mathcal{V}'\mathcal{V}'a_p^\dagger = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{p_1\xi_1q_1\eta_1}\sum_{\eta_2} a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_2} V_{p_1\xi_1q_1\eta_1} V_{q_1\eta_1p\eta_2}, \tag{5.46}$$

e quindi dalla (5.43):

$$e^{\mathcal{L}'(t)}a_p^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}a_p^\dagger + \frac{i}{\hbar}\sum_{p_1\xi_1\eta_1}\int_0^t dt'\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t'} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_1}^2}{2M}\right)(t-t')} a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1} V_{p_1\xi_1p\eta_1} +$$

$$+\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{p_1\xi_1q_1\eta_1}\sum_{\eta_2}\int_0^t dt' \int_0^{t'} dt''\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t''} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)(t'-t'')}\times$$

$$\times e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)(t-t')} a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_2} V_{p_1\xi_1q_1\eta_1} V_{q_1\eta_1p\eta_2} + \ldots \tag{5.47}$$

Come passo successivo procediamo all'integrazione rispetto al tempo una prima volta ottenendo:

$$e^{\mathcal{L}'(t)}a_p^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}a_p^\dagger + \frac{i}{\hbar}\sum_{p_1\xi_1\eta_1} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_1}^2}{2M}\right)t}$$

$$\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{{\eta_1}^2}{2M}\right)t}-1}{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{{\eta_1}^2}{2M}\right)} a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1} V_{p_1\xi_1p\eta_1} + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{p_1\xi_1q_1\eta_1}\sum_{\eta_2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t}$$

$$\int_0^t dt'\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t'} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t'}$$

$$\left[\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t'}-1}{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)}\right] a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_2} V_{p_1\xi_1q_1\eta_1} V_{q_1\eta_1p\eta_2} + \ldots \tag{5.48}$$

ovvero riorganizzando i termini:

$$e^{\mathcal{L}'(t)}a_p^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}a_p^\dagger + \frac{i}{\hbar}\sum_{p_1\xi_1\eta_1}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} - e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_1}^2}{2M}\right)t}}{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{{\eta_1}^2}{2M}\right)}a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1}V_{p_1\xi_1 p\eta_1}+$$

$$+\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\sum_{p_1\xi_1q_1\eta_1}\sum_{\eta_2}e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t}\int_0^t dt'\,e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t'}$$

$$\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t'} - e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t'}}{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)}a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_2}V_{p_1\xi_1q_1\eta_1}V_{q_1\eta_1p\eta_2}+\dots \tag{5.49}$$

Passiamo ora al continuo rispetto a uno degli indici interni, cercando di dare un'opportuna prescrizione per valutare la (5.49). La scelta degli indici interni (q_1 o η_1) e non degli indici p, p_1, ξ_1 o η_2 per il passaggio al continuo è legata alle proprietà di regolarità. Gli altri indici compaiono anche negli operatori a e b ed il passaggio dal discreto al continuo è più delicato. Per quello che riguarda la dipendenza degli indici interni ci possiamo invece aspettare dall'espressione una regolarità sufficiente a giustificare l'approssimazione. La delta di conservazione dei momenti contenuta nel termine di potenziale (si confronti la (5.6)) blocca una delle due variabili interne e passiamo dunque al continuo rispetto all'altra che si può considerare libera. Vogliamo quindi valutare l'ultimo termine della (5.49) nel limite del continuo rispetto alla variabile η_1:

$$+\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\sum_{p_1\xi_1q_1}\sum_{\eta_2}\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\int_{-\infty}^{+\infty}d^3\eta_1 e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t}\int_0^t dt'\,e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t'}$$

$$\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t'} - e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t'}}{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)}a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_2}V_{p_1\xi_1q_1\eta_1}V_{q_1\eta_1p\eta_2}+\dots \tag{5.50}$$

consideriamo ora solo la parte di interesse e introduciamo la prescrizione seguente pensando di prolungare analiticamente l'integrale nel piano complesso:

$$\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\int_{-\infty}^{+\infty}d^3\eta_1\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t'}}{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)}V_{p_1\xi_1q_1\eta_1}V_{q_1\eta_1p\eta_2}=$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0}\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \int_{-\infty+i\epsilon}^{+\infty+i\epsilon} d^3\eta_1 \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_2{}^2}{2M}\right)t'}}{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta_1{}^2}{2M}+i\varepsilon-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_2{}^2}{2M}\right)} V_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} V_{q_1\eta_1 p\eta_2} \quad . \tag{5.51}$$

Cambiamo variabile di integrazione ponendo $\frac{\eta_1^2}{2M} = x$, ed ottenendo pertanto un integrale nel piano complesso della forma:

$$\int_0^{+\infty} dx\, d\Omega_{\eta_1} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(x+a)t}}{-\frac{i}{\hbar}(x+i\varepsilon+b)} g(x) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, d\Omega_{\eta_1} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(x+a)t}}{-\frac{i}{\hbar}(x+i\varepsilon+b)} g(x), \tag{5.52}$$

con $g(x) = \sqrt{2M^3x} f(x)$ ove $f(x)$ rappresenta la parte di potenziale che supponiamo essere sufficientemente regolare nella dipendenza dalla variabile x. Consideriamo ora l'integrale prolungato analiticamente nel semipiano superiore del piano complesso; possiamo applicare il teorema dei residui e valutare l'integrale chiudendo il cammino nel semipiano superiore del piano complesso. Poiché $t \geq 0$ ricorrendo al lemma di Jordan vediamo che il contributo legato al semicerchio superiore è nullo (il denominatore si annulla all'infinito e supponiamo che il termine di potenziale si annulli anch'esso o rimanga limitato) e resta solo il contributo fornito dai punti singolari del prolungamento analitico. Il polo legato al denominatore è stato però spostato nel semipiano inferiore dalla prescrizione assegnata e non contribuisce, restano quindi solo gli eventuali punti singolari del termine di potenziale. Questi possono però venire trascurati purché abbastanza lontani dall'asse reale pur di lavorare su tempi sufficientemente lunghi. Nelle nostre approssimazioni si ha pertanto che l'integrale considerato nella (5.51) è nullo. Sfruttando questa approssimazione la (5.49) può dunque essere riscritta:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} a_p^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} a_p^\dagger + \sum_{p_1\xi_1\eta_1}\sum_{p_2\eta_2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_1{}^2}{2M}\right)t} \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\eta_1^2}{2M}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi_1^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\eta_1{}^2}{2M}-\frac{p_1{}^2}{2m}-\frac{\xi_1{}^2}{2M}\right)}\right]$$

$$\frac{i}{\hbar}\left[V_{p_1\xi_1 p\eta_1} - V_{p_1\xi_1 p_2\eta_2}\frac{1}{\frac{p_2{}^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}+i\varepsilon-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}} V_{p_2\eta_2 p\eta_1}\right] a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1} + \dots \quad . \tag{5.53}$$

La (5.53) può anche essere scritta in maniera forse più significativa nel modo seguente:

$$e^{\mathcal{L}'(t)}a_p^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}a_p^\dagger + \sum_{p_1\xi_1\eta_1}\sum_{p_2\eta_2} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_1{}^2}{2M}\right)t}\left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\eta_1^2}{2M}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi_1^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\eta_1{}^2}{2M}-\frac{p_1{}^2}{2m}-\frac{\xi_1{}^2}{2M}\right)}\right]$$

$$\frac{i}{\hbar}\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}_1\rangle\, a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1}+\ldots \quad . \tag{5.54}$$

Si tratta ora, poiché nostro intento è proprio tenere conto, pur nelle approssimazioni di volta in volta esplicitate, di tutti gli ordini della serie perturbativa, di vedere come valutare i contributi di ordine superiore. Proseguendo nel calcolo si vede che, pur di tenere conto della prescrizione data per la stima della (5.50), la serie si sviluppa con una struttura che dal secondo ordine in poi si ripete, abbiamo cioè:

$$e^{\mathcal{L}'(t)}a_p^\dagger = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}a_p^\dagger + \sum_{p_1\xi_1\eta_1}\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}-e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_1{}^2}{2M}\right)t}}{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1{}^2}{2M}\right)}$$

$$\frac{i}{\hbar}\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}+$$

$$+\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}+\ldots|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}_1\rangle\, a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1} \quad . \tag{5.55}$$

Per dimostrarlo è sufficiente andare al terzo ordine della serie perturbativa osservando così il reiterarsi della struttura. Consideriamo in dettaglio il termine al terz'ordine:

$$\left[\int_0^t dt'\int_0^{t'}dt''\int_0^{t''}dt'''\, e^{\mathcal{L}_o{}'(t-t')}\mathcal{V}'e^{\mathcal{L}_o{}'(t'-t'')}\mathcal{V}'e^{\mathcal{L}_o{}'(t''-t''')}\mathcal{V}'e^{\mathcal{L}_o{}'(t''')}\right]a_p^\dagger \quad . \tag{5.56}$$

Sfruttando le (5.33) e le analoghe delle (5.44) e (5.45) possiamo ottenere direttamente l'espressione seguente in cui si è valutata la parte operatoriale:

$$\left(\frac{i}{\hbar}\right)^3\sum_{p_1\xi_1q_1\eta_1}\sum_{q_2\eta_2}\sum_{\eta_3}\int_0^t dt'\int_0^{t'}dt''\int_0^{t''}dt'''\, e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t'''}e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_2{}^2}{2m}+\frac{\eta_2{}^2}{2M}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)(t''-t''')}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)(t'-t'')}e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)(t-t')}a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_3}V_{p_1\xi_1q_1\eta_1}V_{q_1\eta_1q_2\eta_2}V_{q_2\eta_2p\eta_3} \quad . \tag{5.57}$$

Procediamo ora alle varie integrazioni rispetto al tempo evidenziando come la ripetuta applicazione della prescrizione di cui alla (5.50) porti al risultato preannunciato nella (5.55). Il primo passo porta a:

$$\left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \sum_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} \sum_{q_2\eta_2} \sum_{\eta_3} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)(t'-t'')} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)(t-t')}$$

$$\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t''} - e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{i}{\hbar}\frac{q_2{}^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)t''}}{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_2{}^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)} a^\dagger_{p_1} b^\dagger_{\xi_1} b_{\eta_3} V_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} V_{q_1\eta_1 q_2\eta_2} V_{q_2\eta_2 p\eta_3}, \tag{5.58}$$

che applicando nuovamente la prescrizione (5.50) diventa:

$$\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} \sum_{q_2\eta_2} \sum_{\eta_3} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)(t'-t'')} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)(t-t')}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t''} \frac{1}{\left(\frac{q_2{}^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)} a^\dagger_{p_1} b^\dagger_{\xi_1} b_{\eta_3} V_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} V_{q_1\eta_1 q_2\eta_2} V_{q_2\eta_2 p\eta_3}, \tag{5.59}$$

equivalente all'ultimo termine della (5.47) e che porta al risultato seguente per il contributo al terzo ordine:

$$\sum_{p_1\xi_1 q_1\eta_1} \sum_{p_2\eta_2} \sum_{\eta_3} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}\right)t} \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\eta_3{}^2}{2M}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi_1^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\eta_3{}^2}{2M}-\frac{p_1{}^2}{2m}-\frac{\xi_1{}^2}{2M}\right)}\right] a^\dagger_{p_1} b^\dagger_{\xi_1} b_{\eta_3}$$

$$\frac{i}{\hbar}\left[V_{p_1\xi_1 p\eta_3} - V_{p_1\xi_1 q_1\eta_1}\frac{1}{\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}} V_{q_1\eta_1 p\eta_3} + \right.$$

$$\left. + V_{p_1\xi_1 q_1\eta_1}\frac{1}{\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}} V_{q_1\eta_1 q_2\eta_2}\frac{1}{\frac{q_2{}^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}+i\varepsilon-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_3{}^2}{2M}} V_{q_2\eta_2 p\eta_3}\right], \tag{5.60}$$

ovvero, nel formalismo più compatto usato nelle (5.53) e (5.55):

$$\sum_{p_1\xi_1\eta_1} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1^2}{2m}+\frac{\xi_1^2}{2M}-\frac{\eta_1^2}{2M}\right)t} \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\eta_1{}^2}{2M}-\frac{p_1{}^2}{2m}-\frac{\xi_1{}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\eta_1{}^2}{2M}-\frac{p_1{}^2}{2m}-\frac{\xi_1{}^2}{2M}\right)}\right]$$

$$\frac{i}{\hbar}\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - \frac{p^2}{2m} - \frac{\eta_1^2}{2M} + i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}+$$

$$+\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - \frac{p^2}{2m} - \frac{\eta_1^2}{2M} + i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - \frac{p^2}{2m} - \frac{\eta_1^2}{2M} + i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}} + \ldots|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}_1\rangle\, a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1} \quad . \tag{5.61}$$

Si vede quindi come la struttura dei vari termini perturbativi si ripeta immutata ad ogni ordine. Ci si trova quindi, salendo negli ordini perturbativi, a calcolare l'elemento di matrice di un operatore della forma:

$$\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}} + \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}} + \ldots$$

riscrivibile nel modo seguente:

$$\hat{\mathsf{V}}\left(\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} - \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} + \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} + \ldots\right)\hat{\mathsf{V}}, \tag{5.62}$$

espressione che può essere resa ancora più compatta tramite l'introduzione di un operatore $\hat{\mathsf{R}}_z$ così definito:

$$\hat{\mathsf{R}}_z = \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} - \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} + \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} + \ldots \tag{5.63}$$

Il nome di questo operatore non è stato scelto casualmente, si tratta infatti di un operatore ben noto nell'ambito della teoria dello scattering [44,45], detto risolvente dell'operatore $\hat{\mathsf{H}}$ e usualmente così definito:

$$\hat{\mathsf{R}}_z = \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - z} \quad . \tag{5.64}$$

L'identificazione della (5.64) con la serie espressa nella (5.63) è naturalmente condizionata dalla convergenza della serie medesima, dipendente dalla struttura del potenziale che compare in $\hat{\mathsf{H}} = \hat{\mathsf{H}}_o + \hat{\mathsf{V}}$. Dalla definizione dell'operatore risolvente seguono alcune proprietà che riportiamo di seguito poiché serviranno più avanti nello sviluppo del calcolo:

$$\hat{\mathsf{R}}_z^\dagger = \hat{\mathsf{R}}_{z^*}, \tag{5.65}$$

$$[\hat{\mathsf{R}}_z, \hat{\mathsf{R}}_{z'}] = 0, \tag{5.66}$$

$$\hat{\mathsf{R}}_z - \hat{\mathsf{R}}_{z'} = \hat{\mathsf{R}}_z \hat{\mathsf{R}}_{z'} (z - z') = \hat{\mathsf{R}}_{z'} \hat{\mathsf{R}}_z (z - z'), \tag{5.67}$$

$$\hat{\mathsf{R}}_z = \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} - \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} \hat{\mathsf{V}} \hat{\mathsf{R}}_z, \tag{5.68a}$$

$$\hat{\mathsf{R}}_z = \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} - \hat{\mathsf{R}}_z \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} \quad . \tag{5.68b}$$

Le (5.68) possono essere dedotte dalle seguenti relazioni, che discendono immediatamente dalla definizione di risolvente e dalla scomposizione $\hat{\mathsf{H}} = \hat{\mathsf{H}}_o + \hat{\mathsf{V}}$:

$$(\hat{\mathsf{H}} - z)\hat{\mathsf{R}}_z = 1 = \hat{\mathsf{R}}_z (\hat{\mathsf{H}} - z) \tag{5.69a}$$

$$(\hat{\mathsf{H}}_o - z)\hat{\mathsf{R}}_z + \hat{\mathsf{V}}\hat{\mathsf{R}}_z = 1 = \hat{\mathsf{R}}_z (\hat{\mathsf{H}}_o - z) + \hat{\mathsf{R}}_z \hat{\mathsf{V}} \quad . \tag{5.69b}$$

Iterando la (5.68a) si ottiene la (5.63) che è proprio l'identità da noi usata per individuare l'operatore risolvente nel nostro calcolo perturbativo. Possiamo quindi finalmente scrivere il risultato ottenuto per la valutazione della (5.17) a tutti gli ordini:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} a^\dagger_p = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} a^\dagger_p + \sum_{p_1 \xi_1 \eta_1} e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1^2}{2m} + \frac{\xi_1^2}{2M} - \frac{\eta_1^2}{2M}\right)t} \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{{\eta_1}^2}{2M} - \frac{{p_1}^2}{2m} - \frac{{\xi_1}^2}{2M}\right)t} - 1}{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{{\eta_1}^2}{2M} - \frac{{p_1}^2}{2m} - \frac{{\xi_1}^2}{2M}\right)} \right]$$

$$\left(\frac{i}{\hbar}\right) \langle \mathbf{p}_1 \boldsymbol{\xi}_1 | \hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{p^2}{2m} - \frac{\eta_1^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}} | \mathbf{p} \boldsymbol{\eta}_1 \rangle \, a^\dagger_{p_1} b^\dagger_{\xi_1} b_{\eta_1} + \ldots \tag{5.70}$$

A questo risultato affianchiamo il seguente ottenuto facendo riferimento alla (5.18) e necessario per calcolare espressioni del tipo (5.12) che sono quelle per noi di interesse:

$$e^{\mathcal{L}'(t)} a_q = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q^2}{2m}t} a_q + \sum_{q_2 \xi_2 \eta_2} e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_2^2}{2m} + \frac{\eta_2^2}{2M} - \frac{\xi_2^2}{2M}\right)t} \left[\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{{\xi_2}^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m} - \frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t} - 1}{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{{\xi_2}^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m} - \frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)} \right]$$

$$\left(-\frac{i}{\hbar}\right) \langle \mathbf{q} \boldsymbol{\xi}_2 | \hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\eta_2^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}} | \mathbf{q}_2 \boldsymbol{\eta}_2 \rangle \, b^\dagger_{\xi_2} b_{\eta_2} a_{q_2} + \ldots \tag{5.71}$$

5.3 Derivazione della master-equation

Torniamo all'operatore statistico descrivente il sistema introdotto con la (5.7) e la cui struttura vogliamo vedere più in dettaglio. Lavoriamo direttamente nel limite del continuo, limite che opereremo più tardi anche nell'espressione della serie perturbativa. L'operatore statistico associato al sistema fisico dato da un singolo neutrone e dal macrosistema ha la forma [34]:

$$\hat{\varrho} = \int d^3k \, d^3k_1 a^\dagger_k \hat{\varrho}_{\rm s} a_{k_1} w(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \quad . \tag{5.72}$$

L'operatore $\hat{\varrho}_{\rm s}$, ove il pedice indica il fatto che questo operatore è legato alla descrizione del sistema macroscopico, si deve pensare ottenuto dall'azione di vari operatori di creazione e distruzione di nuclei del macrosistema sullo stato di vuoto del sistema complessivo, ad esempio può essere dato dal prodotto tensoriale dell'operatore canonico per il macrosistema con la diade data dallo stato di vuoto dello spazio di Fock dei soli neutroni, che scriveremo nel modo seguente:

$$\hat{\varrho}_{\rm s} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}, \tag{5.73}$$

con $Z = \operatorname{Tr} \hat{\varrho}_{\rm s}$. Si hanno per $\hat{\varrho}_{\rm s}$ le seguenti notevoli proprietà:

$$a_k \hat{\varrho}_{\rm s} = 0 \qquad \hat{\varrho}_{\rm s} a^\dagger_k = 0 \quad \forall \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3, \tag{5.74}$$

dovute al fatto che in forza delle (5.2) l'operatore di distruzione di un neutrone commutando con gli operatori relativi ai nuclei finisce ad agire sullo stato di vuoto dando zero, ed analogamente per l'azione da destra dell'operatore di creazione. Per verificare che $\hat{\varrho}$ è un operatore statistico con le opportune proprietà (si confronti la (4.5)) oltre a sfruttare la (5.74) bisogna chiedere alla funzione $w(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)$ le seguenti:

$$w^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = w(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) \tag{5.75a}$$

$$\int d^3k \, d^3k_1 \, h^*(\mathbf{k}) w(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) h(\mathbf{k}_1) \geq 0 \tag{5.75b}$$

$$\int d^3k \, w(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = 1 \quad . \tag{5.75c}$$

In queste espressioni $h(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k}|h\rangle$ e può essere visto come il generico stato dello spazio di Hilbert per il singolo neutrone (${\mathcal{H}_{\mathcal{N}}}^{(1)}$) sopra introdotto. Le proprietà della funzione $w(\mathbf{q},\mathbf{p})$ permettono di interpretarla come elemento di matrice, nella rappresentazione dei momenti, di un operatore statistico di prima quantizzazione, che associamo al neutrone in (${\mathcal{H}_{\mathcal{N}}}^{(1)}$), possiamo cioè scrivere:

$$w(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle \quad . \tag{5.76}$$

In conclusione è possibile stabilire, sulla base della rappresentazione (5.72), una corrispondenza biunivoca fra operatori statistici del sistema complessivo e operatori statistici di prima quantizzazione da associarsi al solo neutrone nel suo spazio di Hilbert di particella singola.

Ci preme notare come le funzioni w fattorizzabili, cioè scrivibili sotto forma di prodotto di due funzioni, $w(\mathbf{q},\mathbf{p}) = g(\mathbf{q})g^*(\mathbf{p})$, corrispondano a stati puri. Come si può facilmente intuire da quanto visto sinora, e come vedremo meglio più avanti, se anche al tempo $t = 0$ la funzione w fattorizza (e quindi lo stato che possiamo pensare di associarle nello spazio di Hilbert di particella singola è uno stato puro), l'effetto dell'interazione con il macrosistema è tale da fornire, dopo il calcolo della traccia parziale sui gradi di libertà del macrosistema, uno stato non più fattorizzato.
Una volta soddisfatte queste richieste per $\hat{\varrho}_{\mathrm{s}}$ e per la funzione $w(\mathbf{k},\mathbf{k}_1)$ è semplice verificare che l'operatore $\hat{\varrho}$ è un vero e proprio operatore statistico, e la dimostrazione è un caso particolare di quella che daremo nelle righe seguenti per giustificare la (5.77).

Dato un operatore $\hat{O}$ nello spazio del sistema complessivo della forma (si confronti la (5.13)):

$$\hat{O} = \int d^3p\, d^3q\, a_p^\dagger \langle \mathbf{p}|\hat{\mathsf{O}}^{(1)}|\mathbf{q}\rangle a_q, \tag{5.77}$$

ed un operatore statistico nello spazio di particella singola per il neutrone $\hat{\rho}^{(1)}$ vale la relazione seguente:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(\hat{O}\hat{\varrho}) = \mathrm{Tr}_{{\mathcal{H}_{\mathcal{N}}}^{(1)}}(\hat{\mathsf{O}}^{(1)}\hat{\rho}^{(1)}), \tag{5.78}$$

La (5.78) si ricava applicando più volte la (5.74) alla parte operatoriale e applicando le parentesi di commutazione fra gli operatori del tipo a nel limite del continuo (ovvero le (5.1) ove alla delta di Kronecker si sostituisca una delta di Dirac):

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(\hat{O}\hat{\varrho}) = \int d^3p\, d^3q\, d^3k\, d^3r\, \langle \mathbf{p}|\hat{\mathsf{O}}^{(1)}|\mathbf{q}\rangle\, \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(a_p^\dagger a_q a_k^\dagger \hat{\varrho}_{\mathrm{s}} a_r) w(\mathbf{k},\mathbf{r}) =$$

$$\int d^3p\, d^3q\, d^3k\, d^3r\, \langle \mathbf{p}|\hat{\mathsf{O}}^{(1)}|\mathbf{q}\rangle \left[\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{q})\, \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(a_p^\dagger \hat{\varrho}_{\mathrm{s}} a_r) - \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(a_p^\dagger a_k^\dagger a_q \hat{\varrho}_{\mathrm{s}} a_r)\right] w(\mathbf{k},\mathbf{r}) =$$

$$\int d^3p\, d^3q\, d^3k\, d^3r\, \langle \mathbf{p}|\hat{\mathsf{O}}^{(1)}|\mathbf{q}\rangle \left[\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{q})\, \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(a_p^\dagger \hat{\varrho}_{\mathrm{s}} a_r)\right] w(\mathbf{k},\mathbf{r}) =$$

$$\int d^3p\, d^3q\, d^3k\, d^3r\, \langle \mathbf{p}|\hat{\mathsf{O}}^{(1)}|\mathbf{q}\rangle \times$$

$$\times \left[\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{q})\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{p})\, \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(\hat{\varrho}_{\mathrm{s}}) - \delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{q})\, \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(\hat{\varrho}_{\mathrm{s}} a_p^\dagger a_r)\right] w(\mathbf{k},\mathbf{r}) =$$

$$\int d^3p\, d^3q\, d^3k\, d^3r\, \langle \mathbf{p}|\hat{\mathsf{O}}^{(1)}|\mathbf{q}\rangle \left[\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{q})\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{p})\, \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}(\hat{\varrho}_{\mathrm{s}})\right] w(\mathbf{k},\mathbf{r}) =$$

$$\int d^3p\, d^3q\, \langle \mathbf{p}|\hat{\mathsf{O}}^{(1)}|\mathbf{q}\rangle w(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \int d^3p\, d^3q\, \langle \mathbf{p}|\hat{\mathsf{O}}^{(1)}|\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle \quad . \tag{5.79}$$

Queste identità ci serviranno per operare il passaggio ad una descrizione ridotta per il neutrone.

Come menzionato all'inizio del capitolo la quantità di interesse è data dalla (5.14) che riportiamo per comodità:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\left(e^{\mathcal{L}'(t)}(a_p^\dagger a_q)\hat{\varrho}\right), \tag{5.80}$$

che possiamo ora riscrivere, usando la rappresentazione di $\hat{\varrho}$ data dalla (5.72), nel modo seguente:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\left((e^{\mathcal{L}'(t)}a_p^\dagger)(e^{\mathcal{L}'(t)}a_q)\int d^3k\, d^3k_1 a_k^\dagger \hat{\varrho}_{\mathrm{s}} a_{k_1} w(\mathbf{k},\mathbf{k}_1)\right), \tag{5.81}$$

ove gli operatori $\left[\exp\big(\mathcal{L}'(t)\big)a_p^\dagger\right]$ ed $\left[\exp\big(\mathcal{L}'(t)\big)a_q\right]$ sono dati rispettivamente dalle (5.70) e (5.71). Sviluppiamo ora perturbativamente quest'ultima espressione (5.81) con l'intento di ottenere una master-equation che descriva l'evoluzione temporale dell'operatore statistico associato al neutrone. La funzione $w(\mathbf{q},\mathbf{p})$ rappresenta l'elemento di matrice di questo operatore:

$$w(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle; \tag{5.82}$$

in particolare supponiamo descriva uno stato in cui la funzione d'onda del neutrone non sia localizzata in modo eccessivo nello spazio delle coordinate, ad esempio $\Delta x \gg r_o$ ove Δx è l'incertezza nelle coordinate e r_o il range del potenziale neutrone-nucleo. Di conseguenza si avrà una forte localizzazione nello spazio dei momenti, per cui l'elemento di matrice della (5.82) ci aspettiamo sia prossimo a zero se i due argomenti sono fortemente discosti fra loro. Se t è la scala di tempi su cui svolgiamo la nostra analisi abbiamo, pensando che nell'evoluzione temporale sia preponderante il termine cinetico:

$$\frac{1}{\hbar}\left|\frac{p^2}{2m}-\frac{q^2}{2m}\right| t \approx \frac{1}{m} p\,\Delta p \frac{t}{\hbar} \approx \frac{p}{m}\frac{t}{\Delta x} \approx \frac{vt}{\Delta x} \ll 1, \tag{5.83}$$

ove v è la velocità del neutrone e la disuguaglianza indicata è vera se $vt \ll \Delta x$, ovvero per le scelte precedenti relative al tempo t, $v\tau_o \ll \Delta x$ (τ_o è il tempo microfisico di durata dell'interazione). Ma $v\tau_o \approx r_o$ ove r_o è il range del potenziale, e l'ipotesi da noi fatta $\Delta x \gg r_o$ garantisce proprio la validità della (5.83); si vede così il legame fra la scelta del tempo t e il valore delle differenze di energie in gioco.

Consideriamo anzitutto la traccia del prodotto delle (5.70) e (5.71) applicato all'operatore statistico dato dalla (5.72), lavorando anche qui direttamente nel limite del continuo, poiché gli indici di operatore sono ora diventati argomenti di funzione:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\left((e^{\mathcal{L}'(t)}a_p^\dagger)(e^{\mathcal{L}'(t)}a_q)\int d^3k\, d^3k_1 a_k^\dagger \hat{\varrho}_s a_{k_1} w(\mathbf{k},\mathbf{k}_1)\right) = e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{q^2}{2m}\right)t}\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\left(a_p^\dagger a_q \hat{\varrho}\right)+$$

$$+e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{q^2}{2m}\right)t}\int d^3\xi_1\, d^3\eta_1\, d^3p_1\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1^2}{2m}+\frac{\xi_1^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}\right)t}\left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{p^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}}\right]$$

$$\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}_1\rangle\,\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\left(a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1} a_q \hat{\varrho}\right)+$$

$$+e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{q^2}{2m}\right)t}\int d^3\xi_2\, d^3\eta_2\, d^3q_2\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\xi_2^2}{2M}\right)t}\left[\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{{\xi_2}^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{q^2}{2m}+\frac{{\xi_2}^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}}\right]$$

$$\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}_2 | \hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi_2^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} | \mathbf{q}_2 \boldsymbol{\eta}_2 \rangle \, \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \left(a_p^\dagger b_{\xi_2}^\dagger b_{\eta_2} a_{q_2} \hat{\varrho} \right) +$$

$$+ \int d^3\xi_1 \, d^3\eta_2 \, d^3\lambda \, d^3p_1 \, d^3q_2 \, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m} + \frac{{\xi_1}^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m} - \frac{{\eta_2}^2}{2m} \right) t} \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{{p_1}^2}{2m} - \frac{{\xi_1}^2}{2M} \right) t} - 1}{\frac{p^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{{p_1}^2}{2m} - \frac{{\xi_1}^2}{2M}} \right]$$

$$\langle \mathbf{p}_1 \boldsymbol{\xi}_1 | \hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{p^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} | \mathbf{p} \boldsymbol{\lambda} \rangle \left[\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m} - \frac{{\eta_2}^2}{2M} \right) t} - 1}{\frac{q^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m} - \frac{{\eta_2}^2}{2M}} \right]$$

$$\langle \mathbf{q} \boldsymbol{\lambda} | \hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} | \mathbf{q}_2 \boldsymbol{\eta}_2 \rangle \, \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \left(a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_2} a_{q_2} \hat{\varrho} \right) + \ldots \tag{5.84}$$

Nell'ultimo termine avremmo avuto il prodotto di quattro operatori del tipo b, ma coerentemente con quanto fatto nello sviluppo della serie perturbativa (si confronti quanto detto sotto la (5.44)) abbiamo proceduto ad ordinamento normale rispetto ad essi tenendo solo il contributo bilineare negli operatori del tipo b.
Come si era detto a commento della (5.13) l'indice (1) indica operatori sullo spazio di particella singola, $L^2(\mathbb{R}^3)$, mentre l'indice (2) operatori sullo spazio di due particelle.

Per procedere valutiamo le tracce dei diversi operatori che forniranno anche delle indicazioni sul carattere di regolarità nella dipendenza dalle variabili dei fattori che entrano negli integrali, indicazioni cui faremo ricorso per valutare analiticamente le somme (o nel limite del continuo gli integrali) sui vari indici. Per il primo termine si ha:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \left(a_p^\dagger a_q \hat{\varrho} \right) = \int d^3k \, d^3k_1 w(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \left(a_p^\dagger a_q a_k^\dagger \hat{\varrho}_s a_{k_1} \right) =$$

(sfruttando la dimostrazione effettuata per la (5.78))

$$= w(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \langle \mathbf{q} | \hat{\rho}^{(1)} | \mathbf{p} \rangle \quad . \tag{5.85}$$

In modo analogo si valuta l'altro termine che compare nella (5.84):

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \left(a_{p_1}^\dagger b_{\xi_1}^\dagger b_{\eta_1} a_q \hat{\varrho} \right) = w(\mathbf{q}, \mathbf{p}_1) \, \Gamma(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\xi}_1), \tag{5.86}$$

ove abbiamo introdotto l'espressione:

$$\Gamma(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\xi}_1) \equiv \mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}\left(b^{\dagger}_{\xi_1} b_{\eta_1} \hat{\varrho}_{\mathrm{s}}\right), \tag{5.87}$$

che si rivelerà di particolare importanza nel resto della trattazione. Osserviamo che per la ciclicità della traccia si ha:

$$\Gamma(\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\xi}_1) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}\left(b^{\dagger}_{\xi_1} b_{\eta_1} \hat{\varrho}_{\mathrm{s}}\right) = \Gamma^*(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\eta}_1) \quad . \tag{5.88}$$

Nel prosieguo faremo spesso riferimento a questa funzione ed alle sue proprietà che naturalmente dipendono dallo stato del macrosistema. Se considerassimo ad esempio un gas perfetto all'equilibrio descritto da un operatore statistico della forma (5.73) la funzione Γ avrebbe la forma:

$$\Gamma(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) = \delta^3\left(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\eta}\right) \gamma(\boldsymbol{\xi}) \quad .$$

Un altro caso in cui la funzione Γ presenta un fattore deltiforme si presenta se il sistema nel limite termodinamico gode di perfetta invarianza traslazionale. In questo caso il momento totale del sistema macroscopico, che identifichiamo con l'operatore

$$\hat{\vec{P}} = \int d^3\xi \, \vec{\xi} \, b^{\dagger}_{\xi} b_{\xi},$$

commuta con l'Hamiltoniana totale relativa al sistema,

$$[\hat{P}_x, \hat{H}] = [\hat{P}_y, \hat{H}] = [\hat{P}_z, \hat{H}] = 0 \tag{5.89}$$

ed è quindi una costante del moto nel limite termodinamico. In questo caso si può trovare un sistema ortonormale completo di autofunzioni comuni ai due operatori, che scriviamo nella forma $|E, \mathbf{P}, j\rangle$, dove E e $\mathbf{P}$ rappresentano gli autovalori per l'energia ed il momento rispettivamente, mentre j è un eventuale indice di degenerazione. Sfruttando questo sistema possiamo calcolare la traccia di interesse:

$$\Gamma(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}\left(b^{\dagger}_{\xi} b_{\eta} \hat{\varrho}_{\mathrm{s}}\right) = \sum_{\mathrm{j}} \int d^3P \int dE \, \langle E, \mathbf{P}, j | Z^{-1} e^{-\beta\hat{H}} b^{\dagger}_{\xi} b_{\eta} | E, \mathbf{P}, j\rangle,$$

ma

$$b_\eta|E,\mathbf{P},j\rangle = cost\,|E,(\mathbf{P}-\eta),j\rangle$$

da cui:

$$\langle E,\mathbf{P},j|Z^{-1}e^{-\beta\hat{H}}b^\dagger_\xi b_\eta|E,\mathbf{P},j\rangle \propto Z^{-1}e^{-\beta E}\langle E,(\mathbf{P}-\xi),j|E,(\mathbf{P}-\eta),j\rangle,$$

nullo ogni volta che $\boldsymbol{\xi}\neq\boldsymbol{\eta}$. In generale ammetteremo comunque che le interazioni siano quasi elastiche e che pertanto la funzione Γ sia significativamente diversa da zero solo quando i suoi due argomenti sono prossimi fra di loro, e questo equivale a piccoli momenti trasferiti. Lavoriamo quindi nell'ipotesi in cui il fatto che il macrosistema sia all'equilibrio determini una sorta di taglio sui possibili valori dei momenti trasferiti, rendendo importanti solo i contributi relativi a piccoli momenti [7]. Dalla (5.84) otteniamo allora la seguente, purtroppo piuttosto ingombrante, espressione:

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\left(a^\dagger_p a_q\hat{\varrho}(t)\right) = \langle\mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}(t)|\mathbf{p}\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{q^2}{2m}\right)t}$$

$$\left\{\langle\mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle + \int d^3\xi_1\,d^3\eta_1\,d^3p_1\,e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1^2}{2m}+\frac{\xi_1^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}\right)t}\left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{p^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}}\right]\right.$$

$$\langle\mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}_1\rangle\,\langle\mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle\Gamma(\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\xi}_1)+$$

$$+\int d^3\xi_2\,d^3\eta_2\,d^3q_2\,e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\xi_2^2}{2M}\right)t}\left[\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{{\xi_2}^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{q^2}{2m}+\frac{{\xi_2}^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}}\right]$$

$$\left.\langle\mathbf{q}\boldsymbol{\xi}_2|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\xi_2^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\eta}_2\rangle\,\langle\mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle\Gamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_2)\right\}+$$

$$+\int d^3\xi_1\,d^3\eta_2\,d^3\lambda\,d^3p_1\,d^3q_2\,e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2m}\right)t}$$

$$\langle\mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\eta}_2\rangle\left[\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}}\right]$$

$$\langle \mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle \Gamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_1) \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{p^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}} \right]$$

$$\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\lambda}\rangle \quad . \tag{5.90}$$

La struttura fortemente compatta della funzione Γ introdotta nella (5.87) porta ad alcune importanti semplificazioni; in espressioni della forma:

$$\int d^3\xi_1\, d^3\eta_1\, d^3p_1\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1^2}{2m}+\frac{\xi_1^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}\right)t} \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{p^2}{2m}+\frac{{\eta_1}^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}} \right]$$

$$\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}_1\rangle \,\langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle \Gamma(\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\xi}_1) \tag{5.91}$$

si ha $\boldsymbol{\eta}_1 \simeq \boldsymbol{\xi}_1$, ma in forza della conservazione del momento implicita nell'azione del potenziale (si confronti la (5.6)) abbiamo anche:

$$\mathbf{p}_1 + \boldsymbol{\xi}_1 = \mathbf{p} + \boldsymbol{\eta}_1,$$

e quindi:

$$\boldsymbol{\eta}_1 \simeq \boldsymbol{\xi}_1 \Longrightarrow \mathbf{p} \simeq \mathbf{p}_1 \quad . \tag{5.92}$$

L'argomento dell'esponenziale risulta allora piccolo nel senso che sulla scala di tempi t che stiamo considerando, che è quella su cui $\hat{\rho}^{(1)}$ varia sensibilmente, anche se $t \gg \tau_o$, si ha tuttavia:

$$\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p_1^2}{2m}+\frac{\xi_1^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}\right)t \ll 1$$

(si confronti anche quanto detto a seguito della (5.82)). Si può allora sviluppare l'esponenziale tenendo il primo contributo non nullo lineare in t e ottenendo così il termine dominante della (5.91), che è:

$$\int d^3\xi_1\, d^3\eta_1\, d^3p_1 \;\; \frac{i}{\hbar}\, t\, \langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}_1\rangle \times$$

$$\times \langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle \Gamma(\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\xi}_1) \quad . \tag{5.93}$$

Prima di riscrivere la (5.90) usufruendo della notevole semplificazione introdotta dalla (5.93) ci occupiamo anche dell'ultimo termine della (5.90), dato da:

$$\int d^3\xi_1\, d^3\eta_2\, d^3\lambda\, d^3p_1\, d^3q_2\, e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2m}\right)t}$$

$$\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\eta}_2\rangle \left[\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}}\right]$$

$$\langle \mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle \varGamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_1)\left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{p^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}}\right]$$

$$\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\lambda}\rangle \quad . \tag{5.94}$$

la cui struttura non consente più le precedenti semplificazioni. Una stima di questa espressione richiede considerazioni più complesse esposte nell'appendice A. Per semplificare la notazione poniamo:

$$\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\lambda}\rangle = S_{p_1\xi_1 p\lambda}, \tag{5.95}$$

da cui:

$$\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\eta}_2\rangle = S^*_{q_2\eta_2 q\lambda} \quad . \tag{5.96}$$

Se ora operiamo il seguente cambio di variabile

$$\frac{\lambda^2}{2M}=x$$

possiamo riscrivere la (5.94) nel modo seguente:

$$\int_0^{+\infty} dx \int d^3\xi_1\, d^3\eta_2\, d^3p_1\, d^3q_2 \int d\Omega_\lambda \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}+x-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{p^2}{2m}+x-\frac{{p_1}^2}{2m}-\frac{{\xi_1}^2}{2M}}\right]$$

$$\left[\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2}{2m}+x-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}\right)t}-1}{\frac{q^2}{2m}+x-\frac{{q_2}^2}{2m}-\frac{{\eta_2}^2}{2M}}\right] g(x), \tag{5.97}$$

ove analogamente alla (5.52) si è posto:

$$g(x) = \sqrt{2M^3x}\, S_{p_1\xi_1 p\lambda}\, S^*_{q_2\eta_2 q\lambda}\, \langle \mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle\, \Gamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_1)\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=x} \quad .$$

La scelta della variabile $\boldsymbol{\lambda}$ è dovuta al fatto che si tratta dell'unica variabile interna, non collegata agli operatori statistici $\hat{\rho}^{(1)}$ o $\hat{\varrho}_s$. Nello sviluppo dell'ultimo esponenziale si è tenuto solo il fattore 1 poiché il suo argomento è molto piccolo in forza della presenza della funzione Γ e della delta di conservazione dei momenti. Se ora nella (5.97) poniamo:

$$\begin{aligned} \frac{{p_1}^2}{2m} + \frac{{\xi_1}^2}{2M} - \frac{p^2}{2m} &= a \\ \frac{{q_2}^2}{2m} + \frac{{\eta_2}^2}{2M} - \frac{q^2}{2m} &= b, \end{aligned} \tag{5.98}$$

otteniamo dalla (5.97) proprio la (A.1) di cui viene data una stima nell'appendice e quindi il risultato seguente:

$$\begin{aligned} \int d^3\xi_1\, d^3\eta_2\, d^3p_1\, d^3q_2 \int d\Omega_\lambda\, \pi\lambda M \Bigg\{ & S_{p_1\xi_1 p\lambda}\, S^*_{q_2\eta_2 q\lambda}\, \langle \mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}} \\ \Gamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_1) + S_{p_1\xi_1 p\lambda}\, S^*_{q_2\eta_2 q\lambda}\, & \langle \mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{{q_2}^2}{2m}+\frac{{\eta_2}^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}} \Gamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_1) \Bigg\} \times \\ & \times \frac{\sin\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi_1^2}{2M}\right)\frac{t}{\hbar}}{\frac{p^2}{2m}+\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi_1^2}{2M}} \quad . \end{aligned} \tag{5.99}$$

Questa espressione può essere ulteriormente semplificata poiché $\hat{\rho}^{(1)}$ e $\hat{\varrho}_s$ sono stati scelti in modo tale che sulla scala di tempi considerati l'argomento della funzione seno sia molto piccolo:

$$\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi_1^2}{2M}\right)\frac{t}{\hbar} \ll 1,$$

da cui si ha:

$$\frac{\sin\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi_1^2}{2M}\right)\frac{t}{\hbar}}{\frac{p^2}{2m}+\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\eta_2^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi_1^2}{2M}} \simeq \frac{t}{\hbar} \quad .$$

Sfruttando inoltre l'ipotizzata lenta variabilità dei termini di potenziale otteniamo per la (5.99) la seguente:

$$\int d^3\xi_1\, d^3\eta_2\, d^3p_1\, d^3q_2 \int d\Omega_\lambda \left(\frac{2\pi t}{\hbar}\right) \left(\sqrt{M\lambda}\, S_{p_1\xi_1 p\lambda}\right)\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}} \langle \mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle$$

$$\Gamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_1) \left(\sqrt{M\lambda}\, S^*_{q_2\eta_2 q\lambda}\right)\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{q_2{}^2}{2m}+\frac{\eta_2{}^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}} \quad . \tag{5.100}$$

Vogliamo ora verificare che le approssimazioni fatte non distruggano la positività e la traccia dell'operatore statistico. Consideriamo quindi più in dettaglio l'espressione della funzione Γ introducendo un sistema di autofunzioni per l'Hamiltoniana del macrosistema con il quale il neutrone interagisce, che indicheremo con u_{m} ove m indica in generale una collezione di indici dati dai numeri quantici che individuano queste autofunzioni:

$$\Gamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_1) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}\left(b^\dagger_{\xi_1} b_{\eta_2} \hat{\varrho}_{\mathrm{s}}\right) = \sum_{\mathrm{m,n}} \langle u_{\mathrm{m}}|b_{\eta_2}|u_{\mathrm{n}}\rangle\langle u_{\mathrm{n}}|b^\dagger_{\xi_1}|u_{\mathrm{m}}\rangle \frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z}, \tag{5.101}$$

ove naturalmente $Z = \sum_{\mathrm{n}} e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}$.
Possiamo ora riscrivere la (5.100):

$$\int d^3\xi_1\, d^3\eta_2\, d^3p_1\, d^3q_2 \int d\Omega_\lambda \sum_{\mathrm{m,n}} \left(\frac{2\pi t}{\hbar}\right) \left[\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\eta}_2\rangle\right.$$

$$\left.\sqrt{M\lambda}\langle u_{\mathrm{m}}|b_{\eta_2}|u_{\mathrm{n}}\rangle\right]\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{q_2{}^2}{2m}+\frac{\eta_2{}^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}} \langle \mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle \left[\langle u_{\mathrm{n}}|b^\dagger_{\xi_1}|u_{\mathrm{m}}\rangle\sqrt{M\lambda}\right.$$

$$\left.\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{p^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\lambda}\rangle\right]\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi_1{}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}} \frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z} \quad . \tag{5.102}$$

La (5.90) diviene alfine, tenendo solo i termini lineari in t:

$$\langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}(t)|\mathbf{p}\rangle \simeq \langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle + \left(\frac{i}{\hbar}t\right)\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{q^2}{2m}\right)\langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle +$$

$$+\left(\frac{i}{\hbar}t\right)\int d^3\xi_1\, d^3\eta_1\, d^3p_1\, \langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{p^2}{2m} - \frac{\eta_1^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}_1\rangle \times$$

$$\times \langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle \Gamma(\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\xi}_1)+$$

$$-\left(\frac{i}{\hbar}t\right)\int d^3\xi_2\, d^3\eta_2\, d^3q_2\, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}_2|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\xi_2^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\eta}_2\rangle \times$$

$$\times \langle \mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle \Gamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_2)+$$

$$+\int d^3\xi_1\, d^3\eta_2\, d^3p_1\, d^3q_2 \int d\Omega_\lambda \sum_{\mathrm{m,n}} \frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z}\left(\frac{2\pi t}{\hbar}\right)\Bigg[\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}+$$

$$-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\eta}_2\rangle\sqrt{M\lambda}\langle u_{\mathrm{m}}|b_{\eta_2}|u_{\mathrm{n}}\rangle\Bigg]\Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{{q_2}^2}{2m}+\frac{{\eta_2}^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}} \langle \mathbf{q}_2|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle$$

$$\Bigg[\langle u_{\mathrm{n}}|b^\dagger_{\xi_1}|u_{\mathrm{m}}\rangle\sqrt{M\lambda}\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\lambda}\rangle\Bigg]\Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{{p_1}^2}{2m}+\frac{{\xi_1}^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}} . \tag{5.103}$$

Si noti che per ottenere la (5.103) si è sviluppato l'esponenziale:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{q^2}{2m}\right)t}$$

tenendo solo i termini sino a quello lineare in t in accordo con quanto detto sotto la (5.81). Dalla (5.103) ricordando che il tempo t può essere considerato macroscopicamente molto piccolo otteniamo la seguente equazione per la derivata temporale dell'operatore statistico:

$$\langle \mathbf{q}|\frac{d}{dt}\hat{\rho}^{(1)}(t)|\mathbf{p}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle \mathbf{q}|[\hat{\mathsf{H}}_o^{(1)},\hat{\rho}^{(1)}]|\mathbf{p}\rangle+$$

$$-\frac{i}{\hbar}\int d^3\xi_2\, d^3\eta_2\, d^3q_1\, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}_2|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\xi_2^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}_2\rangle\langle \mathbf{q}_1|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}\rangle\Gamma(\boldsymbol{\eta}_2,\boldsymbol{\xi}_2)$$

$$+\frac{i}{\hbar}\int d^3\xi_1\, d^3\eta_1\, d^3p_1\, \langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta_1^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}_1\rangle\langle \mathbf{q}|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle\Gamma(\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\xi}_1)$$

$$+\int d^3p_1\, d^3\xi_1\, d^3q_1\, d^3\eta_2 \int d\Omega_\lambda \sum_{\mathrm{m,n}}\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z}\Bigg[\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}+$$

$$-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}_2\rangle\sqrt{M\lambda}\langle u_{\mathrm{m}}|b_{\eta_2}|u_{\mathrm{n}}\rangle\Bigg]\Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{{\eta_2}^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}}$$

$$\langle \mathbf{q}_1|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle \Bigg[\langle u_{\mathrm{n}}|b^{\dagger}_{\xi_1}|u_{\mathrm{m}}\rangle \sqrt{M\lambda}$$

$$\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}_1|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{p^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{p}\boldsymbol{\lambda}\rangle \Bigg] \Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M} = \frac{p_1{}^2}{2m} + \frac{\xi_1{}^2}{2M} - \frac{p^2}{2m}} \quad . \tag{5.104}$$

Abbiamo così alfine ottenuto la master-equation. Volendo mettere in evidenza la struttura generale del tipo (4.23) procediamo alle identificazioni seguenti:

$$\langle \mathbf{q}|\hat{\mathbf{V}}^{(1)}|\mathbf{q}_1\rangle \equiv \int d^3\xi_2\, d^3\eta_2\, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}_2|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi_2^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}_2\rangle \mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta}_2, \boldsymbol{\xi}_2), \tag{5.105}$$

$$\langle \mathbf{q}|\hat{L}^{(1)}_{\alpha}|\mathbf{q}_1\rangle \equiv \langle \mathbf{q}|\hat{L}^{(1)}_{\hat{\lambda},\mathrm{m},\mathrm{n}}|\mathbf{q}_1\rangle \equiv \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}} \Bigg[\int d^3\eta_2\, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} +$$

$$-\hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}_2\rangle \sqrt{M\lambda} \langle u_{\mathrm{m}}|b_{\eta_2}|u_{\mathrm{n}}\rangle \Bigg] \Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M} = \frac{q_1{}^2}{2m} + \frac{\eta_2{}^2}{2M} - \frac{q^2}{2m}} ,$$

ove $\hat{\lambda}$ indica il versore diretto come $\boldsymbol{\lambda}$,

$$\langle \mathbf{q}_1|\hat{L}^{(1)\dagger}_{\alpha}|\mathbf{q}\rangle \equiv \langle \mathbf{q}|\hat{L}^{(1)}_{\hat{\lambda},\mathrm{m},\mathrm{n}}|\mathbf{q}_1\rangle^* \equiv \sqrt{\frac{2\pi}{\hbar}} \Bigg[\int d^3\xi_2\, \langle u_{\mathrm{n}}|b^{\dagger}_{\xi_2}|u_{\mathrm{m}}\rangle \sqrt{M\lambda} \langle \mathbf{q}_1\boldsymbol{\xi}_2|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} +$$

$$-\hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}\rangle \Bigg] \Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M} = \frac{q_1{}^2}{2m} + \frac{\xi_2{}^2}{2M} - \frac{q^2}{2m}} \quad . \tag{5.106}$$

Si vede allora che l'equazione per l'evoluzione temporale dell'operatore statistico può essere scritta nella forma:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{\mathsf{H}}^{(1)}_o, \hat{\rho}^{(1)}(t)] - \frac{i}{\hbar}\left(\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\hat{\rho}^{(1)}(t) - \hat{\rho}^{(1)}(t)\hat{\mathbf{V}}^{(1)\dagger}\right) + \sum_{\alpha} \hat{L}^{(1)}_{\alpha}\hat{\rho}^{(1)}(t)\hat{L}^{(1)\dagger}_{\alpha}, \tag{5.107}$$

ove si è fatta l'identificazione:

$$\sum_{\alpha} \equiv \sum_{\mathrm{m},\mathrm{n}} \int d\Omega_{\lambda}\, \frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z} \quad . \tag{5.108}$$

Prendendone l'elemento di matrice otteniamo:

$$\langle \mathbf{q}|\frac{d}{dt}\hat{\rho}^{(1)}(t)|\mathbf{p}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle \mathbf{q}|[\hat{\mathsf{H}}^{(1)}_o, \hat{\rho}^{(1)}(t)]|\mathbf{p}\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle \mathbf{q}| \left(\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\hat{\rho}^{(1)}(t) - \hat{\rho}^{(1)}(t)\hat{\mathbf{V}}^{(1)\dagger}\right) |\mathbf{p}\rangle +$$

$$+\sum_{\mathrm{m,n}}\int d\Omega_\lambda\,\frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z}\int d^3p_1\,d^3q_1\,\langle\mathbf{q}|\hat{L}^{(1)}_{\hat{\lambda},\mathrm{m,n}}|\mathbf{p}_1\rangle\langle\mathbf{p}_1|\hat{\rho}^{(1)}(t)|\mathbf{q}_1\rangle\langle\mathbf{q}_1|\hat{L}^{(1)\dagger}_{\hat{\lambda},\mathrm{m,n}}|\mathbf{p}\rangle \quad . \tag{5.109}$$

Si tratta ora di verificare che l'equazione così ottenuta abbia le opportune proprietà, conservi cioè la traccia e la positività dell'operatore statistico. Per quello che riguarda la positività, o meglio la completa positività, essa si verifica operando per la (5.107) una scomposizione analoga a quella effettuata nella (4.26). La conservazione della traccia dell'operatore statistico è molto più delicata da vedersi per la diversa struttura del termine di potenziale rispetto alla (4.23). Per dimostrare questa proprietà verifichiamo che:

$$\mathrm{Tr}\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{\mathbf{V}}^{(1)}\hat{\rho}^{(1)}(t)-\hat{\rho}^{(1)}(t)\hat{\mathbf{V}}^{(1)\dagger}\right)+\sum_{\mathrm{m,n}}\int d\Omega_\lambda\,\frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z}\hat{L}^{(1)}_{\hat{\lambda},\mathrm{m,n}}\hat{\rho}^{(1)}\hat{L}^{(1)\dagger}_{\hat{\lambda},\mathrm{m,n}}\right)=0,$$

che discende dalla seguente:

$$-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{\mathbf{V}}^{(1)}-\hat{\mathbf{V}}^{(1)\dagger}\right)+\sum_\alpha\hat{L}^{(1)\dagger}_\alpha\hat{L}^{(1)}_\alpha=0 \quad . \tag{5.110}$$

Valutiamo dapprima il termine:

$$\sum_\alpha\langle\mathbf{q}|\hat{L}^{(1)\dagger}_\alpha\hat{L}^{(1)}_\alpha|\mathbf{q}_1\rangle=\sum_{\mathrm{m,n}}\int d\Omega_\lambda\,\frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z}\int d^3q_2\,\frac{2\pi}{\hbar}\Bigg\{\int d^3\xi\,\langle u_{\mathrm{n}}|b^\dagger_\xi|u_{\mathrm{m}}\rangle$$

$$\langle\mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_2^2}{2m}-\frac{\bar{\lambda}^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\bar{\boldsymbol{\lambda}}\rangle\sqrt{M\bar{\lambda}}\Big|_{\frac{\bar{\lambda}^2}{2M}=\frac{q^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}$$

$$\int d^3\eta\,\sqrt{M\tilde{\lambda}}\langle\mathbf{q}_2\tilde{\boldsymbol{\lambda}}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_2^2}{2m}-\frac{\tilde{\lambda}^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle$$

$$\langle u_{\mathrm{m}}|b_\eta|u_{\mathrm{n}}\rangle\Big|_{\frac{\tilde{\lambda}^2}{2M}=\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}\Bigg\} \quad . \tag{5.111}$$

Come primo passo ricomponiamo la funzione Γ che avevamo riscritto in forma fattorizzata nella (5.101):

$$\frac{2\pi}{\hbar}\int d^3\xi\,d^3\eta\,\Gamma(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\int d\Omega_\lambda\int d^3q_2$$

$$\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_2^2}{2m} - \frac{\bar{\lambda}^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} |\mathbf{q_2}\bar{\boldsymbol{\lambda}}\rangle \sqrt{M\bar{\lambda}} \Big|_{\frac{\bar{\lambda}^2}{2M} = \frac{q^2}{2m} + \frac{\xi^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m}}$$

$$\sqrt{M\tilde{\lambda}} \langle \mathbf{q_2}\tilde{\boldsymbol{\lambda}}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_2^2}{2m} - \frac{\tilde{\lambda}^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} |\mathbf{q_1}\boldsymbol{\eta}\rangle \Big|_{\frac{\tilde{\lambda}^2}{2M} = \frac{{q_1}^2}{2m} + \frac{\eta^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m}} \quad . \tag{5.112}$$

Passiamo ora a valutare l'altro termine:

$$\frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{q}| \left(\hat{\mathbf{V}}^{(1)} - \hat{\mathbf{V}}^{(1)\dagger} \right) |\mathbf{q_1}\rangle =$$

$$\frac{i}{\hbar} \int d^3\xi \, d^3\eta \, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} |\mathbf{q_1}\boldsymbol{\eta}\rangle \mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) +$$

$$-\frac{i}{\hbar} \int d^3\xi \, d^3\eta \, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} |\mathbf{q_1}\boldsymbol{\eta}\rangle \mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int d^3\xi \, d^3\eta \, \left\{ \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}| \left[\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \right] + \right.$$

$$\left. - \left[\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \right] |\mathbf{q_1}\boldsymbol{\eta}\rangle \mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}) \right\} =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int d^3\xi \, d^3\eta \, \mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi})$$

$$\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} |\mathbf{q_1}\boldsymbol{\eta}\rangle, \tag{5.113}$$

che vogliamo ulteriormente trasformare per poterlo confrontare con la (5.112).

Per fare questo è opportuno richiamare alcune identità precedentemente introdotte, tipiche della teoria dello *scattering*. Riscrivendo l'ultima espressione della (5.113) abbiamo:

$$\frac{i}{\hbar} \int d^3\xi \, d^3\eta \, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} + i\varepsilon} \left(\frac{q_1^2}{2m} + \frac{\eta^2}{2M} - \frac{\xi^2}{2M} - \frac{q^2}{2m} - 2i\varepsilon \right)$$

$$\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}}^{(2)} |\mathbf{q_1}\boldsymbol{\eta}\rangle \mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}), \tag{5.114}$$

dove riconosciamo le espressioni $\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\hat{\mathsf{R}}_z$ e $\hat{\mathsf{R}}_z\hat{\mathsf{V}}^{(2)}$ che in forza delle (5.68) diventano:

$$\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\hat{\mathsf{R}}_z = \left(\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)}\hat{\mathsf{R}}_z\hat{\mathsf{V}}^{(2)} \right) \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} \qquad \hat{\mathsf{R}}_z\hat{\mathsf{V}}^{(2)} = \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}_o - z} \left(\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)}\hat{\mathsf{R}}_z\hat{\mathsf{V}}^{(2)} \right),$$

grazie alle quali la (5.114) diviene:

$$\frac{i}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta \int d^3\lambda\, d^3q_2\, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} + i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}\rangle$$

$$\frac{\frac{q_1^2}{2m} + \frac{\eta^2}{2M} - \frac{\xi^2}{2M} - \frac{q^2}{2m} - 2i\varepsilon}{\left(\frac{q_2^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} + i\varepsilon\right)\left(\frac{q_2^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon\right)}$$

$$\langle \mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle\Gamma(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi}), \tag{5.115}$$

ma la conservazione del momento e la presenza della funzione Γ implicano le relazioni:

$$\boldsymbol{\xi} \simeq \boldsymbol{\eta} \quad \text{e} \quad \mathbf{q} \simeq \mathbf{q}_1, \tag{5.116}$$

e quindi, supponendo che $\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - z}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}$ dipenda in modo sufficientemente lento da z:

$$\frac{i}{\hbar}\langle \mathbf{q}|\left(\hat{\mathbf{V}}^{(1)} - \hat{\mathbf{V}}^{(1)\dagger}\right)|\mathbf{q}_1\rangle \simeq$$

$$\frac{i}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_2\, \Gamma(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} + i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}\rangle$$

$$\frac{-2i\varepsilon}{\left(\frac{q_2^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M}\right)^2 + \varepsilon^2}\langle \mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle \quad . \tag{5.117}$$

Dalla relazione:

$$\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{(x-a)^2 + \eta^2} = \pi\delta(x-a), \tag{5.118}$$

da interpretarsi nell'ambito delle distribuzioni, posto $x = \frac{\lambda^2}{2M}$ si ha:

$$\frac{2\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_2 \int d\Omega_\lambda\, M\lambda\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} + i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}\rangle$$

$$\Gamma(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\langle \mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} - \hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M} = \frac{q^2}{2m} + \frac{\xi^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m}}, \tag{5.119}$$

che confrontiamo ora direttamente con la (5.112) riscritta tenendo conto in modo esplicito dei legami fra le diverse variabili:

$$\frac{2\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_2 \int d\Omega_\lambda\, \Gamma(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})M\sqrt{\bar{\lambda}}\sqrt{\tilde{\lambda}}\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)} +$$

$$-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\bar{\boldsymbol{\lambda}}\rangle\Big|_{\frac{\bar{\lambda}^2}{2M}=\frac{q^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}$$

$$\langle\mathbf{q}_2\tilde{\boldsymbol{\lambda}}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle\Big|_{\frac{\tilde{\lambda}^2}{2M}=\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}\simeq$$

(sfruttando nuovamente le ipotesi (5.116))

$$\simeq\frac{2\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_2\int d\Omega_\lambda\, M\lambda\langle\mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}\rangle$$

$$\Gamma(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\langle\mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}^{(2)}-\hat{\mathsf{V}}^{(2)}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}^{(2)}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{q^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}},\tag{5.120}$$

coincidente con la (5.119). Abbiamo pertanto ottenuto la desiderata master-equation descrivente l'interazione fra particella e macrosistema. Essa, tenuto conto della relazione appena dimostrata (per semplicità tralasceremo d'ora innanzi i vari indici (1) e (2) per gli operatori, essendo ormai chiaro l'ambito matematico):

$$\frac{i}{\hbar}\left(\hat{\mathbf{V}}-\hat{\mathbf{V}}^\dagger\right)=\sum_\alpha\hat{L}_\alpha^\dagger\hat{L}_\alpha,$$

dalla quale si ha:

$$-\frac{1}{2}\sum_\alpha\left\{\hat{L}_\alpha^\dagger\hat{L}_\alpha,\hat{\rho}\right\}-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{\mathbf{V}}+\hat{\mathbf{V}}^\dagger}{2},\hat{\rho}\right]=-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{\mathbf{V}}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{\mathbf{V}}^\dagger\right),$$

può essere immediatamente riscritta:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}=-\frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathsf{H}}_o,\hat{\rho}\right]-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{\mathbf{V}}+\hat{\mathbf{V}}^\dagger}{2},\hat{\rho}\right]-\frac{1}{2}\sum_\alpha\left\{\hat{L}_\alpha^\dagger\hat{L}_\alpha,\hat{\rho}\right\}+\sum_\alpha\hat{L}_\alpha\hat{\rho}\hat{L}_\alpha^\dagger,\tag{5.121}$$

equazione che ha proprio la forma (4.23) con:

$$\hat{L}_j\longrightarrow\hat{L}_\alpha$$

$$\sum_j\longrightarrow\sum_\alpha\equiv\sum_{\mathrm{m,n}}\int d\Omega_\lambda\,\frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z}$$

$$\hat{\mathsf{H}}\longrightarrow\hat{\mathsf{H}}_o+\frac{\hat{\mathbf{V}}+\hat{\mathbf{V}}^\dagger}{2}\quad.$$

Nella descrizione dei momenti essa diviene (poniamo come nella (5.76) $\langle \mathbf{q}|\hat{\rho}|\mathbf{p}\rangle = w(\mathbf{q},\mathbf{p})$ e faccciamo ricorso alle (5.95) e (5.96)):

$$
\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}w(\mathbf{q},\mathbf{p},t) = -\frac{i}{\hbar}\langle \mathbf{q}|\left[\hat{\mathsf{H}}_o,\hat{\rho}(t)\right]|\mathbf{p}\rangle\\
&-\frac{i}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}-\frac{1}{2}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}+\\
&-\frac{1}{2}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle w(\mathbf{q}_1,\mathbf{p},t)\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\\
&+\frac{i}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, w(\mathbf{q},\mathbf{q}_1,t)\langle \mathbf{q}_1\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}-\frac{1}{2}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}+\\
&-\frac{1}{2}\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}\rangle\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\\
&-\frac{1}{2}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, d^3q_2\int d\Omega_\lambda\,\frac{2\pi}{\hbar}\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})M\sqrt{\bar{\lambda}}\sqrt{\tilde{\lambda}}\\
&\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_2\bar{\boldsymbol{\lambda}}\rangle\Big|_{\frac{\bar{\lambda}^2}{2M}=\frac{q^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}\\
&\langle \mathbf{q}_2\tilde{\boldsymbol{\lambda}}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle\Big|_{\frac{\tilde{\lambda}^2}{2M}=\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}w(\mathbf{q}_1,\mathbf{p},t)\\
&-\frac{1}{2}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, d^3q_2\int d\Omega_\lambda\,\frac{2\pi}{\hbar}\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})w(\mathbf{q},\mathbf{q}_1,t)M\sqrt{\tilde{\lambda}}\sqrt{\bar{\lambda}}\\
&\langle \mathbf{q}_1\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_2\bar{\boldsymbol{\lambda}}\rangle\Big|_{\frac{\bar{\lambda}^2}{2M}=\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}\\
&\langle \mathbf{q}_2\tilde{\boldsymbol{\lambda}}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\eta}\rangle\Big|_{\frac{\tilde{\lambda}^2}{2M}=\frac{p^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}+\\
&+\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, d^3q_2\int d\Omega_\lambda\sum_{\mathrm{m,n}}\frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z}\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\\
&\left[S^*_{q_2\eta q\lambda}\sqrt{M\lambda}\,\langle u_{\mathrm{m}}|b_\eta|u_{\mathrm{n}}\rangle\right]\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{{q_2}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}}w(\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_1,t)\\
&\qquad\left[\langle u_{\mathrm{n}}|b^\dagger_\xi|u_{\mathrm{m}}\rangle\sqrt{M\lambda}\,S_{q_1\xi p\lambda}\right]\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}}\quad. \qquad (5.122)
\end{aligned}
$$

Questa espressione generale ci consentirà, nei prossimi capitoli, di stabilire un legame con l'equazione (2.1) usata da Sears per descrivere l'interazione fra il neutrone ed i nuclei costituenti il macrosistema con cui esso interagisce, ovvero in particolare con il cristallo perfetto di cui è costituito l'interferometro. Cercheremo in particolare di vedere se la (5.122) possa descrivere interazioni più generali e sotto quali condizioni. Nel caso del cristallo perfetto infatti l'aspetto fisicamente più significativo è senza dubbio la coerenza della sua struttura, ma nell'interazione con il generico materiale queste particolari condizioni non sussistono più e possono diventare rilevanti effetti diversi, che giustifichino una perdita di coerenza da parte del fascio.

Capitolo 6

Diversi regimi di interazione

6.1 Recupero del regime coerente e della equazione di Sears

Ora che abbiamo ottenuto la (5.121) vorremmo vedere se è possibile stabilire un collegamento con l'equazione con cui Sears [5] descrive l'interazione fra neutrone e cristallo. Come detto nel Capitolo 2 la teoria con cui confrontarsi è fondata su una equazione della forma:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{6.1}$$

ove il potenziale di interazione è ottenuto tramite lo pseudo-potenziale di Fermi (introdotto nella (2.2)). In particolare nel suo lavoro Sears muove dalla teoria dello scattering da potenziale per una particella interagente con un macrosistema, adottando il formalismo di prima quantizzazione e mostrando come la sezione d'urto per scattering elastico coerente possa essere ottenuta risolvendo semplicemente una equazione di Schrödinger per particella singola ove il termine di potenziale sia dato dal valor medio dell'operatore di transizione (indicato in letteratura in generale con $\hat{T}$) calcolato rispetto agli stati del macrosistema. Nel linguaggio da noi adottato per il formalismo della meccanica quantistica si tratta della traccia parziale rispetto al macrosistema, nella (2.4) avevamo infatti scritto:

$$\hat{T} \to \hat{v} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \langle \alpha | \hat{T} | \alpha \rangle \equiv \langle \hat{T} \rangle, \tag{6.2}$$

e possiamo ora scrivere:

$$\hat{T} \to \hat{v} = \mathrm{Tr} \left(\frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z} \hat{T} \right), \tag{6.3}$$

ove la traccia è calcolata rispetto allo spazio di Hilbert in cui viene descritto il macrosistema e gli stati $|\alpha\rangle$ introdotti da Sears indicano una completezza di autostati per l'Hamiltoniana totale. Prima di proseguire è opportuno chiarire ciò che Sears intende per scattering elastico coerente. Il termine elastico è riferito al conservarsi dell'energia totale in ogni urto ed il suo significato è quindi di immediata comprensione; il termine coerente è invece tipico della teoria fenomenologica dello scattering. Il fatto che si distingua fra scattering coerente ed incoerente non deve far pensare che si tratti di due diversi tipi di scattering; la distinzione fra i due nasce quando si considera lo scattering di neutroni da un campione di materiale piuttosto che da un singolo centro diffusore fisso. I diversi neutroni incidenti interagiscono con più centri diffusori (da identificarsi con i nuclei del macrosistema) che differiscono oltre che per la posizione anche per altre caratteristiche: ad esempio il campione può contenere più elementi, oppure diversi isotopi di uno stesso elemento, o ancora, per le interazioni dipendenti dallo spin, i diversi nuclei possono essere in diversi stati di spin. Oltretutto lo stato del materiale diffusore, ovvero del macrosistema, non può essere perfettamente noto e per descriverlo è possibile solo assegnare una distribuzione di stati ciascuno pesato con la relativa probabilità. Diventa dunque necessario un processo di media che fornisca la grandezza macroscopica cercata. In particolare la distinzione fra scattering coerente ed incoerente viene introdotta a livello di sezione d'urto differenziale, che può essere espressa come modulo quadro dell'ampiezza di scattering. Chiamando f questa ampiezza di scattering abbiamo (si rammenti che nel caso di neutroni termici conta solo lo scattering in onda s e non si ha, nel sistema del centro di massa, dipendenza dalle variabili angolari; lo scattering è quindi isotropo):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \quad .$$

Volendo ora ottenere una grandezza macroscopicamente significativa descrivente lo scattering da un campione a temperatura finita e non da un singolo nucleo dobbiamo operare una media rispetto agli stati del macrosistema (includente eventualmente una media sugli stati di spin), che indicheremo nel modo seguente:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \langle |f|^2 \rangle \quad .$$

Una volta assegnata una definizione di media di una grandezza fisica è sempre possibile riscrivere la grandezza in funzione del suo valor medio e del suo scarto da esso. Procediamo anlogamente per l'ampiezza di scattering, di cui solo il modulo quadrato costituisce una grandezza fisica, che consideriamo come variabile stocastica cui è associata una distribuzione di probabilità; abbiamo:

$$f = \langle f \rangle + \delta f,$$

ove naturalmente $\langle \delta f \rangle = 0$ e da questa espressione otteniamo anche, per il valor medio del modulo quadrato, la rappresentazione:

$$\langle |f|^2 \rangle = |\langle f \rangle|^2 + |\, \langle \delta f \rangle^2 \,|,$$

e corrispondentemente:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{\mathrm{co}}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_{\mathrm{in}}}{d\Omega},$$

ove i pedici indicano rispettivamente i contributi alla sezione d'urto differenziale che indichiamo come coerente e incoerente. La sezione d'urto coerente è dunque legata al valor medio dell'ampiezza di scattering, mentre quella incoerente è legata allo scarto quadratico medio. In modo analogo si definiscono due lunghezze di scattering coerente ed incoerente corrispondenti rispettivamente al valor medio ed allo scarto quadratico medio delle lunghezze di scattering relative ad esempio ai vari stati di spin. Lo scattering coerente corrisponde da un punto di vista fisico all'esistenza di correlazioni nell'azione dei vari centri diffusori, che non sussiste più qualora questi interagiscano in modo diverso con i diversi neutroni incidenti ed è anche legata alla regolarità della loro distribuzione spaziale tramite la funzione di correlazione fra coppie [6,7][46].

Come si è detto per l'operatore $\hat{T}$ viene data una stima fenomenologica ponendo direttamente:

$$\hat{T} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}} b_{\mathrm{i}} \delta^3(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}_{\mathrm{i}}), \tag{6.4}$$

ove $\hat{\mathbf{r}}$ è l'operatore coordinata del neutrone, $\hat{\mathbf{r}}_{\mathrm{i}}$ l'operatore coordinata del nucleo i-esimo, b_{i} la lunghezza di scattering relativa al nucleo i-esimo che dipende in generale dall'isotopo scelto e dalla reciproca orientazione degli spin. Dalla (6.4) e dalla (6.3) otteniamo la seguente:

$$\hat{v} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left\langle \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}} b_{\mathrm{i}} \delta^3(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}_{\mathrm{i}}) \right\rangle \quad . \tag{6.5}$$

L'equazione trovata da Sears prende allora la forma di un'equazione di Schrödinger per gli stati stazionari:

$$\left(\hat{h}_{\mathrm{o}} + \hat{v}\right) \psi = E\psi,$$

ove ψ rappresenta il generico vettore dello spazio di Hilbert in cui descriviamo il neutrone. Nella descrizione delle coordinate:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \langle \mathbf{r}|\psi\rangle + \int d^3x' \, \langle \mathbf{r}|\hat{v}|\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}'|\psi\rangle = E\psi(\mathbf{r}), \tag{6.6}$$

e supponendo come dalla (6.5) $\hat{v}$ diagonale nella rappresentazione delle coordinate:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \; + v(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \tag{6.7}$$

con

$$v(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left\langle \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}} b_{\mathrm{i}} \delta^3(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_{\mathrm{i}}) \right\rangle \quad . \tag{6.8}$$

Per confrontare la (5.121) con la descrizione fenomenologica di Sears osserviamo che partendo dalla equazione di Schrödinger ordinaria per particella singola con un potenziale non necessariamente autoaggiunto (e descrivente quindi eventualmente assorbimento):

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = \left(\hat{h}_{\mathrm{o}} + \hat{v}\right)|\psi\rangle,$$

e dall'aggiunta di questa:

$$-i\hbar \frac{d}{dt}\langle\psi| = \langle\psi| \left(\hat{h}_{\mathrm{o}} + \hat{v}^{\dagger}\right)$$

otteniamo proprio una equazione che ha la stessa struttura formale della (5.107) qualora si trascuri il termine della forma $\sum_{\alpha} \hat{L}_{\alpha}\hat{\varrho}\hat{L}_{\alpha}^{\dagger}$ (tipico del formalismo dell'operatore statistico) e si pensi al caso particolare di un operatore statistico corrispondente a stato puro, $\hat{\varrho} = |\psi\rangle\langle\psi|$:

$$\frac{d}{dt}\left(|\psi\rangle\langle\psi|\right) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{h}_{o}, |\psi\rangle\langle\psi|\right] - \frac{i}{\hbar}\left[\hat{v}\left(|\psi\rangle\langle\psi|\right) - \left(|\psi\rangle\langle\psi|\right)\hat{v}^{\dagger}\right] \quad . \tag{6.9}$$

Riottenere l'equazione di Sears a partire dalla master-equation significa dunque trascurare l'ultimo termine della (5.121) tipico della descrizione tramite operatore statistico che ammette anche l'uso di miscele statistiche e studiare la relazione fra il termine di potenziale fenomenologico dato dalla (6.8) e quello da noi introdotto nella (5.105). Studiamo dunque più da vicino la (5.105) che riportiamo per comodità:

$$\langle\mathbf{q}|\hat{\mathbf{V}}|\mathbf{p}\rangle = \int d^3\xi\, d^3\eta\, \langle\mathbf{q}\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle \mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta}), \tag{6.10}$$

che diventa, tenendo conto della (5.87),

$$\langle\mathbf{q}|\hat{\mathbf{V}}|\mathbf{p}\rangle = \int d^3\xi\, d^3\eta\, \langle\mathbf{q}\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle\, \mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}\left(b_{\eta}^{\dagger}b_{\xi}\hat{\varrho}_{\mathrm{s}}\right) \quad . \tag{6.11}$$

Come primo passo usiamo le equivalenti delle (5.3) e (5.4) nel limite del continuo per gli operatori del tipo b (che indicheremo però qui ancora con ψ senza ulteriori indici o pedici poiché non vi è pericolo di confusione) e la (5.75) per l'operatore statistico del macrosistema ottenendo:

$$\langle\mathbf{q}|\hat{\mathbf{V}}|\mathbf{p}\rangle = \int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3x\, d^3y\, \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\langle\mathbf{q}\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\eta}\cdot\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{y})}$$

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}\left[\frac{\left(e^{-\beta\hat{H}}\psi^{\dagger}(\mathbf{x})\psi(y)\right)}{e^{-\beta\hat{H}}}\right], \tag{6.12}$$

che in forza delle proprietà della funzione Γ e della conservazione del momento diventa:

$$\langle\mathbf{q}|\hat{\mathbf{V}}|\mathbf{p}\rangle = \int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3x\, d^3y\, \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\langle\mathbf{q}\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{p^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\eta}\cdot\mathbf{x}-\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{y})}$$

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}\left[\frac{\left(e^{-\beta\hat{H}}\psi^{\dagger}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{y})\right)}{e^{-\beta\hat{H}}}\right] \quad . \tag{6.13}$$

Riconosciamo ora nella espressione

$$\langle\mathbf{q}\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{p^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle$$

l'elemento di matrice dell'operatore di transizione relativo alla interazione neutrone nucleo [44,45], che come prima battezziamo $\hat{T}$ ottenendo:

$$\langle\mathbf{q}|\hat{\mathbf{V}}|\mathbf{p}\rangle = \int d^3x\, d^3y\, \langle\mathbf{q}\mathbf{x}|\hat{T}|\mathbf{p}\mathbf{y}\rangle\, \mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}\left[\frac{\left(e^{-\beta\hat{H}}\psi^{\dagger}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{y})\right)}{e^{-\beta\hat{H}}}\right] \quad . \tag{6.14}$$

Volendo ottenere la equazione usata da Sears ricorriamo alla stessa stima fenomenologica per l'operatore di transizione $\hat{T}$, dato dalla (6.4), che dovrà essere riscritto nel formalismo della seconda quantizzazione, con cui abbiamo descritto i nuclei, cioé:

$$\hat{T} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b\delta^3(\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{r}}), \tag{6.15}$$

ove la coordinata $\mathbf{x}$ si riferisce al nucleo del macrosistema e la coordinata $\mathbf{r}$ al neutrone. Dalla (6.15) otteniamo:

$$\langle\mathbf{q}\mathbf{x}|\hat{T}|\mathbf{p}\mathbf{y}\rangle = \langle\mathbf{q}\mathbf{x}|\frac{2\pi\hbar^2}{m} b\delta^3(\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{r}})|\mathbf{p}\mathbf{y}\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y})\langle\mathbf{q}|\delta^3(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{r}})|\mathbf{p}\rangle, \tag{6.16}$$

e quindi:

$$\langle\mathbf{q}|\hat{\mathbf{V}}|\mathbf{p}\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b\int d^3x\, \langle\mathbf{q}|\delta^3(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{r}})|\mathbf{p}\rangle\, \mathrm{Tr}_{\mathcal{M}}\left(\hat{\varrho}_{\mathrm{s}}\psi^{\dagger}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\right) =$$

$$\langle \mathbf{q}|\hat{\mathbf{V}}|\mathbf{p}\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \int d^3x \, \langle \mathbf{q}|\delta^3(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{r}})|\mathbf{p}\rangle \, \langle \psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\rangle \quad . \tag{6.17}$$

Per procedere ricordiamo il legame fra operatori di prima quantizzazione agenti sulla singola particella ed operatori di seconda quantizzazione:

$$\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}} \hat{A}^{(1)}(\hat{\mathbf{x}}_{\mathrm{i}}, \hat{p}_{\mathrm{i}}) \rightarrow \int d^3x_1 \, d^3x_2 \, \psi^\dagger(\mathbf{x}_1)\langle \mathbf{x}_1|\hat{A}^{(1)}|\mathbf{x}_2\rangle\psi(\mathbf{x}_2) \quad . \tag{6.18}$$

Essa implica in particolare per il caso in esame:

$$\langle \psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\rangle = \left\langle \sum_{\mathrm{i}}^{\mathrm{n}} \delta^3(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{r}}_{\mathrm{i}}) \right\rangle = \rho(\mathbf{x}), \tag{6.19}$$

ove la somma corre sui nuclei del macrosistema e si è chiamato $\rho(\mathbf{x})$ la funzione densità dei nuclei del macrosistema nel punto $\mathbf{x}$. Abbiamo così , introducendo il risultato trovato nella (6.17), che l'elemento di matrice del termine di potenziale che compare nella equazione di Schrödinger ottenibile a partire dalla master-equation è dato, nella rappresentazione dei momenti, da:

$$\langle \mathbf{q}|\hat{\mathbf{V}}|\mathbf{p}\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \int d^3x \, \langle \mathbf{q}|\delta^3(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{r}})|\mathbf{p}\rangle \left\langle \sum_{\mathrm{i}}^{\mathrm{n}} \delta^3(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{r}}_{\mathrm{i}}) \right\rangle =$$

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \int d^3x \, \langle \mathbf{q}|\delta^3(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{r}})|\mathbf{p}\rangle \rho(\mathbf{x}) \quad . \tag{6.20}$$

Valutiamo ora l'elemento di matrice seguente:

$$\langle \mathbf{y}|\hat{\mathbf{V}}|\phi\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \int d^3x \, \langle \mathbf{y}|\delta^3(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{r}})|\phi\rangle \left\langle \sum_{\mathrm{i}}^{\mathrm{n}} \delta^3(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{r}}_{\mathrm{i}}) \right\rangle =$$

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \int d^3x \, \langle \mathbf{y}|\delta^3(\mathbf{x}-\hat{\mathbf{r}})|\phi\rangle \rho(\mathbf{x}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \int d^3x \, \delta^3(\mathbf{x}-\mathbf{y})\langle \mathbf{y}|\phi\rangle \rho(\mathbf{x}) =$$

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \, \rho(\mathbf{y})\phi(\mathbf{y}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \left\langle \sum_{\mathrm{i}}^{\mathrm{n}} \delta^3(\mathbf{y}-\hat{\mathbf{r}}_{\mathrm{i}}) \right\rangle \phi(\mathbf{y}) \quad . \tag{6.21}$$

Operando un confronto con la (6.8) vediamo che pur di sfruttare la stessa espressione fenomenologica per il termine di interazione otteniamo dalla master-equation (5.121), nel limite in cui trascuriamo il contributo dato dal termine

$$\sum_{\alpha} \hat{L}_{\alpha}^{(1)} \hat{\rho} \hat{L}_{\alpha}^{(1)\dagger},$$

la medesima equazione di Schrödinger per gli stati stazionari, poiché i termini di potenziale coincidono.

Apparentemente il risultato da noi trovato, ovvero la (5.30), può sembrare meno generale di quello ottenuto da Sears poiché ci siamo dovuti restringere al caso di particelle identiche (e quindi con la stessa lunghezza di scattering), in conformità al formalismo di seconda quantizzazione. In realtà questa è una difficoltà solo apparente. Per recuperare il risultato più generale è sufficiente introdurre più operatori di campo, uno per ogni tipo di particella, ovvero al posto di b parleremo di b^{i} ove l'indice indica la specie considerata, e quindi ad esempio la Hamiltoniana (5.5) è da modificarsi nel modo seguente:

$$\hat{H} = \sum_{\xi} \frac{\xi^2}{2M} b^{\dagger}_{\xi} b_{\xi} + \frac{1}{2} \sum_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4} b^{\dagger}_{\xi_1} b^{\dagger}_{\xi_2} b_{\xi_3} b_{\xi_4} \bar{V}_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4}$$

$$+ \sum_{p} \frac{p^2}{2m} a^{\dagger}_{p} a_{p} + \sum_{p\xi q\eta} a^{\dagger}_{p} b^{\dagger}_{\xi} a_{q} b_{\eta} V_{p\xi q\eta} \Longrightarrow$$

$$\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{s}} \sum_{\xi} \frac{\xi^2}{2M_i} b^{\mathrm{i}\dagger}_{\xi} b^{\mathrm{i}}_{\xi} + \frac{1}{2} \sum_{\mathrm{i,k}=1}^{\mathrm{s}} \sum_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4} b^{\mathrm{i}\dagger}_{\xi_1} b^{\mathrm{k}\dagger}_{\xi_2} b^{\mathrm{i}}_{\xi_3} b^{\mathrm{k}}_{\xi_4} \bar{V}^{\mathrm{ik}}_{\xi_1\xi_2\xi_3\xi_4}$$

$$+ \sum_{p} \frac{p^2}{2m} a^{\dagger}_{p} a_{p} + \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{s}} \sum_{p\xi q\eta} a^{\dagger}_{p} b^{\mathrm{i}\dagger}_{\xi} a_{q} b^{\mathrm{i}}_{\eta} V^{\mathrm{i}}_{p\xi q\eta}, \tag{6.22}$$

ove s indica il numero di specie presenti e si è supposto che il potenziale di interazione dipenda dalle specie presenti. Si può a questo punto ripercorrere passo dopo passo i calcoli fatti nel capitolo precedente, con le ovvie modifiche necessarie, introducendo la generalizzazione delle usuali parentesi di commutazione o anticommutazione:

$$\left[b^{\mathrm{i}}_{\eta}, b^{\mathrm{k}}_{\xi}\right]_{\pm} = 0$$

$$\left[b^{\mathrm{i}\dagger}_{\eta}, b^{\mathrm{k}\dagger}_{\xi}\right]_{\pm} = 0$$

$$\left[b^{\mathrm{i}\dagger}_{\eta}, b^{\mathrm{k}}_{\xi}\right]_{\pm} = \delta_{\mathrm{i,k}} \delta^3(\eta - \xi)$$

Partendo da questa Hamiltoniana leggermente più generale otterremmo per il termine di potenziale:

$$\hat{\mathbf{V}}(\mathbf{x}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{\mathrm{k}=1}^{\mathrm{s}} b_{\mathrm{k}} \operatorname{Tr}_{\mathcal{M}} \left[\frac{\left(e^{-\beta\hat{H}} \psi_{\mathrm{k}}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\mathrm{k}}(\mathbf{x}) \right)}{e^{-\beta\hat{H}}} \right] = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left\langle \sum_{\mathrm{k}=1}^{\mathrm{s}} \sum_{\mathrm{i}}^{\mathrm{n_k}} b_{\mathrm{k}} \delta^3(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{r}}_{\mathrm{i}}) \right\rangle, \tag{6.23}$$

($\mathrm{n_k}$ è il numero di nuclei delle specie k presenti) recuperando così in tutta generalità il risultato di Sears dato dalle (6.7) e (6.8).

Ora che abbiamo visto entro quale limite si possano ottenere dal nostro calcolo i risultati già noti possiamo rivolgere la nostra attenzione a quanto di nuovo può emergere da uno studio della equazione alla Lindblad (5.121).

6.2 La funzione di Wigner

Una proprietà particolarmente interessante della (5.121) è il fatto che entro opportune approssimazioni si può ottenere da essa un'equazione alla Boltzmann. Per ottenere questo risultato è necessario utilizzare la funzione di distribuzione di Wigner, introdotta da Eugen Wigner nel 1932. In questo paragrafo presentiamo la sua definizione ed alcune proprietà particolarmente rilevanti.

Attraverso la funzione di Wigner si cerca di trovare in meccanica quantistica un analogo dello spazio delle fasi. Nell'ambito del formalismo usuale della meccanica quantistica il principio di incertezza di Heisenberg, legato alla non commutatività degli operatori posizione e momento, non permette di costruire una misura a valori di proiettore per posizione e momento di una stessa particella, vanificando così almeno apparentemente l'utilizzo del concetto di spazio delle fasi in meccanica quantistica. Conseguenza di questo è il fatto che non sia possibile associare in modo univoco una grandezza quantistica alle funzioni di posizione e momento definite sullo spazio delle fasi. Allo stesso modo non è possibile costruire una vera distribuzione di probabilità sullo spazio delle fasi di una particella in meccanica quantistica. Ciononostante sono state ottenute diverse funzioni che abbiano alcune delle proprietà delle funzioni di distribuzione di probabilità nello spazio delle fasi, dette talvolta funzioni di distribuzione di quasi-probabilità. La loro utilità risiede nella semplificazione che apportano ad alcuni conti e nell'indicare connessioni fra meccanica classica e quantistica. Fra queste distribuzioni una delle più famose ed utili è quella appunto di Wigner.

A livello classico una singola particella è descritta da una distribuzione nello spazio delle fasi $P_{\mathrm{C}}(\mathbf{q},\mathbf{p})$. Il valor medio di una generica funzione di posizione e momento $A(\mathbf{q},\mathbf{p})$ definita sullo spazio delle fasi è allora dato da:

$$\langle A\rangle_{\mathrm{C}} = \int d^3q\, d^3p\, A(\mathbf{q},\mathbf{p})\, P_{\mathrm{C}}(\mathbf{q},\mathbf{p}) \quad .$$

Nella descrizione quantistica ad ogni sistema si associa come visto un operatore statistico o matrice densità, diciamo $\hat{\rho}$, e il valor medio di una funzione degli operatori posizione e momento $\hat{A} = \hat{A}(\hat{\mathbf{q}},\hat{\mathbf{p}})$ si esprime:

$$\langle \hat{A}\rangle_{\mathrm{Q}} = \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}) \quad .$$

Data un'espressione classica $A(\mathbf{q},\mathbf{p})$ non è univocamente definito un operatore autoaggiunto ad essa corrispondente, l'associazione dipende da come si procede all'ordinamento degli operatori fondamentali. Assegnata una regola per associare ad ogni operatore statistico una funzione di distribuzione di quasiprobabilità, $P_{\mathrm{Q}}(\mathbf{q},\mathbf{p})$, ed una generica funzione dello spazio delle fasi classico, $A(\mathbf{q},\mathbf{p})$, si possono definire i valori medi dell'operatore che pensiamo di associare a questa funzione nel modo seguente:

$$\langle \hat{A}\rangle_{\mathrm{Q}} = \int d^3q\, d^3p\, A(\mathbf{q},\mathbf{p}) P_{\mathrm{Q}}(\mathbf{q},\mathbf{p}) \quad . \tag{6.24}$$

In questo modo i risultati quantistici possono essere riscritti in una forma simile a quella classica. Nel caso particolare della funzione di Wigner vi è un particolare legame fra la generica $A(\mathbf{q},\mathbf{p})$ e l'operatore $\hat{A}(\hat{\mathbf{q}},\hat{\mathbf{p}})$ i cui valori di aspettazione sono dati dalla (6.24), legame che risulta essere dato dall'ordinamento di Weyl, come mostreremo nelle righe seguenti. La funzione di distribuzione di Wigner è così definita per un sistema quantistico descritto dall'operatore statistico $\hat{\rho}$:

$$f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p},t) = \int \frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}} \langle \mathbf{q} - \frac{\mathbf{y}}{2}|\hat{\rho}(t)|\mathbf{q} + \frac{\mathbf{y}}{2}\rangle = \\ = \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}} \langle \mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2}|\hat{\rho}(t)|\mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2}\rangle \quad . \tag{6.25}$$

Nell'espressione abbiamo evidenziato due possibili espressioni facenti riferimento ad elementi di matrice dell'operatore statistico nelle descrizioni delle coordinate e dei momenti rispettivamente, espressioni che verranno entrambe usate. Si noti inoltre come la struttura dell'espressione garantisca la realtà della funzione di Wigner.

Ad ogni operatore statistico è possibile associare una funzione di Wigner secondo la (6.25); se è invece assegnata una funzione di Wigner si può risalire agli elementi di matrice dell'operatore statistico ad essa associato tramite le seguenti:

$$\langle \mathbf{x}|\rho|\mathbf{y}\rangle = \int d^3p\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot(\mathbf{y}-\mathbf{x})}\, f_{\mathrm{W}}\left(\frac{\mathbf{x}+\mathbf{y}}{2},\mathbf{p}\right), \tag{6.26}$$

e allo stesso modo:

$$\langle \mathbf{p}|\rho|\mathbf{k}\rangle = \int d^3x\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{k})}\, f_{\mathrm{W}}\left(\mathbf{x},\frac{\mathbf{p}+\mathbf{k}}{2}\right) \quad . \tag{6.27}$$

Torniamo ora al problema dell'ordinamento operatoriale, da cui la funzione di Wigner è nata; in accordo con la prescrizione data da Weyl ad una funzione classica:

$$A(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \int d^3\sigma\, d^3\tau\, \alpha(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\tau}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{q}+\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{p})} \tag{6.28}$$

si associa il seguente operatore:

$$\hat{A}(\hat{\mathbf{q}},\hat{\mathbf{p}}) = \int d^3\sigma\, d^3\tau\, \alpha(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\tau}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{q}}+\boldsymbol{\tau}\cdot\hat{\mathbf{p}})} = \\ \int d^3\sigma\, d^3\tau \int \frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, A(\mathbf{q},\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\mathbf{q}}-\mathbf{q})+\boldsymbol{\tau}\cdot(\hat{\mathbf{p}}-\mathbf{p})]} \quad . \tag{6.29}$$

Dalla (6.29) si ricava la relazione seguente:

$$A(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \int d^3z\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{z}}\, \langle \mathbf{q} - \frac{1}{2}\mathbf{z}|\hat{A}|\mathbf{q} + \frac{1}{2}\mathbf{z}\rangle \quad . \tag{6.30}$$

Verificare la corrispondenza fra l'ordinamento alla Weyl e la funzione di Wigner significa dimostrare la validità della seguente relazione:

$$\langle \hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \int d^3q\, d^3p\, f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p})A(\mathbf{q},\mathbf{p}), \tag{6.31}$$

come si può fare esplicitamente [35]. Ad esempio si ha:

$$\hat{p}\hat{q} \quad \stackrel{Weyl}{\longrightarrow} \quad \frac{1}{2}\left(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}\right) \quad .$$

La (6.31) può essere generalizzata ad ogni coppia di operatori:

$$(2\pi\hbar)^3\, \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \int d^3q\, d^3p\, A(\mathbf{q},\mathbf{p})B(\mathbf{q},\mathbf{p}), \tag{6.32}$$

ove il legame fra A, B e $\hat{A}, \hat{B}$ è dato dalla (6.30). Un caso particolarmente interessante di questa relazione si ha se al posto degli operatori $\hat{A}$ e $\hat{B}$ si considerano due operatori statistici corrispondenti ad esempio a due stati puri ψ e ϕ; tenendo conto della diversa normalizzazione data dalla (6.25) si ha allora:

$$|\langle\psi|\phi\rangle|^2 = \left|\int d^3q\, \psi^*(\mathbf{q})\phi(\mathbf{q})\right|^2 = (2\pi\hbar)^3 \int d^3q\, d^3p\, f^{\psi}_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p})\, f^{\phi}_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p}) \quad . \tag{6.33}$$

Se in particolare consideriamo due vettori ortogonali abbiamo:

$$\int d^3q\, d^3p\, f^{\psi}_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p})\, f^{\phi}_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p}) = 0 \tag{6.34}$$

e questo implica che la $f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p})$ non sia definita ovunque positiva, non si tratta quindi di una vera e propria funzione di distribuzione di probabilità, ed è questa *patologia* che induce a chiamare la funzione di Wigner una funzione di distribuzione di quasi-probabilità. Nell'ambito delle funzioni di distribuzione è particolarmente significativa una espressione chiamata *funzione caratteristica* che si può associare ad ogni distribuzione di probabilità e che può essere usata per calcolare i valori di aspettazione di prodotti ordinati alla Weyl di operatori $\hat{\mathbf{p}}$ e $\hat{\mathbf{q}}$, ovvero i momenti della distribuzione di quasiprobabilità. Se $\hat{\rho}$ è l'operatore statistico, introduciamo la seguente funzione caratterizzata da sei parametri $\big(\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ e $\boldsymbol{\tau} \equiv (\tau_x, \tau_y, \tau_z)\big)$:

$$C_{\sigma,\tau} = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{C}_{\sigma,\tau}), \tag{6.35}$$

ove

$$\hat{C}_{\sigma,\tau} = e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{q}}+\boldsymbol{\tau}\cdot\hat{\mathbf{p}})} \quad . \tag{6.36}$$

A partire da questa espressione si ottengono in modo immediato i valori di aspettazione di prodotti ordinati alla Weyl di operatori $\hat{\mathbf{p}}$ e $\hat{\mathbf{q}}$:

$$\langle \big(\hat{q}_i^{\mathrm{m}} \hat{p}_j^{\mathrm{n}}\big)_{\mathrm{W}} \rangle = \int d^3q\, d^3p\; q_i^{\mathrm{m}}\, p_j^{\mathrm{n}}\, f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p}) = (-i\hbar)^{\mathrm{m+n}} \frac{\partial^{\mathrm{m}}}{\partial {\sigma_i}^{\mathrm{m}}} \frac{\partial^{\mathrm{n}}}{\partial {\tau_j}^{\mathrm{n}}} C_{\sigma,\tau} \bigg|_{\sigma=\tau=0} \quad . \tag{6.37}$$

Particolarmente interessante è il fatto che la funzione caratteristica sia data in questo caso dalla trasformata di Fourier della funzione di Wigner stessa. Dalla (6.30) abbiamo infatti che la funzione associata all'operatore $\hat{C}_{\sigma,\tau}$ è semplicemente:

$$\exp\left\{(i/\hbar)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{q}+\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{p})\right\} \quad .$$

Dalla (6.31) abbiamo allora :

$$C_{\sigma,\tau} = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{C}_{\sigma,\tau}) = \int d^3q\, d^3p\, e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{q}+\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{p})} f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p}),$$

da cui:

$$f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^6 \int d^3\sigma\, d^3\tau\, e^{-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{q}+\boldsymbol{\tau}\cdot\mathbf{p})} C_{\sigma,\tau}, \tag{6.38}$$

che è la relazione cercata.

La funzione di Wigner, qui introdotta evidenziandone soprattutto il legame con la descrizione classica tipo spazio delle fasi, gode di diverse proprietà particolarmente significative in ambito quantistico. Anzitutto richiamiamo l'espressione della funzione di Wigner:

$$f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p},t) = \int \frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}} \langle \mathbf{q} - \frac{\mathbf{y}}{2} | \hat{\rho}(t) | \mathbf{q} + \frac{\mathbf{y}}{2} \rangle,$$

che può essere riscritta introducendo una funzione $\rho(\mathbf{q}-\frac{\mathbf{y}}{2},\mathbf{q}+\frac{\mathbf{y}}{2})$, che nel caso di operatore statistico corrispondente a stato puro ($\hat{\rho}=|\psi\rangle\langle\psi|$) si fattorizza e diventa:

$$
\begin{aligned}
f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p},t) &= \int \frac{d^3y}{(2\pi\hbar)^3}\,\rho(\mathbf{q}-\frac{\mathbf{y}}{2},\mathbf{q}+\frac{\mathbf{y}}{2},t)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}} \\
&= \int \frac{d^3y}{(2\pi\hbar)^3}\,\psi^*(\mathbf{q}+\frac{\mathbf{y}}{2},t)\,\psi(\mathbf{q}-\frac{\mathbf{y}}{2},t)\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}} \quad . \qquad (6.39)
\end{aligned}
$$

Riscriviamo ora la (6.39) nella forma:

$$
f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p},t) = \langle\psi(t)|\left\{\int \frac{d^3y}{(2\pi\hbar)^3}\,|\mathbf{q}+\frac{\mathbf{y}}{2}\rangle\langle\mathbf{q}-\frac{\mathbf{y}}{2}|\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}}\right\}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{M}(\hat{\mathbf{q}},\hat{\mathbf{p}})|\psi(t)\rangle,
$$

ove $\hat{M}(\hat{\mathbf{q}},\hat{\mathbf{p}})$ è un operatore autoaggiunto, ma non positivo. Essa risulta inoltre normalizzata nel modo seguente:

$$
\int d^3q\,d^3p\,f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = 1 \quad . \qquad (6.40)
$$

A partire dalla funzione di Wigner otteniamo le distribuzioni di probabilità marginali attese per quello che riguarda posizione e momento del sistema:

$$
\int d^3q\,f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \langle\mathbf{p}|\hat{\rho}|\mathbf{p}\rangle = \left|\tilde{\psi}(\mathbf{p})\right|^2, \qquad (6.41)
$$

ove $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$ è la trasformata di Fourier con argomento $\mathbf{p}$ della $\psi(\mathbf{q})$ associata al sistema qualora si tratti di stato puro. Analogamente si ottiene la distribuzione di probabilità per le coordinate:

$$
\int d^3p\,f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \langle\mathbf{q}|\hat{\rho}|\mathbf{q}\rangle = |\psi(\mathbf{q})|^2 \quad . \qquad (6.42)
$$

Un'altra proprietà molto significativa e che ha fornito un'importante guida per ottenere la funzione di Wigner è il comportamento della medesima rispetto alle trasformazioni di Galilei; queste inducono sulla funzione di Wigner quelle attese per una funzione di distribuzione di probabilità in meccanica classica. Si consideri infatti una trasformazione di Galileo individuata da $(\mathsf{R},\mathbf{a},m\mathbf{v})$, dove R individua una rotazione, $\mathbf{a}$ una traslazione, $m\mathbf{v}$ un boost. Alla trasformazione della funzione d'onda:

$$
\psi(\mathbf{q}) \to \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot m\mathbf{v}\right)\psi\left(\mathsf{R}^{-1}(\mathbf{q}-\mathbf{a})\right)
$$

corrisponde per f_W la seguente trasformazione:

$$f_W(\mathbf{q},\mathbf{p}) \to f_W\left(\mathsf{R}^{-1}(\mathbf{q}-\mathbf{a}), \mathsf{R}^{-1}(\mathbf{p}-m\mathbf{v})\right) \quad .$$

Si ha infatti:

$$f_W(\mathbf{q},\mathbf{p}) \to \int \frac{d^3y}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{q}+\frac{\mathbf{y}}{2}\right)\cdot m\mathbf{v}} \psi^* \left[\mathsf{R}^{-1}\left(\mathbf{q}-\mathbf{a}+\frac{\mathbf{y}}{2}\right)\right]$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\left(\mathbf{q}-\frac{\mathbf{y}}{2}\right)\cdot m\mathbf{v}} \psi \left[\mathsf{R}^{-1}\left(\mathbf{q}-\mathbf{a}-\frac{\mathbf{y}}{2}\right)\right] e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}} =$$

$$\int \frac{d^3y}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-m\mathbf{v})\cdot\mathbf{y}} \psi^* \left[\mathsf{R}^{-1}\left(\mathbf{q}-\mathbf{a}+\frac{\mathbf{y}}{2}\right)\right] \psi \left[\mathsf{R}^{-1}\left(\mathbf{q}-\mathbf{a}-\frac{\mathbf{y}}{2}\right)\right] =$$

ponendo $\mathbf{y} = \mathsf{R}\mathbf{x}$

$$\int \frac{d^3x}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\left[\mathsf{R}^{-1}(\mathbf{p}-m\mathbf{v})\right]\cdot\mathbf{x}} \psi^* \left[\mathsf{R}^{-1}(\mathbf{q}-\mathbf{a})+\frac{\mathbf{x}}{2}\right] \psi \left[\mathsf{R}^{-1}(\mathbf{q}-\mathbf{a})-\frac{\mathbf{x}}{2}\right] =$$

$$= f_W\left(\mathsf{R}^{-1}(\mathbf{q}-\mathbf{a}), \mathsf{R}^{-1}(\mathbf{p}-m\mathbf{v})\right) \quad .$$

In assenza di forze l'equazione del moto cui la funzione di Wigner soddisfa è l'equazione classica di Liouville:

$$\frac{\partial f_W}{\partial t} = -\frac{\mathbf{p}}{m}\cdot\frac{\partial f_W}{\partial \mathbf{q}} \quad . \tag{6.43}$$

Partendo dall'equazione di Liouville - von Neumann per il caso libero

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \hat{\rho}\right]$$

e dalla (6.25) abbiamo:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_W(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \frac{\partial}{\partial t}\int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}} \langle \mathbf{p}+\frac{\mathbf{k}}{2}|\hat{\rho}|\mathbf{p}-\frac{\mathbf{k}}{2}\rangle,$$

ma

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{p}+\frac{\mathbf{k}}{2}|\hat{\rho}|\mathbf{p}-\frac{\mathbf{k}}{2}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle \mathbf{p}+\frac{\mathbf{k}}{2}|\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\hat{\rho}-\hat{\rho}\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\right)|\mathbf{p}-\frac{\mathbf{k}}{2}\rangle =$$

$$-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\left(\mathbf{p}+\frac{\mathbf{k}}{2}\right)^2}{2m} - \frac{\left(\mathbf{p}-\frac{\mathbf{k}}{2}\right)^2}{2m}\right]\langle \mathbf{p}+\frac{\mathbf{k}}{2}|\hat{\rho}|\mathbf{p}-\frac{\mathbf{k}}{2}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}}{m}\langle \mathbf{p}+\frac{\mathbf{k}}{2}|\hat{\rho}|\mathbf{p}-\frac{\mathbf{k}}{2}\rangle,$$

e utilizzando questo risultato abbiamo:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}} \langle \mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2} | \hat{\rho} | \mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2} \rangle =$$

$$-\frac{i}{\hbar} \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}}{m} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}} \langle \mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2} | \hat{\rho} | \mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2} \rangle =$$

$$-\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}} \langle \mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2} | \hat{\rho} | \mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2} \rangle = -\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} f_{\mathrm{W}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \quad . \tag{6.44}$$

Analoga dimostrazione si poteva ottenere partendo dalla (6.39) e dalla equazione di Schrödinger.

Vogliamo ora tornare brevemente sul problema della non definita positività della funzione di Wigner. Da più parti si è cercato di considerare versioni *smussate* della funzione di Wigner, ottenute ad esempio tramite l'integrazione della funzione di Wigner rispetto ad un opportuno nucleo integrale. In questo modo si riesce ad ottenere una funzione definita positiva, ma si ha anche una modifica delle (6.41) e (6.42). In quest'ottica la non definita positività sembra dunque un male incurabile, da accettarsi in forza dei vantaggi ottenuti dall'uso della funzione di Wigner. La questione può essere meglio compresa ponendosi dal punto di vista del formalismo moderno della meccanica quantistica e associando il concetto di osservabile invece che alla sole misure a valori di proiettore alle più generali misure a valore di effetto. A questo livello diventa perfettamente ragionevole definire una misura congiunta ed imprecisa di posizione e momento ed ottenere pertanto una vera e propria funzione di distribuzione che assume valori positivi in tutti i punti dell'insieme su cui è definita come è stato fatto ad esempio in un interessante lavoro [36] in cui partendo proprio dal formalismo delle misure a valore di effetto si costruisce una funzione di distribuzione di probabilità che risulta essere una versione regolarizzata della funzione di Wigner. Questa regolarizzazione non è però vista come un rattoppo, né il non ottenere più le (6.41) e (6.42) come un contrattempo. Ogni misura congiunta di posizione e momento implica una imprecisione che si riflette nelle distribuzioni marginali. Le (6.41) e (6.42) non rappresentano le uniche distribuzioni marginali *corrette*, ma quelle associate alle misure più sensibili della sola posizione o del solo momento.

6.3 I termini di perdita e di guadagno

Ci accingiamo ora a ottenere dalla master-equation alla Lindblad (5.121) un'equazione alla Boltzmann. L'ipotesi guida nella deduzione della equazione di Boltzmann a partire dalla master-equation è la *quasi diagonalità* dell'operatore statistico descrivente il sistema nella rappresentazione dei momenti, e questo equivale a pensare di descrivere un sistema quasi omogeneo sulla scala delle lunghezze macroscopiche. Se consideriamo l'operatore statistico $\hat{W}$ di un sistema che presenti disomogeneità solo su una scala macroscopica individuata da una lunghezza ω vale per esso la relazione seguente:

$$\langle \boldsymbol{\eta} | \hat{W} | \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\xi} \rangle \simeq 0 \quad \text{se} \quad |\boldsymbol{\xi}| \geq \frac{\hbar}{\omega} \quad .$$

Lavoriamo in questa ipotesi supponendo $\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi})$ significativamente diversa da zero solo per $\boldsymbol{\eta} \simeq \boldsymbol{\xi}$. Formuliamo la stessa ipotesi anche per la funzione $w(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ e questo equivale a chiedere che la funzione d'onda associata non sia fortemente localizzata, come si era spiegato sotto la (5.81).

Ci occupiamo dapprima del termine della equazione di Boltzmann detto di guadagno per collisione. Il nome ha origine dal fatto che questa equazione nasce come equazione di bilancio per un volume infinitesimo nello spazio delle fasi associato al sistema, rispetto al quale ci sono contributi dati da particelle che entrano nel volume infinitesimo poiché la loro posizione od il loro momento muta in seguito a collisione (detti appunto di guadagno) e termini che descrivono le particelle che in seguito a collisione lasciano questo volume infinitesimo; il termine di guadagno si ottiene da:

$$\sum_{\alpha} \hat{L}_{\alpha} \hat{\rho} \hat{L}_{\alpha}^{\dagger},$$

il cui elemento di matrice nella rappresentazione dei momenti è contenuto nella (5.102):

$$\int d^3\xi \, d^3\eta \, d^3p_1 \, d^3q_1 \int d\Omega_{\lambda} \sum_{\mathrm{m,n}} \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) \left[\langle \mathbf{q} \boldsymbol{\lambda} | \hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M} - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}} | \mathbf{q}_1 \boldsymbol{\eta} \rangle \right.$$

$$\sqrt{M\lambda}\langle u_{\mathrm{m}}|b_\eta|u_{\mathrm{n}}\rangle\Big]\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}} \langle \mathbf{q}_1|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle \Big[\langle u_{\mathrm{n}}|b^\dagger_\xi|u_{\mathrm{m}}\rangle\sqrt{M\lambda}$$

$$\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\lambda}\rangle\Big]\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}} \frac{e^{-\beta E_{\mathrm{n}}}}{Z}, \tag{6.45}$$

che ricomponendo la funzione Γ relativa al macrosistema e utilizzando la delta di conservazione dell'energia diventa:

$$\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3p_1\, d^3q_1 \int d\Omega_\lambda \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)$$

$$\left[\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle\sqrt{M\lambda}\right]\Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}} \Gamma(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\langle \mathbf{q}_1|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle$$

$$\left[\sqrt{M\lambda}\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\lambda}\rangle\right]\Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{p_1{}^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}} . \tag{6.46}$$

Supponiamo che i termini di potenziale varino in modo sufficientemente lento da poter valutare gli elementi di matrice per lo stesso valore di $\boldsymbol{\lambda}$ commettendo un errore trascurabile; otteniamo così dalla (6.46) la seguente:

$$\frac{2\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3p_1\, d^3q_1 \int d\Omega_\lambda\, M\lambda \left[\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}\rangle\right.$$

$$\left.\Gamma(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\langle \mathbf{q}_1|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle\langle \mathbf{p}_1\boldsymbol{\xi}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p_1^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\lambda}\rangle\right]\Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}} . \tag{6.47}$$

Ci occupiamo ora più in dettaglio dell'elemento di matrice:

$$\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle, \tag{6.48}$$

facendo riferimento alla descrizione della collisione fra due particelle nel sistema del centro di massa. Introduciamo le seguenti grandezze:

$$\mathbf{P}_{\mathbf{p},\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{p}+\boldsymbol{\xi}$$

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{p},\boldsymbol{\xi}} = \frac{M}{m+M}\mathbf{p} - \frac{m}{m+M}\boldsymbol{\xi},$$

che sono rispettivamente il momento del centro di massa e il momento di una delle due particelle nel sistema del centro di massa (l'altra ha momento $-\mathbf{Q}$). L'energia cinetica del sistema è data dalla somma dell'energia del centro di massa più l'energia delle due particelle nel sistema del centro di massa, cioé:

$$E_{p,\xi} = \frac{p^2}{2m} + \frac{\xi^2}{2M} = \frac{P^2}{2(m+M)} + \frac{Q^2}{2\mu} = E_{P,Q}, \tag{6.49}$$

ove μ è la massa ridotta del sistema, data da:

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \quad .$$

Gli autostati dell'Hamiltoniana libera per il sistema, prima caratterizzati con i valori dei momenti delle due particelle $|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle$ possono essere equivalentemente caratterizzati da $|\mathbf{PQ}\rangle$ e si ha ancora, analogamente a:

$$\langle \mathbf{p}\boldsymbol{\xi}|\mathbf{q}\boldsymbol{\eta}\rangle = \delta^3\left(\mathbf{p}-\mathbf{q}\right)\delta^3\left(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\eta}\right)$$

la seguente:

$$\langle \mathbf{PQ}|\mathbf{P}'\mathbf{Q}'\rangle = \delta^3\left(\mathbf{P}-\mathbf{P}'\right)\delta^3\left(\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'\right) \quad .$$

L'Hamiltoniana del sistema può essere divisa in due contributi tenendo conto del cambio di variabili:

$$\hat{\mathsf{H}} = \hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{cm}} + \hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}$$

ove $\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{cm}}$ è l'Hamiltoniana che descrive il moto del baricentro e $\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}$ è l'Hamiltoniana associata alle due particelle nel sistema del centro di massa; in essa compare il termine di potenziale che dipende solo dalla distanza relativa. Osserviamo che:

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{p},\boldsymbol{\xi}} = \frac{M}{m+M}\mathbf{p} - \frac{m}{m+M}\boldsymbol{\xi} = \mu\mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \mu\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}} \tag{6.50}$$

(ove abbiamo posto naturalmente $\mathbf{p} = m\mathbf{v}_{\mathbf{p}}$ e $\boldsymbol{\xi} = M\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}$) e di conseguenza:

$$\frac{Q^2_{\mathbf{p},\boldsymbol{\xi}}}{2\mu} = \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{p}} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2 \quad .$$

Possiamo indicare gli autostati di $\hat{\mathsf{H}}_o^{\mathrm{rel}}$ con un singolo vettore, e passare quindi da stati a due particelle a stati di particella singola, anche se come nella (6.50) indicheremo questi stati di particella singola con un doppio indice, per rendere più comprensibile la notazione; valgono le seguenti:

$$\hat{\mathsf{H}}_o|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle = \left(\frac{p^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}\right)|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle$$

$$\hat{\mathsf{H}}_o^{\mathrm{rel}}|\mu\mathbf{v_p}-\mu\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\rangle = \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_p}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2|\mu\mathbf{v_p}-\mu\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\rangle \quad .$$

In particolare si dimostra [44] che passando nelle coordinate del centro di massa si può riscrivere la (6.48) nel modo seguente:

$$\langle\mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle =$$

$$\delta^3\big(\mathbf{P}_{\mathbf{q},\boldsymbol{\lambda}}-\mathbf{P}_{\mathbf{p},\boldsymbol{\xi}}\big)\,\langle\mathbf{Q}_{\mathbf{q},\boldsymbol{\lambda}}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{Q^2_{\mathbf{p},\boldsymbol{\xi}}}{2\mu}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{Q}_{\mathbf{p},\boldsymbol{\xi}}\rangle, \tag{6.51}$$

o anche:

$$\langle\mathbf{q}\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle =$$

$$\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\xi})\,\langle\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_p}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v_p}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})\rangle \quad . \tag{6.52}$$

Dalla (6.52) e simili otteniamo per la (6.47) la:

$$\frac{2\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3p_1\, d^3q_1 \int d\Omega_\lambda\, M\lambda \Bigg[\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\eta})$$

$$\langle\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})\rangle$$

$$\Gamma(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\langle\mathbf{q}_1|\hat{\rho}^{(1)}|\mathbf{p}_1\rangle\delta^3(\mathbf{p}_1+\boldsymbol{\xi}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\lambda})$$

$$\langle\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{p}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{p}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v_p}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle\Bigg]\Bigg|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}} \quad . \tag{6.53}$$

Possiamo inoltre semplificare la notazione introducendo una delta di conservazione dell'energia; tenendo conto della prescrizione data per il modulo di $\boldsymbol{\lambda}$ abbiamo infatti:

$$\int d\Omega_\lambda \, M\lambda\Big|_{\frac{\lambda^2}{2M}=\frac{q_1{}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q^2}{2m}} = \int d^3\lambda \, \delta\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}\right),$$

da cui la (6.53) diventa, sfruttando anche la (5.76):

$$\frac{2\pi}{\hbar}\int d^3\xi \, d^3\eta \, d^3\lambda \, d^3p_1 \, d^3q_1 \; \delta\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}\right)\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\eta})$$

$$\delta^3(\mathbf{p}_1+\boldsymbol{\xi}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\lambda})\left[\langle\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})\rangle\right.$$

$$\left.\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})w(\mathbf{q}_1,\mathbf{p}_1)\langle\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{p}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{p}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{p}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle\right] \quad . \tag{6.54}$$

Per vedere il legame con la trasformata di Wigner consideriamo le seguenti identità:

$$w(\mathbf{q}_1,\mathbf{p}_1)=\int d^3k\, w\left(\frac{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}_1}{2}+\frac{\mathbf{k}}{2},\frac{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}_1}{2}-\frac{\mathbf{k}}{2}\right)\delta^3[\mathbf{k}+(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)]=$$

$$\int d^3x\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\, w\left(\frac{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}_1}{2}+\frac{\mathbf{k}}{2},\frac{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}_1}{2}-\frac{\mathbf{k}}{2}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot[\mathbf{k}+(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)]}, \tag{6.55}$$

nonché l'analoga per la funzione $\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})$:

$$\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})=\int d^3\sigma\,\mathit{\Gamma}\left(\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}+\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2},\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}-\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right)\delta^3[\boldsymbol{\sigma}+(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\eta})]=$$

$$\int d^3y\int\frac{d^3\sigma}{(2\pi\hbar)^3}\,\mathit{\Gamma}\left(\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}+\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2},\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}-\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{y}\cdot[\boldsymbol{\sigma}+(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\eta})]} \quad . \tag{6.56}$$

Sfruttando queste due relazioni abbiamo per la (6.54):

$$\frac{2\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3p_1\, d^3q_1$$

$$\int d^3x\left[\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\, w\left(\frac{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}_1}{2}+\frac{\mathbf{k}}{2},\frac{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}_1}{2}-\frac{\mathbf{k}}{2}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot[\mathbf{k}+(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)]}\right]$$

$$\int d^3y\left[\int\frac{d^3\sigma}{(2\pi\hbar)^3}\,\mathit{\Gamma}\left(\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}+\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2},\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}-\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{y}\cdot[\boldsymbol{\sigma}+(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\eta})]}\right]$$

$$\delta\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}\right)\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\eta})\,\delta^3(\mathbf{p}_1+\boldsymbol{\xi}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\lambda})$$

$$\left[\langle\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})\rangle\right.$$

$$\left.\langle\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{p}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{p}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v_p}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle\right] \quad . \tag{6.57}$$

Le delta di conservazione del momento implicano le seguenti:

$$\begin{aligned}\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}&=\mathbf{q}_1+\boldsymbol{\eta}\\ \mathbf{p}_1+\boldsymbol{\xi}&=\mathbf{p}+\boldsymbol{\lambda}\end{aligned} \quad ,$$

da cui abbiamo anche:

$$\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\eta}=\mathbf{p}-\mathbf{q}-(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1) \quad . \tag{6.58}$$

Consideriamo il seguente fattore all'interno della (6.57):

$$\int d^3x\left[\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\,w\left(\frac{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}_1}{2}+\frac{\mathbf{k}}{2},\frac{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}_1}{2}-\frac{\mathbf{k}}{2}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot[\mathbf{k}+(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)]}\right]$$

$$\int d^3y\left[\int\frac{d^3\sigma}{(2\pi\hbar)^3}\,\mathit{\Gamma}\left(\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}+\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2},\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}-\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{y}\cdot[\boldsymbol{\sigma}+(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\eta})]}\right]\simeq$$

$$\int d^3x\int d^3y\,e^{+\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{y}}e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)}$$

$$\left[\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\,w(\mathbf{q}_1+\frac{\mathbf{k}}{2},\mathbf{q}_1-\frac{\mathbf{k}}{2})\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\right]\left[\int\frac{d^3\sigma}{(2\pi\hbar)^3}\,\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta}+\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2},\boldsymbol{\eta}-\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2})\,e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{y}}\right], \tag{6.59}$$

dove si è usata ancora una volta la proprietà di quasi-diagonalità dei due operatori statistici. In questa espressione possiamo evidenziare proprio le funzioni di Wigner associate al neutrone e al macrosistema, abbiamo infatti, in accordo con la (6.25):

$$f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{p})=\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\,w(\mathbf{p}+\frac{\mathbf{k}}{2},\mathbf{p}-\frac{\mathbf{k}}{2})e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad . \tag{6.60}$$

Una relazione analoga vale nel formalismo di seconda quantizzazione [35] e possiamo porre, ricordando la definizione della funzione $\mathit{\Gamma}$:

$$f_{\mathrm{M}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\eta})=\int\frac{d^3\sigma}{(2\pi\hbar)^3}\,\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\eta}+\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2},\boldsymbol{\eta}-\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2})e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{y}} \quad . \tag{6.61}$$

La (6.59) diventa pertanto:

$$\int d^3x \int d^3y \, e^{+\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{y}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)} f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q}_1) f_{\mathrm{M}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\eta}) \quad . \tag{6.62}$$

Possiamo così riscrivere la (6.57) introducendo le funzioni di Wigner date dalle (6.60) e (6.61):

$$\begin{aligned} &\frac{2\pi}{\hbar} \int d^3\xi \, d^3\eta \, d^3\lambda \, d^3p_1 \, d^3q_1 \int d^3x \int d^3y \, e^{+\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{y}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)} f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q}_1) \\ &f_{\mathrm{M}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\eta}) \delta\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M}\right) \delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\eta}) \, \delta^3(\mathbf{p}_1+\boldsymbol{\xi}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\lambda}) \\ &\left[\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}}) | \hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}} - \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2 - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}} | \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}) \rangle \right. \\ &\left. \langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{p}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}) | \hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}} - \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{p}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2 + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}} | \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{p}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}}) \rangle \right] \quad . \end{aligned} \tag{6.63}$$

Per procedere facciamo ricorso alle ipotesi introdotte all'inizio del paragrafo sulle proprietà degli operatori statistici di interesse. Abbiamo visto che $\mathit{\Gamma}$ è da considerarsi significativamente diversa da zero solo per $\boldsymbol{\eta} \simeq \boldsymbol{\xi}$; la stessa ipotesi vale per la funzione $w(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1)$ e in forza della (6.58) questo implica anche la vicinanza degli indici $\mathbf{q}$ e $\mathbf{p}$; giungiamo dunque alla seguente espressione:

$$\begin{aligned} &\frac{2\pi}{\hbar} \int d^3\xi \, d^3\eta \, d^3\lambda \, d^3p_1 \, d^3q_1 \int d^3x \int d^3y \, e^{+\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{y}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot(\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)} f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q}_1) \\ &f_{\mathrm{M}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\eta}) \delta\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M}\right) \delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\eta}) \, \delta^3(\mathbf{p}_1+\boldsymbol{\xi}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\lambda}) \\ &\left[\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}}) | \hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}} - \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2 - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}} | \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}) \rangle \right. \\ &\left. \langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}) | \hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}} - \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2 + i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}} | \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{p}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}}) \rangle \right], \end{aligned} \tag{6.64}$$

che si semplifica considerevolmente se sfruttiamo l'integrazione in $\mathbf{p}_1$ per ottenere una delta sulle coordinate; allo stesso modo sfruttiamo l'integrazione in $\boldsymbol{\xi}$ per eliminare una delle due delta di conservazione dei momenti; ricorriamo poi anche alla relazione $\mathbf{q} \simeq \mathbf{p}$ nell'elemento di matrice:

$$\frac{2\pi}{\hbar} \int d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_1 \; (2\pi\hbar)^3 \, \delta\!\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} \right) \delta^3(\mathbf{q} + \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{q}_1 - \boldsymbol{\eta})$$

$$\int d^3x \, e^{+\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}} f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x}, \mathbf{q}_1) f_{\mathrm{M}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta})$$

$$\left| \langle \mu(\mathbf{v_q} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}}) | \hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}} - \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2 - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}} | \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}) \rangle \right|^2 , \qquad (6.65)$$

che è proprio il termine cercato. Particolarmente notevole è il fatto che le due funzioni di Wigner siano valutate nello stesso punto dello spazio, che traduce il fatto che a livello di descrizione microscopica l'interazione è locale. In particolare possiamo porre:

$$\langle \mu(\mathbf{v_q} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}}) | \hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}} \frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}} - \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2 - i\varepsilon} \hat{\mathsf{V}} | \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}) \rangle = T_{q\lambda, q_1\eta} \qquad (6.66)$$

semplificando così l'espressione in:

$$\frac{2\pi}{\hbar} (2\pi\hbar)^3 \int d^3x \, e^{+\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}} \int d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_1 \, \delta\!\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} \right)$$

$$\delta^3(\mathbf{q} + \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{q}_1 - \boldsymbol{\eta}) \, f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x}, \mathbf{q}_1) f_{\mathrm{M}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) \, |T_{q\lambda, q_1\eta}|^2 \quad . \qquad (6.67)$$

Ci vogliamo occupare ora del termine:

$$-\frac{1}{2} \sum_\alpha \left\{ \hat{L}_\alpha^\dagger \hat{L}_\alpha, \hat{\rho} \right\}$$

dal quale otterremo il contributo di perdita per collisione. Svolgiamo l'anticommutatore

$$-\frac{1}{2} \sum_\alpha \hat{L}_\alpha^\dagger \hat{L}_\alpha \hat{\rho} - \frac{1}{2} \sum_\alpha \hat{\rho} \hat{L}_\alpha^\dagger \hat{L}_\alpha \qquad (6.68)$$

e sviluppiamo il primo dei due termini, il cui elemento di matrice era stato esplicitato nella (5.122):

$$-\frac{\pi}{\hbar} \int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, d^3q_2 \int d\Omega_\lambda \, \Gamma(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) M \sqrt{\bar{\lambda}} \sqrt{\bar{\lambda}}$$

$$\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} + i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_2\bar{\boldsymbol{\lambda}}\rangle\Big|_{\frac{\bar{\lambda}^2}{2M} = \frac{q^2}{2m} + \frac{\eta^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m}}$$

$$\langle \mathbf{q}_2\tilde{\boldsymbol{\lambda}}|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q_1^2}{2m} - \frac{\xi^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\xi}\rangle\Big|_{\frac{\tilde{\lambda}^2}{2M} = \frac{{q_1}^2}{2m} + \frac{\xi^2}{2M} - \frac{{q_2}^2}{2m}} w(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}), \tag{6.69}$$

analogamente a prima non distinguiamo i due valori assunti dal modulo di $\boldsymbol{\lambda}$ ed evidenziamo subito la delta di conservazione dell'energia:

$$-\frac{\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_1\, d^3q_2\, \delta\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\eta^2}{2M} - \frac{q_2^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M}\right) \Gamma(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) w(\mathbf{q}_1, \mathbf{p})$$

$$\langle \mathbf{q}\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} + i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}\rangle\langle \mathbf{q}_2\boldsymbol{\lambda}|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}} - \frac{q^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M} - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\xi}\rangle \quad . \tag{6.70}$$

Svolgiamo ulteriormente l'espressione usando le coordinate collegate al sistema del centro di massa, come si è fatto nello sviluppo del termine di guadagno:

$$-\frac{\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_1\, d^3q_2\, \delta\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\eta^2}{2M} - \frac{q_2^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M}\right) \delta^3(\mathbf{q} + \boldsymbol{\eta} - \mathbf{q}_2 - \boldsymbol{\lambda})$$

$$\delta^3(\mathbf{q}_2 + \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{q}_1 - \boldsymbol{\xi})\, \Gamma(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) w(\mathbf{q}_1, \mathbf{p})$$

$$\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}} - \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2 + i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle$$

$$\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}} - \hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}} - \frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2 - i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})\rangle \quad . \tag{6.71}$$

Usiamo ancora le precedenti ipotesi; la presenza della funzione $\Gamma(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta})$ implica quindi $\boldsymbol{\xi} \simeq \boldsymbol{\eta}$ e lo stesso supponiamo valga per $w(\mathbf{q}_1, \mathbf{p})$. Dalla delta di conservazione dei momenti abbiamo poi che queste relazioni implicano $\mathbf{q} \simeq \mathbf{p}$. Inseriamo ora in questa espressione le analoghe delle (6.55) e (6.56):

$$-\frac{\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_1\, d^3q_2\;\; \delta\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\eta^2}{2M} - \frac{q_2^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M}\right) \delta^3(\mathbf{q} + \boldsymbol{\eta} - \mathbf{q}_2 - \boldsymbol{\lambda})$$

$$\delta^3(\mathbf{q}_2 + \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{q}_1 - \boldsymbol{\xi}) \int d^3x \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\, w\left(\frac{\mathbf{q}_1 + \mathbf{p}}{2} + \frac{\mathbf{k}}{2}, \frac{\mathbf{q}_1 + \mathbf{p}}{2} - \frac{\mathbf{k}}{2}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot[\mathbf{k} + (\mathbf{p} - \mathbf{q}_1)]}$$

$$\int d^3y \int \frac{d^3\sigma}{(2\pi\hbar)^3}\, \Gamma\left(\frac{\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\xi}}{2} + \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \frac{\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\xi}}{2} - \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{y}\cdot[\boldsymbol{\sigma} + (\eta - \xi)]}$$

$$\langle \mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\rm rel}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle$$

$$\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\rm rel}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})\rangle, \tag{6.72}$$

e come passo ulteriore recuperiamo le desiderate funzioni di Wigner sfruttando la seguente uguaglianza fornita dalle delta di conservazione dei momenti:

$$\mathbf{q}+\boldsymbol{\eta}=\mathbf{q}_1+\boldsymbol{\xi}\Longrightarrow \boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\xi}=(\mathbf{p}-\mathbf{q})-(\mathbf{p}-\mathbf{q}_1),$$

ovvero:

$$-\frac{\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_1\, d^3q_2\;\delta\!\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q_2^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}\right)\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\eta}-\mathbf{q}_2-\boldsymbol{\lambda})$$

$$\delta^3(\mathbf{q}_2+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\xi})\int d^3x\int d^3y\, f_{\rm n}\left(\mathbf{x},\frac{\mathbf{q}_1+\mathbf{p}}{2}\right) f_{\rm M}\left(\mathbf{y},\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}\right)e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q}_1)}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{y}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}\langle \mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\rm rel}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle$$

$$\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\rm rel}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})\rangle \quad . \tag{6.73}$$

A questo punto utilizziamo le relazioni fra i vari momenti dedotte sopra la (6.72) e otteniamo:

$$-\frac{\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_2\, d^3q_1\, d^3\lambda\,\delta\!\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q_2^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}\right)\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\eta}-\mathbf{q}_2-\boldsymbol{\lambda})$$

$$\delta^3(\mathbf{q}_2+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\xi})\int d^3x\int d^3y\, f_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{q})f_{\rm M}(\mathbf{y},\boldsymbol{\eta})e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q}_1)}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{y}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}$$

$$\langle \mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\rm rel}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle$$

$$\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\rm rel}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})\rangle, \tag{6.74}$$

ma per la presenza delle delta di conservazione dei momenti possiamo agevolmente effettuare l'integrazione rispetto alla variabile $\boldsymbol{\xi}$ e si può poi integrare rispetto alla variabile $\mathbf{q}_1$ ottenendo una delta di dirac per quello che riguarda il valore delle coordinate:

$$-\frac{\pi}{\hbar}\int d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_2\, \delta\!\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q_2^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}\right)\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\eta}-\mathbf{q}_2-\boldsymbol{\lambda})$$

$$\int d^3x \int d^3y\, f_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{q}) f_{\rm M}(\mathbf{y},\boldsymbol{\eta}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot\mathbf{p}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{y}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}(2\pi\hbar)^3\delta^3\left(\mathbf{x}-\mathbf{y}\right)$$

$$\langle\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\rm rel}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle$$

$$\langle\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\rm rel}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})\rangle \quad . \tag{6.75}$$

Dalla (6.75) giungiamo alla espressione finale sfruttando la definizione introdotta nella (6.66):

$$-\frac{\pi}{\hbar}(2\pi\hbar)^3\int d^3x\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}\int d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_2\, \delta\!\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{q_2^2}{2m}-\frac{\lambda^2}{2M}\right)$$

$$\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\eta}-\mathbf{q}_2-\boldsymbol{\lambda})\, f_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{q}) f_{\rm M}(\mathbf{y},\boldsymbol{\eta})\left|T_{q_2\lambda,q\eta}\right|^2 \quad . \tag{6.76}$$

Abbiamo così parzialmente ottenuto il termine di perdita per collisione della equazione alla Boltzmann. L'altro contributo a questo termine esce dall'altro termine nello sviluppo dell'anticommutatore richiamato nella (6.68); esso è scrivibile nella forma:

$$-\frac{\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_2\, d^3q_1\int d\Omega_\lambda\, \Gamma(\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta}) w(\mathbf{q},\mathbf{q}_1) M\sqrt{\bar{\lambda}}\sqrt{\tilde{\lambda}}$$

$$\langle\mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q_1^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_2\bar{\boldsymbol{\lambda}}\rangle\Big|_{\frac{\bar{\lambda}^2}{2M}=\frac{{q_1}^2}{2m}+\frac{\eta^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}$$

$$\langle\mathbf{q}_2\tilde{\boldsymbol{\lambda}}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle\Big|_{\frac{\tilde{\lambda}^2}{2M}=\frac{p^2}{2m}+\frac{\xi^2}{2M}-\frac{{q_2}^2}{2m}}, \tag{6.77}$$

che sviluppiamo analogamente al termine precedente, lavorando nelle stesse ipotesi:

$$-\frac{\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, d^3q_2\, d^3\lambda\, \delta\!\left(\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}\right)\delta^3(\mathbf{q}_2+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\xi})$$

$$\delta^3(\mathbf{q}_2+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\eta})\int d^3y\int\frac{d^3\sigma}{(2\pi\hbar)^3}\,\Gamma\left(\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}+\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2},\frac{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}}{2}-\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{y}\cdot[\boldsymbol{\sigma}+(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\xi})]}$$

$$\int d^3x \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\, w\left(\frac{\mathbf{q}+\mathbf{q}_1}{2}+\frac{\mathbf{k}}{2}, \frac{\mathbf{q}+\mathbf{q}_1}{2}-\frac{\mathbf{k}}{2}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot[\mathbf{k}+(\mathbf{q}_1-\mathbf{q})]}$$

$$\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{p}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle$$

$$\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{p}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{p}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})\rangle \quad . \tag{6.78}$$

Per procedere facciamo nuovamente appello alle delta di conservazione del momento, che forniscono il legame seguente:

$$\boldsymbol{\xi}+\mathbf{p}=\boldsymbol{\eta}+\mathbf{q}_1 \Longrightarrow \boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\xi}=(\mathbf{p}-\mathbf{q})-(\mathbf{q}_1-\mathbf{q}); \tag{6.79}$$

dalle ipotesi usuali sulla funzione $\varGamma$ abbiamo $\boldsymbol{\xi}\simeq\boldsymbol{\eta}$ e quindi dalla (6.79) $\mathbf{p}\simeq\mathbf{q}_1$, ma l'ipotesi sulla funzione $w(\mathbf{q},\mathbf{q}_1)$ implica a sua volta $\mathbf{q}\simeq\mathbf{q}_1$ e di conseguenza $\mathbf{p}\simeq\mathbf{q}$:

$$-\frac{\pi}{\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, d^3q_2\, d^3\lambda\, \delta\left(\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}\right)\delta^3(\mathbf{q}_2+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\xi})$$

$$\delta^3(\mathbf{q}_2+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\eta})\int d^3x \int d^3y\, f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q}) f_{\mathrm{M}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{y}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot(\mathbf{q}_1-\mathbf{q})}$$

$$\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{p}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\rangle$$

$$\langle \mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_2}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v}_{\mathbf{q}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})\rangle \quad . \tag{6.80}$$

Il passo seguente consiste nell'eseguire l'integrazione rispetto a $\boldsymbol{\eta}$ sfruttando una delle delta di conservazione del momento e ottenendo poi dalla integrazione rispetto a $\mathbf{q}_1$ la $\delta^3(\mathbf{x}-\mathbf{y})$ che ci permette di valutare le due funzioni di Wigner nello stesso punto recuperando così la località tipica dei termini che danno contributi legati alla collisione fra le particelle; otteniamo dunque alfine (con la solita prescrizione per $T_{q_2\lambda,q\xi}$):

$$-\frac{\pi}{\hbar}(2\pi\hbar)^3\int d^3x\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}\int d^3\xi\, d^3q_2\, d^3\lambda\, \delta\left(\frac{q_2^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}\right)$$

$$\delta^3(\mathbf{q}_2+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\xi})\, f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q}) f_{\mathrm{M}}(\mathbf{y},\boldsymbol{\xi})\, |T_{q_2\lambda,q\xi}|^2 \quad . \tag{6.81}$$

Questa espressione coincide con la (6.76) se solo si cambia nome alla variabile interna per uniformare la notazione, otteniamo quindi sommando i due contributi l'espressione seguente:

$$-\frac{2\pi}{\hbar}(2\pi\hbar)^3 \int d^3x\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})} \int d^3\eta\, d^3\lambda\, d^3q_2\, \delta\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\eta^2}{2M} - \frac{q_2^2}{2m} - \frac{\lambda^2}{2M}\right)$$

$$\delta^3(\mathbf{q} + \boldsymbol{\eta} - \mathbf{q}_2 - \boldsymbol{\lambda})\, f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x}, \mathbf{q}) f_{\mathrm{M}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta})\, |T_{q_2\lambda, q\eta}|^2 \quad . \tag{6.82}$$

Abbiamo così ottenuto dai due seguenti termini della master-equation,

$$-\frac{1}{2}\sum_\alpha \left\{\hat{L}_\alpha^\dagger \hat{L}_\alpha, \hat{\rho}\right\} + \sum_\alpha \hat{L}_\alpha \hat{\rho} \hat{L}_\alpha^\dagger,$$

nell'ipotesi di operatori statistici quasi diagonali nei momenti, rispettivamente le espressioni (6.82) e (6.65), che leggiamo come termine di perdita e guadagno per collisione in una trattazione alla Boltzmann. Questa risulta essere effettivamente giustificata dal punto di vista fisico se la funzione di Wigner che abbiamo introdotto ha le proprietà indispensabili per essere interpretata come una densità nello spazio delle fasi.

6.4 Il termine di potenziale della master-equation

Vogliamo ora trattare il termine della master-equation dato dal commutatore fra l'operatore statistico del neutrone e la parte autoaggiunta di $\hat{\mathbf{V}}$:

$$-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{\mathbf{V}} + \hat{\mathbf{V}}^\dagger}{2}, \hat{\rho}\right] \quad .$$

In questo passaggio ad una descrizione alla Boltzmann ci aspettiamo che il contributo dato da questo termine sia poco rilevante, poiché contiene proprio il potenziale $\hat{\mathbf{V}}$ che descrive la dinamica coerente nel passaggio alle equazione delle onde di Schrödinger, come abbiamo visto all'inizio del capitolo. Per convincersi di questo riscriviamo l'anticommutatore nella forma seguente:

$$-\frac{i}{2\hbar}[\hat{\mathbf{V}},\hat{\rho}]+\left(-\frac{i}{2\hbar}[\hat{\mathbf{V}},\hat{\rho}]\right)^{\dagger}=-\frac{i}{2\hbar}[\hat{\mathbf{V}},\hat{\rho}]+\quad \text{h. c.} \qquad . \tag{6.83}$$

Consideriamo allora solo il primo dei due termini, il cui elemento di matrice scritto per esteso diventa:

$$-\frac{i}{2\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, \langle \mathbf{q}\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{q^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{q}_1\boldsymbol{\xi}\rangle w(\mathbf{q}_1,\mathbf{p},t)\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta})$$

$$+\frac{i}{2\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, w(\mathbf{q},\mathbf{q}_1,t)\langle \mathbf{q}_1\boldsymbol{\eta}|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}-\frac{p^2}{2m}-\frac{\xi^2}{2M}+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mathbf{p}\boldsymbol{\xi}\rangle\mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta}) \quad . \tag{6.84}$$

Riscriviamo la (6.84) usando al solito la (6.52) per l'elemento di matrice e raggruppando per quanto possibile i termini:

$$-\frac{i}{2\hbar}\int d^3\xi\, d^3\eta\, d^3q_1\, \mathit{\Gamma}(\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\eta})\Bigg[\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\eta}-\mathbf{q}_1-\boldsymbol{\xi})$$

$$\langle\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_q}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}\right)^2-i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})\rangle w(\mathbf{q}_1,\mathbf{p},t)+$$

$$-\delta^3(\mathbf{q}_1+\boldsymbol{\eta}-\mathbf{p}-\boldsymbol{\xi})\, w(\mathbf{q},\mathbf{q}_1,t)$$

$$\langle\mu(\mathbf{v}_{\mathbf{q}_1}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})|\hat{\mathsf{V}}-\hat{\mathsf{V}}\frac{1}{\hat{\mathsf{H}}^{\mathrm{rel}}-\frac{\mu}{2}\left(\mathbf{v_p}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}}\right)^2+i\varepsilon}\hat{\mathsf{V}}|\mu(\mathbf{v_p}-\mathbf{v}_{\boldsymbol{\xi}})\rangle\Bigg], \tag{6.85}$$

ma osservando questa espressione si vede che nelle ipotesi più volte menzionate per le funzioni $\mathit{\Gamma}$ e w, che comportano $\boldsymbol{\xi}\simeq\boldsymbol{\eta}$, $\mathbf{q}_1\simeq\mathbf{p}$ e $\mathbf{q}\simeq\mathbf{q}_1$, esso è trascurabile nelle approssimazioni da noi adottate. Lo stesso risultato vale ovviamente per l'aggiunto di questa espressione. L'approssimazione nella quale si trascura completamente questo contributo potrebbe rivelarsi molto delicata se si volesse utilizzare un'equazione alla Boltzmann anche per descrivere l'interazione coerente fra neutrone e cristallo (a questo riguardo si veda anche il Capitolo 7); in questo caso lo studio del contributo dato dal termine di potenziale autoaggiunto alla equazione di Boltzmann potrebbe rivelarsi particolarmente interessante.

6.5 Termine libero ed espressione finale dell'equazione

A questo punto dell'equazione alla Lindblad (5.121) trovata per l'evoluzione temporale dell'operatore statistico abbiamo valutato tutti i termini tranne la derivata temporale ed il contributo legato all'evoluzione libera. Per la prima abbiamo:

$$\frac{\partial}{\partial t}w(\mathbf{q},\mathbf{p},t)=\frac{\partial}{\partial t}\left[\int d^3x\int\frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3}\,w\left(\frac{\mathbf{q}+\mathbf{p}}{2}+\frac{\mathbf{k}}{2},\frac{\mathbf{q}+\mathbf{p}}{2}-\frac{\mathbf{k}}{2},t\right)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot[\mathbf{k}+(\mathbf{p}-\mathbf{q})]}=\right]$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}f_{\mathrm{n}}\left(\mathbf{x},\frac{\mathbf{q}+\mathbf{p}}{2}\right)\right]\simeq\int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}\frac{\partial f_{\mathrm{n}}}{\partial t}(\mathbf{x},\mathbf{q}),\qquad(6.86)$$

ove si è usata la solita ipotesi sulla funzione $w(\mathbf{q},\mathbf{p},t)$.

Ci occupiamo ora del contributo dato dal termine cinetico:

$$-\frac{i}{\hbar}\langle\mathbf{q}|\left[\hat{\mathsf{H}}_o,\hat{\rho}(t)\right]|\mathbf{p}\rangle=-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{q^2}{2m}-\frac{p^2}{2m}\right)w(\mathbf{q},\mathbf{p},t)=$$

$$-\frac{i}{\hbar}\frac{(\mathbf{q}-\mathbf{p})(\mathbf{q}+\mathbf{p})}{2m}\int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}f_{\mathrm{n}}\left(\mathbf{x},\frac{\mathbf{q}+\mathbf{p}}{2},t\right)\simeq$$

$$-\frac{\mathbf{q}+\mathbf{p}}{2m}\int d^3x\left[-\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}\right)\right]f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)=$$

$$-\frac{\mathbf{q}+\mathbf{p}}{2m}\int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)\simeq$$

$$\simeq\int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{x}\cdot(\mathbf{p}-\mathbf{q})}\left[-\mathbf{q}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)\right]\quad.\qquad(6.87)$$

Possiamo a questo punto mettere insieme tutti i termini ottenuti nei vari paragrafi, ottenendo dalla (5.121):

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}=-\frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathsf{H}}_o,\hat{\rho}\right]-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hat{\mathbf{V}}+\hat{\mathbf{V}}^\dagger}{2},\hat{\rho}\right]-\frac{1}{2}\sum_\alpha\left\{\hat{L}_\alpha^\dagger\hat{L}_\alpha,\hat{\rho}\right\}+\sum_\alpha\hat{L}_\alpha\hat{\rho}\hat{L}_\alpha^\dagger,$$

nel limite in cui gli operatori statistici descriventi neutrone e macrosistema siano quasi diagonali nella rappresentazione dei momenti, la seguente equazione alla Boltzmann:

$$\int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}}\left[\frac{\partial f_{\mathrm{n}}}{\partial t}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)\right]=\int d^3x\,e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}}\left[-\frac{\mathbf{q}}{m}\frac{\partial f_{\mathrm{n}}}{\partial\mathbf{x}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)+\right.$$

$$+\frac{2\pi}{\hbar}\,(2\pi\hbar)^3\int d^3k\,d^3\eta\,d^3\lambda\,\delta\!\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{k^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}\right)\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{k}-\boldsymbol{\eta})$$

$$f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{k},t)f_{\mathrm{M}}(\mathbf{x},\boldsymbol{\eta})\,|T_{q\lambda,k\eta}|^2$$

$$-\frac{2\pi}{\hbar}\,(2\pi\hbar)^3 f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)\int d^3k\,d^3\eta\,d^3\lambda\,\delta\!\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{k^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}\right)\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{k}-\boldsymbol{\eta})$$

$$\left. f_{\mathrm{M}}(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda})\,|T_{k\eta,q\lambda}|^2\right] \quad . \tag{6.88}$$

Questa espressione è stata ottenuta a partire da generici $\mathbf{q}$ e $\mathbf{p}$, anche se gli unici contributi rilevanti sono quelli per cui i valori di questi due momenti sono molto prossimi fra loro, e possiamo quindi da questa dedurre la seguente:

$$\frac{\partial f_{\mathrm{n}}}{\partial t}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)=$$

$$-\frac{\mathbf{q}}{m}\cdot\frac{\partial f_{\mathrm{n}}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)+\frac{2\pi}{\hbar}\,(2\pi\hbar)^3\int d^3k\,d^3\eta\,d^3\lambda\,\delta\!\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{k^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}\right)$$

$$\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{k}-\boldsymbol{\eta})\left(f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{k},t)f_{\mathrm{M}}(\mathbf{x},\boldsymbol{\eta})\,|T_{q\lambda,k\eta}|^2-f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)f_{\mathrm{M}}(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda})\,|T_{k\eta,q\lambda}|^2\right) \quad . \tag{6.89}$$

6.6 L'equazione di Boltzmann nella notazione usuale

La (6.89) corrisponde all'equazione di Boltzmann descrivente l'interazione fra neutroni ed un mezzo materiale, ove f_{n} è la funzione di distribuzione di probabilità nello spazio delle fasi del neutrone, mentre f_{M} è la funzione di distribuzione per il mezzo. Equazioni di questo genere sono spesso usate nello studio della diffusione di neutroni attraverso un mezzo materiale. Rispetto all'equazione di Boltzmann usata per descrivere il raggiungimento dell'equilibrio da parte di un gas questa equazione è significativamente più semplice poiché risulta lineare in f_{n}; f_{M} si considera in generale assegnata pensando il mezzo in stato di equilibrio termodinamico. La linearità in f_{n}

è giustificata dalla debole interazione fra i neutroni.

Poiché la forma (6.89) nella quale abbiamo ottenuto l'equazione non è quasi mai usata in letteratura procediamo ora ad un'ulteriore elaborazione dell'espressione, in modo da ottenere l'equazione alla Boltzmann nella notazione usuale. Anzitutto osserviamo che dalla teoria dello scattering si ha:

$$(2\pi)^4 \hbar^2 \mu^2 \left|T_{q\lambda,k\eta}\right|^2 = \sigma\left[\mu(\mathbf{v_k} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}) \to \mu(\mathbf{v_q} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\right], \tag{6.90}$$

dove

$$\sigma\left[\mu(\mathbf{v_k} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}) \to \mu(\mathbf{v_q} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\right]$$

è la sezione d'urto differenziale espressa nel sistema del centro di massa relativa ad un urto che trasformi le velocità $\mathbf{v_k}, \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}$ in $\mathbf{v_q}, \mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}}$. Possiamo quindi come primo passo riscrivere la (6.89) esplicitando le sezioni d'urto differenziali relative ai due termini di perdita e guadagno:

$$\frac{\partial f_{\mathrm{n}}}{\partial t}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) = -\frac{\mathbf{q}}{m}\frac{\partial f_{\mathrm{n}}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) + \frac{1}{\mu^2}\int d^3k\, d^3\eta\, d^3\lambda\, \delta\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{\lambda^2}{2M} - \frac{k^2}{2m} - \frac{\eta^2}{2M}\right)$$

$$\delta^3(\mathbf{q} + \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{k} - \boldsymbol{\eta}) \Bigg\{ f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{k},t) f_{\mathrm{M}}(\mathbf{x},\boldsymbol{\eta})\sigma\left[\mu(\mathbf{v_k} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}) \to \mu(\mathbf{v_q} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}})\right] +$$

$$-f_{\mathrm{n}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t) f_{\mathrm{M}}(\mathbf{x},\lambda)\sigma\left[\mu(\mathbf{v_q} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\lambda}}) \to \mu(\mathbf{v_k} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}})\right] \Bigg\} \quad . \tag{6.91}$$

Operiamo il seguente cambio di variabili equivalente a passare nel sistema del centro di massa rispetto alle variabili $\mathbf{k}$ ed $\boldsymbol{\eta}$:

$$\mathbf{k}, \boldsymbol{\eta} \longrightarrow \boldsymbol{\Xi}, \boldsymbol{\Lambda}$$

$$\boldsymbol{\Xi} = \mathbf{k} + \boldsymbol{\eta} \qquad \boldsymbol{\Lambda} = \frac{M}{m+M}\mathbf{k} - \frac{m}{m+M}\boldsymbol{\eta} = \mu(\mathbf{v_k} - \mathbf{v}_{\boldsymbol{\eta}}) \quad . \tag{6.92}$$

Lo Jacobiano della trasformazione vale 1 e le relazioni inverse delle (6.92) sono date dalle seguenti:

$$\mathbf{k} = \frac{\mu}{M}\boldsymbol{\Xi} + \boldsymbol{\Lambda} \qquad \boldsymbol{\eta} = \frac{\mu}{m}\boldsymbol{\Xi} - \boldsymbol{\Lambda} \quad . \tag{6.93}$$

Notiamo che la delta di conservazione dell'energia può essere riscritta nel modo seguente:

$$\delta\left(\frac{q^2}{2m}+\frac{\lambda^2}{2M}-\frac{k^2}{2m}-\frac{\eta^2}{2M}\right)=$$

$$\delta\left[\frac{(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda})^2}{2(m+M)}-\frac{(\mathbf{k}+\boldsymbol{\eta})^2}{2(m+M)}+\frac{\mu}{2}(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})^2-\frac{\mu}{2}(\mathbf{v_k}-\mathbf{v_\eta})^2\right],$$

e tenendo conto dell'altra delta di conservazione dei momenti presente nell'espressione (6.91):

$$\delta\left[\frac{\mu}{2}(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})^2-\frac{\mu}{2}(\mathbf{v_k}-\mathbf{v_\eta})^2\right]=\delta\left[\frac{\mu}{2}(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})^2-\Lambda^2\right] \quad .$$

Dalla (6.91) giungiamo dunque alla seguente:

$$\frac{\partial f_{\rm n}}{\partial t}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)=-\frac{\mathbf{q}}{m}\cdot\frac{\partial f_{\rm n}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)+\frac{1}{\mu^2}\int d^3\Xi\, d^3\Lambda\, d^3\lambda\, \delta\left[\frac{\mu}{2}(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})^2-\Lambda^2\right]$$

$$\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\boldsymbol{\Xi})\Bigg\{f_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{k},t)f_{\rm M}(\mathbf{x},\boldsymbol{\eta})\sigma\left[\boldsymbol{\Lambda}\to\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})\right]+$$

$$-f_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{q},t)f_{\rm M}(\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda})\sigma\left[\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})\to\boldsymbol{\Lambda}\right]\Bigg\}_{\mathbf{k}=\frac{\mu}{M}\boldsymbol{\Xi}+\boldsymbol{\Lambda},\,\boldsymbol{\eta}=\frac{\mu}{m}\boldsymbol{\Xi}-\boldsymbol{\Lambda}}, \qquad (6.94)$$

ove abbiamo scritto esplicitamente i legami fra nuove e vecchie variabili, per evidenziare il fatto che queste ultime devono essere pensate espresse in funzione delle nuove variabili; d'ora in poi tralasceremo di riscrivere la prescrizione, che si considera sempre valida. Per procedere introduciamo al posto delle funzioni di Wigner $f_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{k})$ $f_{\rm M}(\mathbf{x},\boldsymbol{\eta})$ sin qui utilizzate e normalizzate nel modo seguente:

$$\int d^3x\, d^3k\, f_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{k})=1 \qquad \int d^3x\, d^3\eta\, f_{\rm M}(\mathbf{x},\boldsymbol{\eta})=1, \qquad (6.95)$$

le analoghe primate espresse in funzione delle velocità piuttosto che dei momenti:

$$f'_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{v_k})=m^3 f_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{k}) \qquad f'_{\rm M}(\mathbf{x},\mathbf{v_\eta})=M^3 f_{\rm M}(\mathbf{x},\boldsymbol{\eta}), \qquad (6.96)$$

e così normalizzate:

$$\int d^3x\, d^3v_k\, f'_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{v_k})=1 \qquad \int d^3x\, d^3v_\eta\, f'_{\rm M}(\mathbf{x},\mathbf{v_\eta})=1 \quad .$$

Si ha:

$$\frac{1}{m^3}\frac{\partial f'_{\rm n}}{\partial t}(\mathbf{x},\mathbf{v_q},t) = -\frac{\mathbf{q}}{m}\cdot\frac{1}{m^3}\frac{\partial f'_{\rm n}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x},\mathbf{v_q},t)+$$

$$+\frac{1}{\mu^2}\int d^3\Xi\, d^3\Lambda\, d^3\lambda\, \delta\Big[\frac{\mu}{2}(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})^2 - \Lambda^2\Big]$$

$$\delta^3(\mathbf{q}+\boldsymbol{\lambda}-\boldsymbol{\Xi})\,\frac{1}{m^3M^3}\Bigg\{f'_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{v_k})f'_{\rm M}(\mathbf{x},\mathbf{v}_{\boldsymbol\eta})\sigma\left[\boldsymbol{\Lambda}\to\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})\right]+$$

$$-f'_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{v_q})f'_{\rm M}(\mathbf{x},\mathbf{v_\lambda})\sigma\left[\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})\to\boldsymbol{\Lambda}\right]\Bigg\} \quad . \tag{6.97}$$

La (6.97) può essere ulteriormente semplificata passando in coordinate polari rispetto a $\boldsymbol{\Lambda}$ e valutando la delta con argomento $\boldsymbol{\Xi}$:

$$\frac{\partial f'_{\rm n}}{\partial t}(\mathbf{x},\mathbf{v_q},t) = -\mathbf{v_q}\cdot\frac{\partial f'_{\rm n}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x},\mathbf{v_q},t)+\frac{1}{\mu^2}\int d^3v_\lambda\int_0^{+\infty} d\Lambda\,\Lambda^2\int d\Omega\,\frac{\mu}{\Lambda}\delta(\Lambda-\mu\,|\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda}|)$$

$$\Bigg\{f'_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{v_k})f'_{\rm M}(\mathbf{x},\mathbf{v}_{\boldsymbol\eta})\sigma\left[\boldsymbol{\Lambda}\to\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})\right]-f'_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{v_q})f'_{\rm M}(\mathbf{x},\mathbf{v_\lambda})\sigma\left[\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})\to\boldsymbol{\Lambda}\right]\Bigg\} \tag{6.98}$$

ove $d\Omega$ è l'angolo di cui ruota il vettore $\boldsymbol{\Lambda}$ ovvero $\mu(\mathbf{v_k}-\mathbf{v}_{\boldsymbol\eta})$ in seguito alla collisione, il cui modulo rimane immutato come si vede dalla delta di conservazione dell'energia:

$$\frac{\partial f'_{\rm n}}{\partial t}(\mathbf{x},\mathbf{v_q},t) = -\mathbf{v_q}\cdot\frac{\partial f'_{\rm n}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x},\mathbf{v_q},t)+\int d^3v_\lambda\int d\Omega\,|\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda}|$$

$$\Bigg\{f'_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{v_k})f'_{\rm M}(\mathbf{x},\mathbf{v}_{\boldsymbol\eta})\sigma\left[\mu(\mathbf{v_k}-\mathbf{v}_{\boldsymbol\eta})\to\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})\right]$$

$$-f'_{\rm n}(\mathbf{x},\mathbf{v_q})f'_{\rm M}(\mathbf{x},\mathbf{v_\lambda})\sigma\left[\mu(\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda})\to\mu(\mathbf{v_k}-\mathbf{v}_{\boldsymbol\eta})\right]\Bigg\}_{|\mathbf{v_q}-\mathbf{v_\lambda}|=|\mathbf{v_k}-\mathbf{v}_{\boldsymbol\eta}|} \quad . \tag{6.99}$$

La (6.99) così ottenuta è l'esatto equivalente della (6.89) scritta però in funzione delle velocità piuttosto che dei momenti e nella notazione che si trova usualmente in letteratura.

Capitolo 7

Riconsiderazione degli esperimenti di Rauch

7.1 La formula per il calcolo dell'intensità del fascio di neutroni all'uscita dall'interferometro

Per vedere quali indicazioni trarre dalla struttura della master-equation ottenuta e dal legame, chiarito nel Capitolo 6, tra questa ed una descrizione cinetica alla Boltzmann, procediamo anzitutto a descrivere il neutrone che attraversa l'interferometro nel caso libero, ovvero senza assorbitore, ottenendo un'espressione per l'intensità di neutroni attesa lungo le due possibili direzioni di fuoriuscita. In conformità alla notazione usata nel Capitolo 2 chiameremo O ed H queste due direzioni. Vogliamo trovare l'equivalente delle (2.8) e (3.4), rendendo corrette e rigorose quelle espressioni intuitive usate da Rauch e Namiki, in cui non è ben esplicitata la struttura della funzione d'onda e la dipendenza dalle coordinate.

La preparazione corrispondente ai neutroni incidenti sull'interferometro può essere considerata uno stato puro. In particolare, senza nessuna perdita di generalità, possiamo assumere si tratti di un pacchetto gaussiano, fortemente centrato attorno ad un assegnato valore del momento. A livello sperimentale si ha infatti un forte controllo sulla lunghezza d'onda dei neutroni e di conseguenza la localizzazione nello spazio delle coordinate risulta limitata (un tipico valore della dispersione del pacchetto gaussiano è $\sigma_p \approx 10^{-21} g \frac{cm}{s}$). Quanto detto equivale a considerare un operatore statistico $\hat{\rho}$ della forma fattorizzata:

$$\langle \mathbf{x}|\hat{\rho}|\mathbf{x}'\rangle = \psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}'), \tag{7.1}$$

con:

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d^3p\, a(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)} = \left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)^2 + \frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_o\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)\right)$$

$$a(\mathbf{p}) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma_p^2}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_o)^2\right) \quad . \tag{7.2}$$

Sulla prima lastra dell'interferometro il fascio di neutroni viene diviso in due rami, e questo equivale a considerare un operatore statistico, sempre corrispondente ad uno stato puro, della forma:

$$\hat{\rho} = (\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle)\,(\alpha^*\langle\psi_1| + \beta^*\langle\psi_2|) =$$

$$= |\alpha|^2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\beta|^2|\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \alpha\beta^*|\psi_1\rangle\langle\psi_2| + \alpha^*\beta|\psi_2\rangle\langle\psi_1|, \tag{7.3}$$

dove ψ_1 e ψ_2 indicano i contributi relativi ai due bracci dell'interferometro, lungo i quali il neutrone può transitare, corrispondenti a due gaussiane centrate in due diversi punti $\mathbf{x}_o$ e $\mathbf{y}_o$ che individuano le posizioni dei due bracci e con due diversi momenti, uguali in modulo ma con differente direzione, rispettivamente $\mathbf{p}_o$ e $\mathbf{k}_o$. Particolarmente rilevante è la presenza degli ultimi due termini misti, la cui scomparsa determinerebbe il passaggio da stato puro a miscela statistica con corrispondente perdita da parte dei due fasci della capacità di interferire. Il passaggio corrisponderebbe infatti alla rivelazione del neutrone in uno dei due bracci dell'interferometro.

Schema dell'interferometro.

I coefficienti sono scelti chiedendo che l'operatore statistico sia normalizzato. Calcolandone la traccia abbiamo:

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = \int d^3x \, \langle \mathbf{x}|\hat{\rho}|\mathbf{x}\rangle = \int d^3x \, \Big[|\alpha|^2|\psi_1(\mathbf{x})|^2 + |\beta|^2|\psi_2(\mathbf{x})|^2 + \alpha\beta^*\psi_1(\mathbf{x})\psi_2^*(\mathbf{x})\Big] + c.c. =$$

$$= |\alpha|^2 + |\beta|^2 + \alpha\beta^* \int d^3x \left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)^2 + \frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_o(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)\right)$$

$$\exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{y}_o)^2 - \frac{i}{\hbar}\mathbf{k}_o(\mathbf{x}-\mathbf{y}_o)\right) + c.c. = |\alpha|^2 + |\beta|^2 +$$

$$+\alpha\beta^* \exp\left[-\frac{1}{8\sigma_x^2}(\mathbf{x}_o-\mathbf{y}_o)^2 - \frac{1}{8\sigma_p^2}(\mathbf{p}_o-\mathbf{k}_o)^2 + \frac{i}{2\hbar}(\mathbf{p}_o+\mathbf{k}_o)\cdot(\mathbf{x}_o-\mathbf{y}_o)\right] + c.c. \simeq$$

$$\simeq |\alpha|^2 + |\beta|^2 \quad . \tag{7.4}$$

L'ultimo passaggio è stato effettuato tenendo conto della distanza macroscopica fra i due bracci dell'interferometro, che rende l'esponenziale trascurabile rispetto agli altri contributi. Tenendo presente la struttura perfettamente simmetrica dell'interferometro poniamo $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$. Sulla seconda lastra dell'interferometro ogni fascio si divide ancora in due, i raggi fuoriuscenti verso l'esterno sono persi e gli altri due si ricompongono sull'ultima lastra, dividendosi poi ulteriormente, per venire rivelati lungo l'una o l'altra direzione (O oppure H), come indicato in figura.

Secondo la teoria della diffrazione dinamica i due contributi al raggio fuoriuscente in direzione O sono perfettamente in fase fra loro, mentre i due contributi al raggio fuoriuscente nell'altra direzione differiscono per un fattore di fase di π ovvero per un segno meno (si confrontino le (2.5) e (2.8)). Nel caso in cui nell'interferometro sia presente un materiale che induce una variazione di fase lungo uno dei due bracci, che come visto nel Capitolo 2 equivale a una traslazione di entità $\mathbf{\Delta}$ nello spazio delle coordinate, si ha per il fascio in uscita:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{8}\left(|\psi_1^{\mathrm{O}}\rangle + |\psi_1^{\mathrm{H}}\rangle + |\psi_2^{\mathrm{O}}\rangle + |\psi_2^{\mathrm{H}}\rangle\right)\left(\langle\psi_1^{\mathrm{O}}| + \langle\psi_1^{\mathrm{H}}| + \langle\psi_2^{\mathrm{O}}| + \langle\psi_2^{\mathrm{H}}|\right), \tag{7.5}$$

ove:

$$\psi_2^{\mathrm{O}}(\mathbf{x}) = \psi_1^{\mathrm{O}}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}) \qquad\qquad \psi_2^{\mathrm{H}}(\mathbf{x}) = -\psi_1^{\mathrm{H}}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}) \quad . \tag{7.6}$$

Il fattore $1/8$ tiene conto della simmetria dell'interferometro e della perdita sulla seconda lastra. Tenendo conto della (7.6) la (7.5) può essere riscritta nella forma seguente:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{8}\left(|\psi_{\mathrm{O}}\rangle + |\psi_{\mathrm{H}}\rangle\right)\left(\langle\psi_{\mathrm{O}}| + \langle\psi_{\mathrm{H}}|\right), \tag{7.7}$$

ove abbiamo posto:

$$\psi_{\mathrm{O}}(\mathbf{x}) = \psi_1^{\mathrm{O}}(\mathbf{x}) + \psi_1^{\mathrm{O}}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}), \tag{7.8}$$

e analogamente:

$$\psi_{\mathrm{H}}(\mathbf{x}) = \psi_1^{\mathrm{H}}(\mathbf{x}) - \psi_1^{\mathrm{H}}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}) \quad . \tag{7.9}$$

La rivelazione dei neutroni in uscita determina la scomparsa dei termini non diagonali dell'operatore statistico, rendendo così i due raggi incapaci di ulteriore interferenza. Si passa quindi dall'operatore statistico $\hat{\rho}$ della (7.7), descrivente uno stato puro, alla miscela statistica $\hat{\varrho}$, data da due operatore positivi, che chiameremo rispettivamente $\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}$ e $\hat{\varrho}_{\mathrm{H}}$, associati alle due sottocollezioni di neutroni rivelati lungo il raggio O ed H rispettivamente:

$$\hat{\rho} \longrightarrow \hat{\varrho} = \hat{\varrho}_{\mathrm{O}} + \hat{\varrho}_{\mathrm{H}} = \frac{1}{8}|\psi_{\mathrm{O}}\rangle\langle\psi_{\mathrm{O}}| + \frac{1}{8}|\psi_{\mathrm{H}}\rangle\langle\psi_{\mathrm{H}}| \quad . \tag{7.10}$$

Poiché le misure sono state effettuate abitualmente lungo la direzione O ci occupiamo in dettaglio solo di $\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}$. Lungo l'altra direzione si osserva la figura d'interferenza complementare e considerare uno dei due rami è quindi sufficiente. In particolare scriviamo in dettaglio gli elementi di matrice diagonali dell'operatore $\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}$ nella rappresentazione dei momenti e delle coordinate:

$$\langle \mathbf{x}|\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}|\mathbf{x}\rangle =$$

$$\frac{1}{8}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{\frac{3}{2}}\left| e^{\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)^2+\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_o\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)\right)} + e^{\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}-\mathbf{x}_o)^2+\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_o\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}-\mathbf{x}_o)\right)}\right|^2$$

$$= \frac{1}{8}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{\frac{3}{2}}\left[e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)^2} + e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}-\mathbf{x}_o)^2} + \right.$$

$$\left. +2\cos\left(\frac{\mathbf{p}_o\cdot\mathbf{\Delta}}{\hbar}\right) e^{-\frac{|\Delta|^2\sigma_p^2}{2\hbar^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}\left(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{\Delta}}{2}-\mathbf{x}_o\right)^2}\right], \tag{7.11}$$

$$\langle \mathbf{p}|\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_p^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_p^2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_o)^2}\left(1+\cos\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{\Delta}}{\hbar}\right)\right) \quad . \tag{7.12}$$

La figura d'interferenza nello spazio delle coordinate è data in generale dall'elemento di matrice diagonale dell'operatore statistico (o in questo caso della sottocollezione) nella rappresentazione delle coordinate. La *figura d'interferenza* misurata in questi esperimenti di interferometria di neutroni si ottiene però in modo diverso. Le misurazioni effettuate permettono solo di dire da quale delle due direzioni sia fuoriuscito il neutrone, non si ha quindi, come in un esperimento ottico di diffrazione, una distribuzione di intensità che vari, ad esempio con andamento sinusoidale, in funzione della posizione del rivelatore, ovvero della posizione dello *schermo*. L'andamento oscillatorio mostrato nei grafici dei lavori di Rauch nasce dalla dipendenza dal parametro che determina lo sfasamento, ovvero da $\mathbf{\Delta}$. La quantità misurata è semplicemente il numero di neutroni fuoriuscenti nelle due diverse direzioni in funzione di $\mathbf{\Delta}$, che risulta fornito dalla traccia dell'operatore positivo descrivente la sottocollezione statistica associata alla direzione osservata, ovvero dalla seguente:

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\varrho}_{\mathrm{O}} = \frac{1}{4}\left(1+e^{-\frac{|\Delta|^2\sigma_p^2}{2\hbar^2}}\cos\left(\frac{\mathbf{p}_o\cdot\mathbf{\Delta}}{\hbar}\right)\right) \quad . \tag{7.13}$$

Troviamo così in modo molto semplice un risultato che era inizialmente sfuggito nell'analisi e nella presentazione di questi esperimenti: la parte oscillante della figura di interferenza è smorzata da un fattore esponenziale che dipende dall'entità dello sfasamento e dalla incertezza sul valore dell'impulso attorno a cui la gaussiana è centrata nello spazio dei momenti (si confronti la (7.12)). Questo risultato è stato evidenziato solo più tardi negli ultimi articoli del gruppo di Rauch [13], in cui si concentra l'attenzione sulla scomparsa della figura di interferenza dovuta al contributo di questo fattore esponenziale.

In questi passaggi abbiamo trascurato il lasso di tempo, molto breve ma finito, che il neutrone impiega per attraversare l'interferometro. Ritenendo, come sembra ragionevole supporre, che nel passaggio da una lastra all'altra dell'interferometro il neutrone propaghi liberamente, si tratta solo di sostituire a $\hat{\varrho}$ il suo evoluto temporale:

$$\hat{\varrho}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_o t}\hat{\varrho}e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}_o t} = \exp\bigl(\mathcal{L}_o(t)\bigr)\hat{\varrho}, \tag{7.14}$$

ove $\hat{H}_o$ è l'Hamiltoniana contenente solo il contributo cinetico. L'interazione con il cristallo è già considerata nell'effetto di deviazione del raggio e grazie alla particolare struttura dell'interferometro che favorisce la coerenza fra i due rami non influenza ulteriormente l'operatore statistico. Il tenere conto di questo tempo finito di attraversamento dell'apparecchio e del conseguente sparpagliamento della funzione d'onda nello spazio delle coordinate modifica gli elementi diagonali dell'operatore statistico sia nella descrizione delle coordinate che nella descrizione dei momenti, le (7.11) ed (7.12) diventano infatti rispettivamente:

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{x}|\hat{\varrho}_O(t)|\mathbf{x}\rangle = \frac{1}{8}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2|\alpha|^2}\right)^{\frac{3}{2}}\Biggl[& e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2|\alpha|^2}\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o-\frac{\mathbf{p}_o}{m}t\right)^2} + e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2|\alpha|^2}\left(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}-\mathbf{x}_o-\frac{\mathbf{p}_o}{m}t\right)^2} + \\ & + 2\exp\left(-\frac{|\mathbf{\Delta}|^2\sigma_p^2}{2\hbar^2|\alpha|^2}\right)\exp\left(-\frac{1}{2\sigma_x^2|\alpha|^2}\left(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{\Delta}}{2}-\mathbf{x}_o-\frac{\mathbf{p}_o}{m}t\right)^2\right)\times \\ & \times\cos\left\{\frac{\mathbf{p}_o\cdot\mathbf{\Delta}}{\hbar}+\frac{\hbar t}{8m\sigma_x^2|\alpha|^2}\left(|\mathbf{\Delta}|^2+2\mathbf{\Delta}\cdot\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o-\frac{\mathbf{p}_o}{m}t\right)^2\right)\right\}\Biggr],\end{aligned} \tag{7.15}$$

dove $\alpha = \left(1 + i\frac{\hbar t}{2m\sigma_x^2}\right)$, e:

$$\langle \mathbf{p}|\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}(t)|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_p^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_p^2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_o)^2}\left(1+\cos\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{\Delta}}{\hbar}\right)\right) \quad . \tag{7.16}$$

Non subisce però modifiche la traccia dell'operatore che descrive la sottocollezione di neutroni fuoriuscenti nella direzione O:

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}(t) = \frac{1}{4}\left(1 + e^{-\frac{|\mathbf{\Delta}|^2\sigma_p^2}{2\hbar^2}}\cos\left(\frac{\mathbf{p}_o\cdot\vec{\Delta}}{\hbar}\right)\right), \tag{7.17}$$

e di conseguenza rimane immutata la figura di interferenza ed il risultato sperimentale, a prescindere dal tempo impiegato dal neutrone ad attraversare l'interferometro. Questa affermazione potrebbe non essere più vera qualora l'effetto dell'assorbitore fosse molto forte e la durata dell'interazione fra neutrone ed assorbitore modificasse l'operatore statistico associato al neutrone non semplicemente per un fattore di assorbimento costante.

7.2 Descrizione dell'esperimento tramite la funzione di Wigner

Vogliamo ora trascrivere i risultati riportati nel paragrafo precedente nel formalismo della funzione di Wigner, che permette di lavorare contemporaneamente con coordinate e momenti. Questo passaggio è motivato anzitutto dai risultati ottenuti nel Capitolo 6, ove si adotta la funzione di Wigner per descrivere l'interazione fra neutrone e assorbitore. In quest'ottica è naturale usare lo stesso formalismo per descrivere i risultati dell'esperimento in presenza della sola sostanza che induce variazione di fase. Inoltre negli ultimi anni si è risvegliato da parte di molti autori un certo interesse per l'uso della funzione di Wigner nella descrizione di fenomeni di interferenza tipicamente quantistici; lo stesso Rauch si sta accingendo a scrivere un articolo sull'argomento (comunicazione privata). L'interesse nasce dalla possibilità di tenere unitamente in considerazione posizioni e momenti e dare quindi una descrizione della figura d'interferenza nello spazio delle fasi. Per chiarire questa affermazione si prenda in considerazione la (7.12) e si osservi la dipendenza da $\mathbf{p}$ dell'elemento di matrice tramite la funzione coseno. Poiché si è in grado di misurare e selezionare sperimentalmente i momenti dei neutroni che attraversano l'interferometro, se $\mathbf{\Delta}$ è fissata si può osservare l'oscillazione del valore di questo elemento di matrice dato dal variare di $\mathbf{p}$, ottenendo quindi una *figura di interferenza* nello spazio dei momenti [13].

Come prima cosa osserviamo che dall'operatore statistico corrispondente ad uno stato puro dato dal seguente pacchetto gaussiano:

$$\psi(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)^2 + \frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_o\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)\right) \tag{7.18}$$

si ottiene la funzione di Wigner:

$$f_{\mathrm{W}}(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^3 \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)^2 - \frac{1}{2\sigma_p^2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_o)^2\right] \quad . \tag{7.19}$$

Da $\psi(\mathbf{x},t)$ ottenuta tramite evoluzione libera da $\psi(\mathbf{x})$ si ottiene invece semplicemente la seguente:

$$f_{\mathrm{W}}(\mathbf{x},\mathbf{p},t) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^3 \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_x^2}\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o-\frac{\mathbf{p}}{m}t\right)^2 - \frac{1}{2\sigma_p^2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_o)^2\right] \quad . \tag{7.20}$$

Sfruttando questi risultati possiamo ottenere la funzione di Wigner corrispondente ad un operatore statistico della forma (7.3); partendo infatti da:

$$\begin{aligned} f_{\mathrm{W}}(\mathbf{x},\mathbf{p}) &= \int \frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}} \frac{1}{2}\langle \mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2}\,|\big(|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle\big)\big(\langle\psi_1|+\langle\psi_2|\big)|\,\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2}\rangle = \\ &\int \frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}} \frac{1}{2}\Big[\psi_1(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2})\psi_1^*(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2}) + \psi_2(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2})\psi_2^*(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2}) \\ &\quad +\psi_1(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2})\psi_2^*(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2}) + \psi_2(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2})\psi_1^*(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2})\Big], \end{aligned} \tag{7.21}$$

tramite il calcolo di alcuni integrali gaussiani si ottiene l'espressione finale:

$$f_{\mathrm{W}}(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^3 \Bigg\{\exp\left[-\frac{1}{2\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)^2 - \frac{1}{2\sigma_p^2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_o)^2\right] +$$

$$+\exp\left[-\frac{1}{2\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{y}_o)^2-\frac{1}{2\sigma_p^2}(\mathbf{p}-\mathbf{k}_o)^2\right]$$

$$+\exp\left[-\frac{1}{2\sigma_x^2}\left(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{x}_o+\mathbf{y}_o}{2}\right)^2-\frac{1}{2\sigma_p^2}\left(\mathbf{p}-\frac{\mathbf{p}_o+\mathbf{k}_o}{2}\right)^2\right]\times$$

$$\times 2\cos\left(\frac{1}{\hbar}\left[\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}_o-\mathbf{y}_o)-\left(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{x}_o+\mathbf{y}_o}{2}\right)\cdot(\mathbf{p}_o-\mathbf{k}_o)\right]\right)\Bigg\} \quad . \tag{7.22}$$

In questa espressione della funzione di Wigner è particolarmente importante il termine che ha come fattore un coseno. Poiché al variare dell'argomento il valore del coseno oscilla fra valori positivi e negativi questo termine può dare un contributo negativo alla funzione di Wigner. Se $\mathbf{x}_o$ e $\mathbf{y}_o$ sono discosti fra loro, come accade ad esempio nel nostro caso in cui sono legati alla distanza macroscopica fra i due rami dell'interferometro, ci sono dei valori di $\mathbf{x}$ e $\mathbf{p}$ per i quali la funzione di Wigner risulta negativa. Il fatto che in certi punti questa funzione di distribuzione sia negativa, patologia cui si era accennato introducendo la funzione di Wigner ed in particolare sotto la (6.34), è proprio collegato alla descrizione di fenomeni di interferometria che sono prettamente quantistici e non trovano il corrispondente in fisica classica. Se si cancellano i termini di interferenza o se si portano a coincidere i punti $\mathbf{x}_o$ e $\mathbf{y}_o$, e quindi i momenti $\mathbf{p}_o$ e $\mathbf{k}_o$, il contributo negativo scompare e otteniamo per f_{W} una vera e propria funzione di distribuzione ovunque positiva.

Valutiamo ora la funzione di Wigner associata all'operatore positivo descrivente la sottocollezione di neutroni fuoriuscenti nella direzione O:

$$f_{\mathrm{W}}^{o}(\mathbf{x},\mathbf{p}) =$$

$$\int\frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi\hbar)^3}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}}\langle\mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2}|\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}(t)|\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2}\rangle=\int\frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi\hbar)^3}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}}\frac{1}{8}\langle\mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2}|\psi_{\mathrm{O}}\rangle\langle\psi_{\mathrm{O}}|\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2}\rangle=$$

$$\int\frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi\hbar)^3}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}}\frac{1}{8}\left(\psi_1^{\mathrm{O}}(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2})+\psi_1^{\mathrm{O}}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}-\frac{\mathbf{y}}{2})\right)$$

$$\left(\psi_1^{\mathrm{O}*}(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2})+\psi_1^{\mathrm{O}*}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}+\frac{\mathbf{y}}{2})\right)=\int\frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi\hbar)^3}\,e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}}\frac{1}{8}\left(\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\left[\exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2}-\mathbf{x}_o)^2+\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_o\cdot(\mathbf{x}-\frac{\mathbf{y}}{2}-\mathbf{x}_o)\right)+\right.$$

$$\left.+\exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}-\frac{\mathbf{y}}{2}-\mathbf{x}_o)^2+\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_o\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}-\frac{\mathbf{y}}{2}-\mathbf{x}_o)\right)\right]$$

$$\left[\exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2}-\mathbf{x}_o)^2-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_o\cdot(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{y}}{2}-\mathbf{x}_o)\right)+\right.$$

$$\left.+\exp\left(-\frac{1}{4\sigma_x^2}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}+\frac{\mathbf{y}}{2}-\mathbf{x}_o)^2-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_o\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}+\frac{\mathbf{y}}{2}-\mathbf{x}_o)\right)\right]$$

$$=\frac{1}{8}\left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^3 e^{-\frac{1}{2\sigma_p^2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_o)^2}\left\{e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o)^2}+\right.$$

$$\left.e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}-\mathbf{x}_o)^2}+2\cos\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{\Delta}}{\hbar}\right)e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}\left(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{\Delta}}{2}-\mathbf{x}_o\right)^2}\right\} \quad . \tag{7.23}$$

Da questa ricordando le (6.41), (6.42) e (6.40) possiamo riottenere i risultati dati dalle (7.11), (7.12) e (7.13):

$$\int d^3x\, f^o_{\mathrm{W}}(\mathbf{x},\mathbf{p})=\langle\mathbf{p}|\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}|\mathbf{p}\rangle \tag{7.24}$$

$$\int d^3p\, f^o_{\mathrm{W}}(\mathbf{x},\mathbf{p})=\langle\mathbf{x}|\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}|\mathbf{x}\rangle \tag{7.25}$$

$$\int d^3x\, d^3p\, f^o_{\mathrm{W}}(\mathbf{x},\mathbf{p})=\mathrm{Tr}\,\hat{\varrho}_{\mathrm{O}}=\frac{1}{4}\left(1+e^{-\frac{|\mathbf{\Delta}|^2\sigma_p^2}{2\hbar^2}}\cos\left(\frac{\mathbf{p}_o\cdot\vec{\Delta}}{\hbar}\right)\right) \tag{7.26}$$.

Anche in questo caso è possibile prendere in considerazione l'evoluzione libera all'interno dell'interferometro, ottenendo in sostituzione della (7.23) la seguente:

$$f^o_{\mathrm{W}}(\mathbf{x},\mathbf{p},t)=\frac{1}{8}\left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^3 e^{-\frac{1}{2\sigma_p^2}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_o)^2}\left\{e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_o-\frac{\mathbf{p}}{m}t\right)^2}+\right.$$

$$\left.e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}\left(\mathbf{x}+\mathbf{\Delta}-\mathbf{x}_o-\frac{\mathbf{p}}{m}t\right)^2}+2\cos\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{\Delta}}{\hbar}\right)e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}\left(\mathbf{x}+\frac{\mathbf{\Delta}}{2}-\mathbf{x}_o-\frac{\mathbf{p}}{m}t\right)^2}\right\}, \tag{7.27}$$

che come si era anticipato fornisce ancora lo stesso risultato (7.26) per la figura di interferenza, ottenibile integrando f^o_{W} rispetto alle variabili $\mathbf{x}$ e $\mathbf{p}$.

7.3 Interpretazione del termine incoerente

Come abbiamo visto i recenti esperimenti in cui si prepara ripetutamente una singola particella, che viene poi osservata per tempi lunghi o sottoposta ad una evoluzione temporale che ammette più *esiti*, sono ben descrivibili tramite l'associazione particella-operatore statistico, mentre l'usuale associazione particella-funzione d'onda può diventare problematica; quest'ultima è sempre una forte idealizzazione, spesso ragionevole, soprattutto quando si ha il massimo controllo sulla preparazione sperimentale e si restringono le possibilità per la dinamica, ovvero quando si cerca di garantire la *coerenza*. Il termine coerenza è mutuato dall'ottica ed il suo significato per esperimenti cui partecipa una sola particella per volta andrebbe meglio chiarito. Ad aumentare la confusione contribuisce l'opinione ricorrente che alla particella in ogni singolo esperimento (single-run) corrisponda una funzione d'onda, mentre l'operatore statistico descriva solo una moltitudine di particelle. La relazione corretta è piuttosto la seguente: alla preparazione e alla dinamica di una singola particella in una realizzazione sperimentale corrisponde un operatore statistico $\hat{\varrho}_t$ che, sotto condizioni di forte coerenza, può essere sostituito da una funzione d'onda ψ:

$$\hat{\varrho}_t = |\psi\rangle\langle\psi|$$

ovvero, prendendone l'elemento di matrice:

$$\langle \mathbf{x}|\hat{\varrho}_t|\mathbf{x}'\rangle = \psi(\mathbf{x})\psi^*(\mathbf{x}') \qquad (7.28) \quad .$$

Più in generale:

$$\hat{\varrho}_t = |\psi\rangle\langle\psi| + \hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})}, \qquad (7.29)$$

ove il nuovo contributo (n.c.≡non coerente)

$$\langle \mathbf{x}|\hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})}|\mathbf{x}'\rangle = w(\mathbf{x},\mathbf{x}')$$

non è più scrivibile in forma fattorizzata come la (7.28). Il fatto che $\hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})}$ possa essere praticamente trascurato può venire assunto come definizione di coerenza. Nel nostro caso il contributo coerente può essere identificato con l'operatore statistico dato dalla (7.3), mentre $\hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})}$ è un contributo che si forma solo in seguito alla interazione con l'assorbitore. Per quello che riguarda l'evoluzione temporale di questo nuovo contributo si può porre:

$$d\hat{\varrho}_t = d\hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\varrho}_t]dt \tag{7.30}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + \hat{V} \qquad \mathrm{Im}V(\vec{x}) \leq 0,$$

dove tanto più $|\mathrm{Im}V(\vec{x})|$ è grande, tanto più velocemente diminuisce il contributo di $|\psi\rangle\langle\psi|$ a favore di quello di $\hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})}$. Il termine di potenziale può essere identificato con il potenziale macroscopico usato da Sears (si confrontino le (2.1) e (2.2)). Il contributo $d\hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})}$, grazie all'analisi svolta in questo lavoro di tesi (si confronti il paragrafo 6.3), sembra invece poter essere messo direttamente in relazione con la descrizione alla Boltzmann del trasporto di neutroni in un mezzo materiale, responsabile per la perdita di coerenza. Se consideriamo l'equazione seguente per la funzione di distribuzione di Boltzmann:

$$\frac{\partial f}{\partial t}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = -\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \int d^3p_1\, G_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{p}_1) f(\mathbf{x}, \mathbf{p}_1) - G_2(\mathbf{x}, \mathbf{p}) f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t),$$

abbiamo che $d\hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})}$ è strettamente legato a $G_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{p}_1)$. Possiamo definire una funzione di Wigner corrispondente a $\hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})}$:

$$\rho^{(\mathrm{n.c.})}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \int \frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}} \langle \mathbf{q} - \frac{\mathbf{y}}{2} | \hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})} | \mathbf{q} + \frac{\mathbf{y}}{2} \rangle, \tag{7.31}$$

per la quale sembra ragionevole supporre una variazione su tempi infinitesimi della forma:

$$d\rho^{(\mathrm{n.c.})}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = dt \int d^3p_1\, G_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{p}_1)\, \rho(\mathbf{x}, \mathbf{p}_1) \quad . \tag{7.32}$$

Per vedere l'effetto di questa interazione sull'operatore statistico descrivente il sistema possiamo invertire la (7.31) ottenendo:

$$\langle \mathbf{x} | d\hat{\varrho}_t^{(\mathrm{n.c.})} | \mathbf{y} \rangle = \int d^3\vec{p}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\, d\rho_t^{(\mathrm{n.c.})}\left(\frac{\mathbf{x}+\mathbf{y}}{2}, \mathbf{p}\right),$$

quantità da inserire nella espressione finale per l'operatore statistico da cui ottenere le previsioni per la figura d'interferenza. Una previsione quantitativa del disturbo, ovvero dell'importanza del contributo non coerente, può venire da una stima fenomenologica per il nucleo integrale $G_1(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{p}_1)$. È notevole il fatto che il formalismo connetta l'evoluzione temporale coerente alla Schrödinger con un'evoluzione non coerente che, nella descrizione particellare che viene messa a disposizione dalla funzione di Wigner, diventa particolarmente intuitiva.

APPENDICE A

Vogliamo fornire una stima per l'integrale:

$$I(\tau) \equiv \int_0^{+\infty} dx \, \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(x-a)\tau} - 1}{x-a} \, \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(x-b)\tau} - 1}{x-b} \, g(x), \tag{A.1}$$

che può essere riscritto:

$$I(\tau) = 4e^{\frac{i}{2\hbar}(b-a)\tau} \int_0^{+\infty} dx \, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \frac{\sin(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-b} \, g(x) \quad .$$

La stima viene fatta sotto le ipotesi seguenti:

$$\frac{\tau\varDelta}{2\hbar} \gg 1 \qquad |a-b|\frac{\tau}{\hbar} \ll 1 \qquad |a-b| \leq \delta \quad a, b \in \mathbb{R} \tag{A.2}$$

ove $\varDelta \gg \delta$ ed una stima per $\varDelta$ verrà data più tardi in relazione alle caratteristiche della funzione $g(x)$ alla quale chiediamo di essere ovunque limitata e lentamente variabile (poniamo ad esempio $|g(x)| \leq g_o \quad \forall x \in \mathbb{R}$). Estendiamo l'insieme di integrazione a tutto l'asse reale, poiché l'integrale su $(-\infty, 0)$ può essere maggiorato da una costante moltiplicata per g_o, ed è quindi trascurabile rispetto al termine dominante, che risulterà essere lineare in τ, purché a e b siano discosti dallo zero. Nelle ipotesi (A.2) l'esponenziale può essere approssimato con 1 e possiamo pertanto scrivere:

$$\begin{aligned} I(\tau) &= 4\vec{r}dx \, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \frac{\sin(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-b} \, g(x) = \\ &= 4\vec{r}dx \, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \frac{\sin(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-b} \, g\left(\frac{a+b}{2}\right) + \\ +4\vec{r}dx \, &\frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \frac{\sin(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-b} \left(\frac{g(x) - g(\frac{a+b}{2})}{x - \frac{a+b}{2}}\right)\left(x - \frac{a+b}{2}\right) \quad . \end{aligned}$$

Ponendo ora

$$\tilde{g}(x) = \frac{g(x) - g\left(\frac{a+b}{2}\right)}{x - \frac{a+b}{2}},$$

si ha la seguente identità:

$$I(\tau) = 4\Bigg\{\vec{r}dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \frac{\sin(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-b}\, g\left(\frac{a+b}{2}\right) \; +$$

$$+\; \frac{1}{2}\vec{r}dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\, \tilde{g}(x) \; +$$

$$+\frac{1}{2}\vec{r}dx\, \frac{\sin(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-b}\, \sin\Big[(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\, \tilde{g}(x)\Bigg\} \quad .$$

Spezziamo ora l'integrale in una serie di termini, distinguendo i contributi provenienti dalle regioni attorno ai due zeri del denominatore, che saranno i più rilevanti. Si ha dunque:

$$I(\tau) = 4\,[A(a,b) + B(a,b) + B(b,a) +$$

$$+C(a,b) + C(b,a) + D(a,b) + D(b,a) + E(a,b) + E(b,a)]\,, \tag{A.3}$$

ove sono state fatte le seguenti assegnazioni:

$$A(a,b) = \vec{r}dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \frac{\sin(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-b}\, g(\frac{a+b}{2}),$$

$$B(a,b) = \frac{1}{2}\Bigg[\int_{-\infty}^{a-\Delta-\delta} dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\, \tilde{g}(x) \; +$$

$$+\int_{a+\Delta+\delta}^{+\infty} dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\, \tilde{g}(x)\Bigg],$$

$$C(a,b) = \frac{1}{2}\vec{r}dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\, \tilde{g}(a),$$

$$D(a,b) = -\frac{1}{2}\Bigg[\int_{-\infty}^{a-\Delta-\delta} dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\, \tilde{g}(a) \; +$$

$$+\int_{a+\Delta+\delta}^{+\infty} dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\, \tilde{g}(a)\Bigg],$$

$$E(a,b) = \frac{1}{2}\int_{a-\Delta-\delta}^{a+\Delta+\delta} dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\, \big(\tilde{g}(x) - \tilde{g}(a)\big) \quad .$$

Valutiamo ora singolarmente i vari integrali ricorrendo al teorema dei residui. Ricorrendo alla supposta lenta variabilità di $g(x)$ poniamo $g(\frac{a+b}{2}) \simeq \frac{g(a)+g(b)}{2}$ ed abbiamo dunque:

$$A(a,b) \simeq \frac{\big(g(a)+g(b)\big)}{2} \vec{r}dx \, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \frac{\sin(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-b} =$$

$$= -\frac{1}{8}\big(g(a)+g(b)\big)\vec{r}dx \, \frac{1}{(x-a)(x-b)} \, \Big[e^{i[(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}+(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}]} +$$

$$e^{-i[(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}+(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}]} - e^{i(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}} - e^{i(b-a)\frac{\tau}{2\hbar}}\Big] \quad .$$

Procediamo ora a spostare il cammino di integrazione poco sopra l'asse reale, calcolando quindi l'integrale lungo la retta $(-\infty+i\epsilon, +\infty+i\epsilon)$, per eseguire poi il limite per ϵ tendente a zero. Pensando di chiudere il circuito nel semipiano superiore ove non vi sono poli il primo contributo è nullo per il lemma di Jordan, poiché l'integrando si comporta all'infinito come $\frac{1}{x^2}$. Il secondo contributo si valuta sempre tramite il lemma di Jordan, chiudendo questa volta il circuito nel semipiano inferiore:

$$-\frac{1}{8}\big(g(a)+g(b)\big)\vec{r}dx \, \frac{1}{(x-a)(x-b)} \, e^{-i[(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}+(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}]} =$$

$$= -\frac{1}{8}\big(g(a)+g(b)\big) \lim_{\epsilon\to 0} \int_{-\infty+i\epsilon}^{+\infty+i\epsilon} dx \, \frac{1}{(x-a)(x-b)} \, e^{-i[(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}+(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}]} =$$

$$= i\frac{\pi}{4}\big(g(a)+g(b)\big) \left[\frac{1}{a-b}e^{-i(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}} + \frac{1}{b-a}e^{-i(b-a)\frac{\tau}{2\hbar}}\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\big(g(a)+g(b)\big)\frac{\pi}{b-a}\sin(b-a)\frac{\tau}{2\hbar} \quad .$$

I due contributi restanti sono della forma:

$$\text{cost} \times \int_{-\infty+i\epsilon}^{+\infty+i\epsilon} dx \, \frac{1}{(x-a)(x-b)},$$

e sono quindi nulli poiché, pensando di chiudere il circuito nel semipiano superiore, equivalenti all'integrale lungo una circonferenza il cui raggio è pensato tendere all'infinito. L'altro contributo che ci proponiamo di valutare è quello dato da $C(a,b)$. Analogamente a prima:

$$C(a,b) = \frac{1}{2}\vec{r}dx \, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big] \, \tilde{g}(a) =$$

$$= \frac{1}{2} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\infty + i\epsilon}^{+\infty + i\epsilon} dx \, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big] \, \tilde{g}(a) =$$

$$= -\frac{1}{8} \lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\infty + i\epsilon}^{+\infty + i\epsilon} \frac{dx}{(x-a)} \Big[e^{i[(x-a)\frac{\tau}{2\hbar} + (x-b)\frac{\tau}{2\hbar}]} + e^{-i[(x-a)\frac{\tau}{2\hbar} + (x-b)\frac{\tau}{2\hbar}]} +$$

$$- e^{i(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}} - e^{i(b-a)\frac{\tau}{2\hbar}} \Big] \, \tilde{g}(a) \quad .$$

Per il calcolo di questo integrale procediamo come nel caso precedente, con la differenza che:

$$\int_{-\infty + i\epsilon}^{+\infty + i\epsilon} \frac{dx}{x-a} = -i\pi,$$

e perciò i termini in cui l'esponenziale non dipende dalla variabile di integrazione non danno più

contributo nullo. Si ha pertanto:

$$C(a,b) = \tilde{g}(a) i \frac{\pi}{4} \left[e^{-i(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}} - \frac{1}{2} \left(e^{i(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}} + e^{i(b-a)\frac{\tau}{2\hbar}} \right) \right] =$$

$$= \tilde{g}(a) \frac{\pi}{4} \sin\Big[(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big] \quad .$$

Il contributo $D(a,b)$ lo riscriviamo nella seguente maniera:

$$D(a,b) = \frac{1}{2} \lim_{L \to +\infty} \int_{-L+a}^{a-\Delta-\delta} dx \, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big] \, \tilde{g}(a) +$$

$$+ \frac{1}{2} \lim_{L \to +\infty} \int_{a+\Delta+\delta}^{L+a} dx \, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big] \, \tilde{g}(a) =$$

$$= \frac{1}{2} \int_{C_1 \cup C_2} dx \, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a} \, \sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big] \, \tilde{g}(a) \quad .$$

come si vede dalla figura. Ancora procediamo alla usuale fattorizzazione:

$$D(a,b) = \frac{1}{2} \int_{C_1 \cup C_2} \frac{dx}{x-a} \Big[e^{i[(x-a)\frac{\tau}{2\hbar} + (x-b)\frac{\tau}{2\hbar}]} + e^{-i[(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}]} +$$

$$- e^{i(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}} - e^{i(b-a)\frac{\tau}{2\hbar}} \Big] \, \tilde{g}(a) \quad .$$

I contributi sui due cerchi dati dai termini in cui l'esponenziale non dipende dalla variabile di integrazione si compensano fra loro, poiché l'integrale viene a dipendere solo dalla parte angolare e non dal raggio del cerchio. Osserviamo ora che i due semicerchi possono essere tracciati equivalentemente sopra o sotto l'asse reale e distingueremo dunque come in figura i due casi, scegliendo di volta in volta il circuito di integrazione più favorevole (li indicheremo con $C_1^{\pm}$ e $C_2^{\pm}$).

Pur di chiudere nel semipiano opportuno i due contributi lungo la circonferenza esterna si annullano nel limite di grandi L. Restano i seguenti:

$$\frac{1}{2}\tilde{g}(a)\int_{C_1^+} dx\,\frac{e^{i(x-a)\frac{\tau}{\hbar}}}{x-a}\left[e^{i\frac{\tau}{\hbar}}e^{-i(a+b)\frac{\tau}{2\hbar}}\right]+\frac{1}{2}\tilde{g}(a)\int_{C_1^-} dx\,\frac{e^{-i(x-a)\frac{\tau}{\hbar}}}{x-a}\left[e^{-i\frac{\tau}{\hbar}}e^{i(a+b)\frac{\tau}{2\hbar}}\right] \quad .$$

Consideriamo ora il primo termine trascurando il coefficiente moltiplicativo che non influenza il valore dell'integrale. Operando un opportuno cambio di variabili $(x-a) = (\varDelta+\delta)e^{i\theta}$ e ricordando che $\varDelta \gg \delta$ abbiamo:

$$\int_{C_1^+} dx\,\frac{e^{i(x-a)\frac{\tau}{\hbar}}}{x-a} \simeq i\int_0^{\pi} d\theta\, e^{i\frac{\tau\varDelta}{\hbar}e^{i\theta}},$$

maggiorabile in modulo da:

$$\int_0^{\pi} d\theta\, e^{-\frac{\tau\varDelta}{\hbar}\sin\theta}$$

che è trascurabile nella ipotesi da noi formulata all'inizio $\frac{\tau\varDelta}{\hbar} \gg 1$. Il contributo dell'integrale, nelle nostre approssimazioni, risulta dunque essere nullo. Restano ora da valutare i due termini $B(a,b)$ ed $E(a,b)$, per i quali forniremo una maggiorazione che permetterà di confrontarli con gli altri contributi non nulli. Supponiamo per fissare le idee che si abbia $b > a$ e scriviamo sotto questa ipotesi:

$$|B(a,b)| = \frac{1}{2}\left|\left[\int_{-\infty}^{a-\Delta-\delta} dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \sin\left[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\right] \tilde{g}(x) + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \int_{a+\Delta+\delta}^{+\infty} dx\, \frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\, \sin\left[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\right] \tilde{g}(x)\right]\right| \leq$$

$$\leq \left[\int_{-\infty}^{a-\Delta-\delta} dx\, \frac{g_o}{(x-a)(x-b)} + \int_{a+\Delta+\delta}^{+\infty} dx\, \frac{g_o}{(x-a)(x-b)}\right] \quad .$$

ove si è sfruttato il fatto che il denominatore sotto le ipotesi fatte ($|b-a| \leq \delta$ e $\Delta \gg \delta$) è comunque positivo. Il passaggio iniziale è stato eseguito nell'ipotesi di limitatezza di $g(x)$ per cui si può scrivere:

$$|\tilde{g}(x)| = \left|\frac{g(x) - g(\frac{a+b}{2})}{x - \frac{a+b}{2}}\right| \leq \frac{2g_o}{|x-b|} \quad .$$

Tenendo ulteriormente conto di queste approssimazioni e in forza della relazione $b > a$ nelle regioni di integrazione specificate si può allora eseguire l'ulteriore maggiorazione:

$$|B(a,b)| \leq g_o \left[\int_{-\infty}^{a-\Delta-\delta} dx\, \frac{1}{(x-a)^2} + \int_{a+\Delta+\delta} dx\, \frac{1}{(x-b)^2}\right] =$$

$$= g_o\left(\frac{1}{\Delta+\delta} + \frac{1}{a-b+\Delta+\delta}\right) \lesssim 2\frac{g_o}{\Delta} \quad .$$

Per maggiorare l'ultimo termine facciamo ricorso anche alla richiesta lenta variabilità della funzione $g(x)$; questa proprietà comporta le seguenti relazioni:

$$|\tilde{g}(x)| \simeq \left|\frac{dg}{dx}\right|_{|x=a} \qquad \left|\frac{\tilde{g}(x) - \tilde{g}(a)}{x-a}\right| \simeq \left|\frac{d^2g}{dx^2}\right|_{|x=\frac{a+b}{2}} \quad .$$

Fissiamo ora una lunghezza σ di riferimento per la variazione della derivata, che pensiamo peraltro dipendere molto lentamente dal punto:

$$\frac{1}{|g|}\left|\frac{dg}{dx}\right| \sigma \simeq 1,$$

ed allo stesso modo:

$$\frac{1}{|g|}\left|\frac{d^2g}{dx^2}\right|\sigma^2 \simeq 1 \quad .$$

Si ha perciò:

$$|E(a,b)| = \left|\frac{1}{2}\int_{a-\Delta-\delta}^{a+\Delta+\delta} dx\,\frac{\sin(x-a)\frac{\tau}{2\hbar}}{x-a}\,\sin\Big[(x-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\,\big(\tilde{g}(x)-\tilde{g}(a)\big)\right| \le$$

$$\le (\Delta+\delta) \max_{a-\Delta-\delta\le x\le a+\Delta+\delta}\left|\frac{\tilde{g}(x)-\tilde{g}(a)}{x-a}\right| \le \frac{\Delta+\delta}{\sigma^2}g_o \simeq \frac{\Delta}{\sigma^2}g_o \quad .$$

Facciamo a questo punto la seguente scelta per il parametro Δ: $\Delta \sim \sigma$. Si può ora raccogliere tutti i vari termini per dare una stima globale dell'integrale da cui eravamo partiti, scomposto sfruttando la (A.3):

$$I(\tau) = 4\,[A(a,b) + B(a,b) + B(b,a) +$$

$$+ C(a,b) + C(b,a) + D(a,b) + D(b,a) + E(a,b) + E(b,a)] \simeq$$

$$\simeq 4\Bigg\{\frac{\pi}{b-a}\sin\Big[(b-a)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\left(\frac{g(a)+g(b)}{2}\right) + \frac{1}{4}\tilde{g}(a)\sin\Big[(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big] +$$

$$-\frac{1}{4}\tilde{g}(b)\sin\Big[(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big] + B(a,b) + B(b,a) + E(a,b) + E(b,a)\Bigg\} + \mathrm{cost}\times g_o \quad .$$

Possiamo però fare la seguente ulteriore maggiorazione:

$$|C(a,b) + C(b,a)| = \left|\frac{1}{4}\tilde{g}(a)\sin\Big[(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big] - \frac{1}{4}\tilde{g}(b)\sin\Big[(a-b)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\right| \simeq$$

$$\simeq \frac{\pi}{2}(b-a)^2\frac{\tau}{4\hbar}\left|\frac{\tilde{g}(a)-\tilde{g}(b)}{a-b}\right| \le \frac{\pi\tau}{8\hbar}(b-a)^2\frac{g_o}{\sigma^2} \ll \frac{1}{4}\frac{g_o}{\Delta} \quad .$$

Si vede a questo punto che il contributo più rilevante nel valutare l'integrale di interesse sotto le ipotesi fatte è proprio dato dal termine lineare in τ, poiché tutti gli altri contributi sono dell'ordine di $\frac{g_o}{\Delta}$ mentre vale la disuguaglianza $\frac{\tau}{\hbar} \gg \frac{1}{\Delta}$:

$$I(\tau) \simeq 4\left\{\frac{\pi}{b-a}\sin\Big[(b-a)\frac{\tau}{2\hbar}\Big]\left(\frac{g(a)+g(b)}{2}\right)\right\} \simeq \frac{\pi}{\hbar}\tau\big(g(a)+g(b)\big) \quad . \qquad \text{(A.4)}$$

Bibliografia

[1] H. Rauch, W. Treimer and U. Bonse, *Phys. Lett.* **47A** (1974) 369

[2] H. Rauch and M. Suda, *Phys. Status Solidi* **A 25** (1974) 495

[3] H. Rauch, in *Proc. Int. Symp. on Foundations of Quantum Mechanics*, edited by S. Kamefuchi *et al.* (Phys. Soc. Japan, Tokyo, 1984) p.277

[4] H. Rauch, in *Proc. 2nd Int. Symp. on Foundations of Quantum Mechanics*, edited by M. Namiki *et al.* (Phys. Soc. Japan, Tokyo, 1987) p.3

[5] V. F. Sears, *Can. J. Phys.* **56** (1978) 1261

[6] V. F. Sears, *Phys. Rep.* **82** (1982) 1

[7] S. W. Lovesey, *Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter* (Clarendon Press, Oxford, 1986).

[8] H. Rauch, in *Proc. 3nd Int. Symp. on Foundations of Quantum Mechanics*, edited by S. Kobayashi *et al.* (Phys. Soc. Japan, Tokyo, 1990) p.3

[9] M. L. Goldberger and F. Seitz, *Phys. Rev.* **71** (1974) 294

[10] R. Clothier, H. Kaiser, S. A. Werner, H. Rauch and H. Wölwitsch, *Phys. Rev. A* **44**, 5357 (1991)

[11] R. Clothier, H. Kaiser, S. A. Werner, H. Rauch and H. Wölwitsch, *Phys. Rev. A* **45**, 31 (1992)

[12] H. Rauch, *Phys. Lett. A* **173**, 240 (1993)

[13] D. Jacobson, S. A. Werner and H. Rauch, *Phys. Rev. A* **44**, 3196 (1994)

[14] E. P. Wigner, *Am. J. Phys.* **31** (1963) 6

[15] J. Summhammer, H. Rauch and D. Tuppinger, *Phys. Rev. A* **36**, 4447 (1987)

[16] H. Rauch, J. Summhammer, M. Zawisky and E. Jericha, *Phys. Rev. A* **42**, 3726 (1990)

[17] S. Machida and M. Namiki, *Prog. Theor. Phys.* **63** (1980) 1457

[18] S. Machida and M. Namiki, *Prog. Theor. Phys.* **63** (1980) 1833

[19] M. Namiki and S. Pascazio, *Phys. Rep.* **232**, 301 (1993)

[20] M. J. Thomson, *Phys. Lett. A* **179**, 239 (1993)

[21] J. von Neumann, *Die Mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik*, 1932, Springer, Berlin

[22] M. Namiki and S. Pascazio, *Phys. Rev. A* **44**, 39 (1991)

[23] S. Machida and M. Namiki, *Proc. Int. Symp. on Foundations of Quantum Mechanics*, eds. S. Kamefuchi *et al.* (Phys. Soc. Japan, Tokyo, 1984) p.127

[24] S. Machida and M. Namiki, *Proc. Int. Symp. on Foundations of Quantum Mechanics*, eds. S. Kamefuchi *et al.* (Phys. Soc. Japan, Tokyo, 1984) p.136

[25] M. Namiki and S. Pascazio, *Phys. Lett. A* **147**, 430 (1990)

[26] M. Namiki and S. Pascazio, *Found. Phys. Lett.* **4**, 203 (1991)

[27] A. Daneri, A. Loinger and G. M. Prosperi, *Nucl. Phys.* **33** (1962) 297

[28] Y. Nabekawa, M. Namiki and S. Pascazio, *Phys. Lett. A* **167**, 435 (1992)

[29] M. Namiki, S. Pascazio and H. Rauch, *Phys. Lett. A* **173**, 87 (1993)

[30] P. Busch, P.J. Lahti and P. Mittelstaedt, *The Quantum Theory of Measurement*,

1991, Springer, Berlin

[31] E. B. Davies, *Quantum theory of open systems* (Academic Press, London, 1976).

[32] A. S. Holevo, *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory* (North Holland, Amsterdam, 1982).

[33] L. Lanz and O. Melsheimer, *Nuovo Cimento* **108b** (1993) 511

[34] L. Lanz, *Int. J. Theor. Phys.* **33** (1994) 19

[35] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully and E. P. Wigner, *Phys. Rep.* **106**, 121 (1984)

[36] L. Lanz, O. Melsheimer and E. Wacker, *Physica* **131A** (1985) 520

[37] W. H. Louisell, *Quantum Statistical Properties of Radiation* (John Wiley and Sons, New York, 1973).

[38] M. Weissbluth, *Photon-atom Interactions* (Academic Press, New York, 1989).

[39] W. H. Zurek, *Phys. Today* **44**, 36 (1991)

[40] L. Lanz and L.A. Lugiato, *Physica* **44** (1969) 532

[41] G. Lindblad, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976)

[42] V. Gorini, A. Kossakowski and E. C. G. Sudarshan, *J. Math. Phys.* **17**, 821 (1976)

[43] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-particle Systems* (McGraw-Hill Book Co., New York, 1971).

[44] G. M. Prosperi, *Lezioni sulla teoria dello "scattering"* (Viscontea, Milano, 1963).

[45] J. R. Taylor, *Scattering Theory* (John Wiley and Sons, New York, 1972).

[46] R. Golub, D. J. Richardson and S. K. Lamoreaux, *Ultra-Cold Neutrons* (Adam Hilger, Bristol, 1991).

Indice