UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI "FEDERICO II"



Scuola Politecnica e delle Scienze di Base Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Dipartimento di Fisica "Ettore Pancini"

Laurea Triennale in Fisica

La geometria dello spazio degli stati in Meccanica Quantistica

Relatori: Prof. Patrizia Vitale Candidato: Simone Cepollaro Matr. N85000853

Anno Accademico 2018/2019

Sommario

Lo scopo di questo lavoro di tesi è studiare la struttura geometrica dello spazio degli stati in meccanica quantistica. Per fare ciò si studieranno in un primo momento le differenze tra stati puri e stati misti, con la conseguente introduzione del formalismo dell'operatore densità; in seguito, dopo aver fatto corrispondere a ogni stato un operatore di rango k sullo spazio proiettivo complesso di Hilbert, verrano analizzate le proprietà di trasformazione degli stati quantistici sotto l'azione del gruppo generale lineare e del gruppo unitario. Il primo darà luogo a trasformazioni che conservano il rango degli operatori densità, il secondo a trasformazioni che ne conservano lo spettro. Lo spazio degli stati assumerà pertanto la struttura di varietà stratificata e i vari strati saranno dati dalle orbite del gruppo speciale lineare $Sl(n, \mathbb{C})$, dove n corrisponde al numero di livelli. Si analizzerà pià nel dettaglio il caso a due livelli (Palla di Bloch), e a tre livelli. In seguito si introdurrà in tale spazio un formalismo Hamiltoniano e, quindi, una struttra di Poisson che ci permetterà di trattare lo spazio degli stati come una varietà simplettica. Si otterranno campi vettoriali hamiltoniani e campi gradiente, attraverso i quali si potrà studiare l'evoluzione dinamica di un sistema quantistico in maniera analoga al caso della dinamica hamiltoniana classica. Verrà illustrato un esempio di dinamica sulla palla di Bloch, in cui l'evoluzione del sistema legata ad entrambi i campi conserva la purezza degli stati.

Indice

Introduzione				4
1	La geometria dello spazio degli Stati			6
	1.1	Operat	tore densità	6
		1.1.1	Richiami di Meccanica Quantistica	7
		1.1.2	Traccia di un operatore	8
		1.1.3	Proprietà di ρ	9
		1.1.4	Evoluzione temporale di $\rho(t)$	9
	1.2	Lo spa	zio degli stati	10
		1.2.1	Rappresentazione di stati puri e misti	10
		1.2.2	Stati puri sul Proiettivo Complesso di \mathcal{H}	11
		1.2.3	Alcuni richiami sulla teoria dei Gruppi di Lie	12
	1.3	Orbite	dello spazio degli stati	13
		1.3.1	Orbite di sistemi a k livelli	13
		1.3.2	Sottogruppi di isotropia	16
		1.3.3	Palla di Bloch	16
		1.3.4	Sistema a 3 livelli	17
2	La dinamica dello spazio degli stati			19
	2.1	Dinar	nica Hamiltoniana e Parentesi di Poisson	20
	2.2	Campi	vettoriali hamiltoniani e campi gradiente	22
	2.3	Spazio	degli stati	23
	2.4	Dinam	ica sulla Palla di Bloch	24
Co	Conclusioni			
Aţ	Appendice Richiami di teoria dei gruppi			
Bi	Bibliografia			

Introduzione

In meccanica classica, tramite il formalismo indotto delle equazioni di Hamilton

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \tag{1}$$

è possibile studiare la dinamica di un sistema usando un approccio geometrico che consiste nel trattare gli stati del sistema come punti di una varietà di Poisson. Lo studio della dinamica classica si riduce, in quest'approccio, allo studio delle traiettorie dinamiche sullo spazio delle fasi in cui gli stati sono rappresentati dai punti sulla varietà e le osservabili sono funzioni lisce. Tale approccio risulta vantaggioso dal momento che è possibile ottenere in maniera molto più rapida informazioni sugli integrali primi del moto, che portano a una conseguente semplificazione del problema dinamico.

In meccanica quantistica, l'evoluzione degli stati è data, nella visione di Schrödinger, dall'equazione differenziale alle derivate parziali

$$H \left| \psi \right\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left| \psi \right\rangle \tag{2}$$

essendo *H* l'operatore Hamiltoniano e $|\psi\rangle$ uno stato quantistico corrispondente alla funzione d'onda di cui si vuole studiare l'evoluzione. Gli stati sono rappresentati da vettori dello spazio di Hilbert, mentre le osservabili sono operatori autoaggiunti su H. Un modo alternativo di studiare l'evoluzione di sistemi quantistici è l'approccio à la Heisenberg in cui gli operatori evolvono secondo la legge

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)] + \frac{\partial A}{\partial t}$$
(3)

dove A è un operatore associato a una osservabile del sistema con Hamiltoniana H. Obiettivo di questo lavoro di tesi è studiare la struttura geometrica della varietà degli stati che, analogamente al caso classico, ci permetta di descrivere la dinamica di un sistema quantistico con gli strumenti della geometria differenziale.

Nel primo capitolo vengono messe in evidenza le differenze tra stati puri e stati misti, con la conseguente introduzione della matrice densità, seguendo l'approccio di [1] e [2]. Per dare una formulazione geometrica dello spazio degli stati, ci interesseremo delle orbite del gruppo speciale lineare $SL(n, \mathbb{C})$ e del gruppo unitario U(n) dove con n indichiamo il numero di livelli (finito) che compongono il sistema quantistico in questione. Le azioni di tali gruppi sulla varietà degli stati sono l'insieme delle trasformazioni che conservano rispettivamente il rango e lo spettro degli stati densità [6]. A seguito di ciò prenderemo in esame il caso a 2 e a 3 livelli [4]. Ciò che risulta interessante è che per n > 2, il bordo topologico della varietà degli stati, dato dall'insieme degli stati non massimamente misti, non è una varietà differenziabile e risulta a sua volta stratificato.

Nel secondo capitolo, dopo aver fatto una serie di richiami matematici sulle varietà di Poisson e simplettiche, oggetti già di grande interesse in meccanica classica, doteremo lo spazio degli stati di una struttura di Poisson che ci consentirà di studiare la dinamica di sistemi quantistici. Verrà presa in analisi, come caso particolare, l'evoluzione di un sistema a due livelli relativa a una particella immersa in un campo magnetico B [3]. Infine in Appendice è sono riassunti alcuni concetti base sulla teoria dei gruppi, di cui si fa ampio uso nel corso della tesi.

Da un punto di vista applicativo, un approccio geometrico alla dinamica quantistica diventa rilevante nei sistemi che interagiscono con l'ambiente. Il tipo di dinamica in questione è detta **dinamica di Markov** e avviene facendo passare lo stato da uno strato a un altro della varietà degli stati, quindi bisogna essere in grado di descrivere la dinamica su una varietà il cui bordo non è una varietà differenziale. Mentre una dinamica unitaria ha luogo su un'orbita simplettica, quindi una varietà differenziabile, senza passare da un'orbita all'altra, nel caso in cui le interazioni con l'ambiente portino a processi di dissipazione o di decoerenza, la dinamica cambia sia il rango che lo spettro di uno stato. Per descrivere la dinamica Markoviana è necessario introdurre strumenti più complessi, che richiederebbero una lunga trattazione, motivo per il quale in questa tesi ci limiteremo a studiare le strutture preliminari relative allo spazio degli stati.

Le strutture geometriche prese in analisi fanno anche da base per la teoria dell'informazione.

Capitolo 1

La geometria dello spazio degli Stati

1.1 Operatore densità

In meccanica quantistica, come è ben noto, l'evoluzione degli stati che descrivono un sistema fisico si ottiene risolvendo l'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle$$
(1.1)

Tra gli stati che descrivono un sistema generico è possibile fare una distinzione rilevante. Esistono, infatti, stati **puri** e **misti**. Gli stati puri $|\psi\rangle$ descrivono completamente il sistema fisico. Ogni stato puro può essere identificato con l'operatore di proiezione \hat{P}_{ψ} sul sottospazio che contiene $|\psi\rangle$, di cui si parlerà più nel dettaglio nei paragrafi successivi. Diremo invece che un sistema si trova in uno stato misto se tale stato si conosce solo con una certa probabilità. Per calcolare il valore medio di una osservabile \mathcal{A} , a cui corrisponde un operatore autoaggiunto \hat{A} , consideriamo una base $\{|\psi_j\rangle\}$ nello spazio di Hilbert. Si avrà che

$$\langle A \rangle_{\psi} = \langle \psi | \, \hat{A} \, | \psi \rangle \tag{1.2}$$

tale grandezza nel caso di uno stato puro si può scrivere come

$$\langle A \rangle_{\psi} = \sum_{j} \langle \psi_{j} | \, \hat{A} \hat{P}_{\psi} \, | \psi \rangle \tag{1.3}$$

Nel caso in cui il sistema sia descritto invece da uno stato misto, il risultato di una misura su A non restituirà un risultato univoco. Vedremo che tramite l' **operatore densità** sarà possibile studiare sistemi fisici a prescindere dalla condizione che gli stati siano puri [1].

Dopo aver richiamato alcuni concetti di meccanica quantistica, verrà di seguto introdotto il concetto di Traccia di un operatore e le proprietà di questa grandezza, che saranno fondamentali nello studio del valore medio delle osservabili sia per stati puri che misti.

1.1.1 Richiami di Meccanica Quantistica

Consideriamo la situazione in cui lo stato del sistema nell'istante iniziale t = 0 sia totalmente noto. Si indichi con ψ_0 il vettore che descrive lo stato inizale e con $\psi(t)$ il suo evoluto al tempo t. L'equazione di Schrödinger già citata in precedenza deve soddisfare la condizione

$$\psi(0) = \psi_0 \tag{1.4}$$

Sia G un'osservabile relativa a tale sistema. E' noto, per il secondo postulato della Meccanica Quantisica, che a G è associato un operatore autoaggiunto \hat{G} e che, data la sua equazione agli autovalori

$$\hat{G} \left| \phi_j \right\rangle = g_j \left| \phi_j \right\rangle \tag{1.5}$$

le grandezze g_j formano l'insieme dei valori delle possibili misure su G. Indichiamo con $P(G = \gamma | t)$ la probabilità che, al tempo t, una misura su G dia come risultato il valore γ .

Si ha dunque che:

$$P(G = \gamma_j \mid t) = \langle \psi(t) \mid \dot{P}_{\phi_j} \mid \psi(t) \rangle$$
(1.6)

$$\langle G \rangle_{\psi(t)} = \langle \psi(t) | \, \hat{G} \, | \psi(t) \rangle \tag{1.7}$$

Sfruttando l'ortonormalità del sistema e la definizione di traccia si ottiene che

$$\langle \psi(t) | \hat{G} | \psi(t) \rangle = \sum_{j} \langle \phi_{j} | \hat{G} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \phi_{j} \rangle = Tr(\hat{G} | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) |)$$
(1.8)

Ovvero

$$\langle \hat{G} \rangle_{\psi(t)} = Tr(\hat{G} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|)$$
(1.9)

Analogamente si dimostra che

$$P(G = \gamma_j \mid t) = Tr(\hat{P}_{\phi_j} \mid \psi(t)) \langle \psi(t) \mid)$$
(1.10)

I due risultati appena ottenuti si possono generalizzare al caso in cui lo stato del sistema è misto. Se il sistema si trova in sovrapposizione non coerente di stati ψ_l ciascuno con probabilità p_l e $\sum_l p_l = 1$ allora:

$$P(G = \gamma \mid t) = \sum_{l} p_{l} Tr(\hat{P}_{\gamma} \mid \psi_{l}(t)) \left\langle \psi_{l}(t) \right|$$
(1.11)

$$\langle \hat{G} \rangle_t = \sum_l p_l Tr(\hat{G} |\psi_l(t)\rangle \langle \psi_l(t)|)$$
(1.12)

Ponendo

$$\varrho(t) = \sum_{l} p_{l} |\psi_{l}(t)\rangle \langle\psi_{l}(t)| \qquad (1.13)$$

si ottengono le espressioni precedenti in forma più compatta:

$$P(G = \gamma_j \mid t) = Tr(\hat{P}_{\phi_j} \varrho(t))$$

$$\langle \hat{G} \rangle_t = Tr(\hat{G} \varrho(t))$$
(1.14)

L'operatore ρ definito in (1.13) è chiamato **operatore densità**. Usando l'operatore densità si possono descrivere in maniera univoca i sistemi descritti da stati puri e i sistemi descritti da stati misti. Infatti i risultati (1.9) e (1.10) sono in realtà il caso

banale di (1.14) in cui $\varrho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$. Un operatore densità di questa forma corrisponde infatti a uno stato puro. Nel caso in cui questo assuma la forma (1.13), sarà allora riferito a uno stato misto. Nel caso in cui gli stati non siano normalizzati, una più corretta definizione di ϱ è

$$\varrho(t) = \frac{|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle}$$
(1.15)

1.1.2 Traccia di un operatore

Sia \hat{A} un'operatore lineare definito su uno spazio di Hilbert \mathscr{H} e sia $|\phi_r\rangle$ un s.o.n.c.¹ in \mathscr{H} .

Si definisce *Traccia* di \hat{A} :

$$Tr(\hat{A}) = \sum_{j} \langle \phi_j | \, \hat{A} \, | \phi_j \rangle \tag{1.16}$$

Si dimostra che il valore di questa grandezza non dipende dal particolare s.o.n.c. utilizzato. Infatti dato un secondo sistema di riferimento $|\chi_k\rangle$:

$$\sum_{k} \langle \chi_{k} | \hat{A} | \chi_{k} \rangle = \sum_{k} \sum_{j,j'} \langle \chi_{k} | \phi_{j} \rangle \langle \phi_{j} | \hat{A} | \phi_{j'} \rangle \langle \phi_{j'} | \chi_{k} \rangle =$$

$$\sum_{j,j'} \langle \phi_{j} | \hat{A} | \phi_{j'} \rangle \sum_{k} \langle \phi_{j'} | \chi_{k} \rangle \langle \chi_{k} | \phi_{j} \rangle = \sum_{j,j'} \langle \phi_{j} | \hat{A} | \phi_{j'} \rangle \delta_{jj'} =$$

$$\sum_{j} \langle \phi_{j} | \hat{A} | \phi_{j} \rangle$$
(1.17)

Un'altra proprietà importante della Traccia di un operatore è che:

$$Tr(\hat{A}\hat{B}) = Tr(\hat{B}\hat{A}) \tag{1.18}$$

$$Tr(\hat{A}\hat{B}) = \sum_{j} \langle \phi_{j} | \hat{A}\hat{B} | \phi_{j} \rangle = \sum_{j} \sum_{k} \langle \phi_{j} | \hat{A} | \phi_{k} \rangle \langle \phi_{k} | \hat{B} | \phi_{j} \rangle = \sum_{j} \sum_{k} \langle \phi_{k} | \hat{B} | \phi_{j} \rangle \langle \phi_{j} | \hat{A} | \phi_{k} \rangle = Tr(\hat{B}\hat{A})$$

Operatore di Proiezione Sia \mathscr{R} un sottospazio di \mathscr{H} di dimensione finita m e sia $\hat{P}_{\mathscr{R}}$ l'operatore di proiezione su \mathscr{R} . Ovviamente si ha che

$$Tr(P_{\mathscr{R}}) = m \tag{1.19}$$

Infatti

$$Tr(\hat{P}_{\mathscr{R}}) = \sum_{j} \langle \phi_{j} | \hat{P}_{\mathscr{R}} | \phi_{j} \rangle = \sum_{j} \sum_{k=1}^{m} \langle \phi_{j} | \chi_{k} \rangle \langle \chi_{k} | \phi_{j} \rangle = \sum_{j} \sum_{k=1}^{m} |\langle \phi_{j} | \chi_{k} \rangle|^{2} = \sum_{j=1}^{m} ||\chi_{k}||^{2}$$

Ed essendo $\{\chi_k\}$ un sistema ortonormale, si ottiene il risultato della (1.19) Se indichiamo con \hat{P}_{ψ} il proiettore sul sottospazio generato dallo stato ψ , risulta evidente il significato geometrico di \hat{P}_{ψ} come operatore di proiezione ortogonale sul ket $|\psi\rangle$. Questa interpretazione trova ulteriore riscontro nel fatto che $\hat{P}_{\psi}^2 = \hat{P}_{\psi}$, ovvero proiettare due volte in successione su uno stesso ket equivale a proiettare una singola volta.

¹Un sistema ortonormale completo su uno spazio di Hilbert \mathscr{H} è un insieme di vettori a modulo unitario, ortogonali a due a due e tali che la chiusura dell'insieme generato da tale sistema corrisponda con \mathscr{H} stesso.

1.1.3 Proprietà di *ρ*

Si osserva immediatamente che:

$$Tr(\varrho(t)) = \sum_{l} p_{l} Tr(|\psi_{l}(t)\rangle \langle \psi_{l}(t)| = \sum_{l} p_{l} = 1$$
(1.20)

 ϱ è inoltre autoaggiunto

$$\varrho(t)^{\dagger} = \varrho(t) \tag{1.21}$$

Poiché

$$\langle \varphi | \varrho(t) | \varphi \rangle = \sum_{l} p_{l} |\langle \psi_{l} | \varphi \rangle|^{2} \ge 0 \quad \forall \varphi$$
(1.22)

allora ρ è semidefinito positivo cioè i suoi autovalori sono positivi o al più nulli. Bastano queste tre proprietà per poter scrivere ogni operatore statistico nella forma che segue:

$$\varrho = \sum_{l} \mu_{l} |\psi_{l}\rangle \langle\psi_{l}|$$
(1.23)

con $\mu_l \ge 0$ e $\sum_l \mu_l = 1$. Tutti gli autovalori di ϱ devono avere valori compresi nell intervallo chiuso [0, 1]. Se così non fosse e, per esempio, esistesse un $\mu_k > 1$ allora la proprietà di ϱ di avere traccia unitaria sarebbe violata perche tutti gli altri autovalori sono non negativi.

Spettro di ρ Dal momento che ρ ha traccia finita, il suo spettro deve essere puramente discreto. Infatti se avesse anche termini di spettro continuo:

$$\rho = \sum_{l} \mu_{l} |\psi_{l}\rangle \langle\psi_{l}| + \sum_{k} \int_{\sigma_{c}(\rho)} d\mu \mu |\phi_{k}\rangle \langle\phi_{k}|$$
(1.24)

Dato un s.o.n.c. $|\chi_m\rangle$

$$Tr(\varrho) = \sum_{l} \sum_{m} \mu_{l} |\langle \chi_{m} | \psi_{l} \rangle|^{2} + \sum_{k} \sum_{m} \int_{\sigma_{c}(\varrho)} d\mu \mu |\langle \chi_{m} | \phi_{k} \rangle|^{2} = \sum_{l} \mu_{l} + \sum_{m} \int_{\sigma_{c}(\varrho)} d\mu \mu \langle \phi_{k} | \phi_{k} \rangle = +\infty$$
(1.25)

Tale risultato è ovviamente in forte contrasto con le proprietà dell'operatore. Di conseguenza lo spettro deve essere puramente discreto.

1.1.4 Evoluzione temporale di $\rho(t)$

Dato uno stato puro $|\psi(t)\rangle$, l'equazione di Schrödinger

$$\langle \hbar \partial_t | \psi(t) \rangle = \hat{H} | \psi(t) \rangle$$
 (1.26)

si può riscrivere, essendo \hat{H} autoaggiunto :

$$-i\hbar\partial_t \left\langle \psi(t) \right| = \left\langle \psi(t) \right| \hat{H} \tag{1.27}$$

Essendo in questo caso $\varrho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, si può calcolare $\frac{\partial \varrho(t)}{\partial t}$:

$$i\hbar\frac{\partial\varrho(t)}{\partial t} = \sum_{l} \mu_{l} \left[i\hbar\frac{\partial|\psi_{l}(t)\rangle}{\partial t} \langle\psi_{l}(t)| + i\hbar|\psi_{l}(t)\rangle \frac{\partial\langle\psi_{l}(t)|}{\partial t}\right] = \sum_{l} \mu_{l} \left[\hat{H}|\psi_{l}(t)\rangle \langle\psi_{l}(t)| - |\psi_{l}(t)\rangle \langle\psi_{l}(t)| \hat{H}\right] = \left[\hat{H}, \varrho(t)\right]$$
(1.28)

Dunque

$$\frac{\partial \varrho(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \varrho] \tag{1.29}$$

L'operazione $[\bullet, \bullet]$ è detta Commutatore ed è un'operazione binaria, interna, anticommutativa e lineare. L'equazione (1.29) è l'analogo dell'equazione di Liouville in meccanica classica sullo spazio delle fasi. Viene infatti chiamata equazione di Liouville-Von Neumann o, semplicemente, equazione di Liouville quantistica.

Nel caso in cui H non dipenda dal tempo, la soluzione formale della (1.29) è data da:

$$\varrho(t) = e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \varrho_0 e^{i\frac{Ht}{\hbar}} \tag{1.30}$$

dove $e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$ è l'operatore di evoluzione temporale associato all'hamiltoniana del sistema.

Evoluzione di uno stato puro Abbiamo visto in precedenza che gli stati puri $|\psi\rangle$ possono essere identificati con i proiettori P_{ψ} che godono della proprietà $P_{\psi} = P_{\psi}^2$. Di conseguenza anche la matrice densità per gli stati puri godrà di tale proprietà. Per gli stati misti, invece, la matrice densità associata non è un proiettore, ma una combinazione convessa di proiettori per cui $\rho_{misto} \neq \rho_{misto}^2$. Nel caso si analizzasse l'evoluzione temporale di uno stato puro, bisogna tener conto che nell'istante iniziale t_0 si ha $\rho(t_0) = \rho^2(t_0)$ per le proprietà dei proiettori. Come visto in precedenza l'evoluzione di $\rho(t)$ è data da:

$$\varrho(t) = \hat{U}(t, t_0)\varrho(t_0)\hat{U}^{\dagger}(t, t_0)$$
(1.31)

Allora:

$$\varrho^{2}(t) = \hat{U}(t,t_{0})\varrho(t_{0})\hat{U}^{\dagger}(t,t_{0})\hat{U}(t,t_{0})\varrho(t_{0})\hat{U}^{\dagger}(t,t_{0}) = \\
\hat{U}(t,t_{0})\varrho^{2}(t_{0})\hat{U}^{\dagger}(t,t_{0}) = \hat{U}(t,t_{0})\varrho(t_{0})\hat{U}^{\dagger}(t,t_{0}) = \varrho(t)$$
(1.32)

Questo risultato è di grande rilevanza in meccanica quantistica: in un sistema chiuso, uno stato puro non può evolvere in uno stato misto.

1.2 Lo spazio degli stati

1.2.1 Rappresentazione di stati puri e misti

In questa sezione sono riassunte le proprietà degli stati densità, già descritte nelle sezioni precedenti. Sia \mathscr{H} uno spazio di Hilbert e $\mathscr{L}(\mathscr{H})$ lo spazio degli operatori lineari su \mathscr{H} .

Gli stati puri sono decritti da sottospazi unidimensionali di \mathcal{H} , ovvero dai così detti *raggi di Hilbert*. Questi stati possono essere identificati con i proiettori di rango 1 di traccia unitaria, a causa della corrispondenza uno a uno che si instaura. Questi proiettori prendenze il nome di **eneratore denzit**i definite così:

Questi proiettori prendono il nome di operatore densità definito così:

$$\varrho = \frac{|\psi\rangle \langle \psi|}{\langle \psi | \psi\rangle} \tag{1.33}$$

Le proprietà di ρ , trattate nella sezione precedente, sono le seguenti:

- $\varrho \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$
- $\varrho = \varrho^2$
- $Tr(\varrho) = 1$
- $\varrho = \varrho^{\dagger}$

Come si è visto in precedenza, l'uso della matrice di densità consente di poter calcolare i valori medi delle osservabili in maniera analoga al caso classico. Si ha infatti:

$$\langle \hat{A} \rangle = Tr(\varrho \hat{A})$$
 (1.34)

Inoltre, tramite questo strumento, è possibile estendere il calcolo di valori medi degli osservabili anche ai sistemi descritti da stati misti. Per fare ciò, è necessario ridefinire ϱ , rinunciando alla proprietà di *idempotenza* per cui $\varrho = \varrho^2$ e $Spec(\varrho) = \{1, 0\}$ e imporre la positività per cui $\varrho \ge 0 \iff Spec(\varrho) \ge 0$ che implica $0 \le \mu_j \le 1 \quad \forall \mu_j \in Spec(\varrho)$

Ridefinendo così ρ , si ha $\rho^2 \leq \rho$, per cui gli stati puri sono il caso limite delle miscele. Gli stati densità misti verranno dunque scritti come combinazioni convesse di stati densità puri :

$$\varrho = \sum_{j} p_{j} \frac{|\psi_{j}\rangle \langle \psi_{j}|}{\langle \psi_{j} | \psi_{j} \rangle}$$
(1.35)

con: $\sum_{j} p_j = 1$ $p_j \ge 0$ $\forall j$.

1.2.2 Stati puri sul Proiettivo Complesso di \mathcal{H}

Dato \mathscr{H} uno spazio di Hilbert finito-dimensionale, di dimensione n, cioe' uno spazio vettoriale complesso, isomorfo a C^n , dotato di prodotto scalare, sia $T \in \mathscr{L}(\mathscr{H})$ un operatore lineare su \mathscr{H} . Se T non è un operatore unitario, non conserva il prodotto scalare, ovvero:

$$\langle T\psi \,|\, T\psi \rangle \neq \langle \psi \,|\, \psi \rangle \tag{1.36}$$

Nel corso dello studio dello spazio degli stati che ci accingeremo a svolgere, conviene sempre considerare T come operatore complesso piuttosto che reale, dal momento che $dim_{\mathbb{C}}(T) = n$, mentre $dim_{\mathbb{R}}(T) = 2n$ ed è più facile studiare le orbite di $GL(n, \mathbb{C})$ piuttosto che di $GL(2n, \mathbb{R})$.

Per sistemi quantistici di dimensione finita n, lo spazio degli stati puri può essere identificato con il proiettivo complesso di Hilbert [5]. Il proiettivo complesso in questione è formato dalle classi di equivalenza di vettori di \mathscr{H} che sono in relazione \sim . Diremo che $|\psi\rangle \sim |\phi\rangle$ se $\exists \lambda, \vartheta \in \mathbb{C}$ tali che $|\phi\rangle = \lambda e^{i\vartheta} |\psi\rangle$. Le classi di equivalenza sono i raggi dello spazio di Hilbert. Per cui, se \mathscr{H} ha dimensione (n + 1), essendo definito sul campo \mathbb{C} , definiamo spazio proiettivo complesso, lo spazio ottenuto dal quoziente dello spazio di Hilbert rispetto alla relazione di equivalenza \sim :

$$\mathbb{CP}^n = \frac{\mathbb{C}^{n+1} \setminus \{0\}}{\sim} \tag{1.37}$$

Il proiettivo complesso \mathbb{CP}^n ha una struttura di varietà differenziabile complessa di dimensione n; si può inoltre ottenere come quoziente della sfera unitaria (2n+1) dimensionale in \mathbb{C}^{n+1} sotto l'azione del gruppo unitario $U(1)^2$ costituito dalle trasformazioni

 $^{^{2}}$ U(1) è un gruppo di Lie. In appendice daremo qualche dettaglio su tali gruppi.

di fase:

$$\mathbb{CP}^n = \frac{S^{2n+1}}{U(1)} \tag{1.38}$$

Per definizione, lo spazio proiettivo è l'immagine di uno spazio vettoriale tramite la proiezione:

$$P: V^{n+1} \to \mathbb{P}^n(V) \tag{1.39}$$

Da questa relazione segue che $dim P(\mathscr{H}) = dim \mathscr{H} - 1$. Ciò implica che $\mathbb{P}(\mathscr{H})$ può essere parametrizzato usando i proiettori: ogni proiettore su \mathscr{H} ha la forma $\frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}$. E', cioè, in corrispondenza uno a uno con i raggi che definiscono le classi di equivalenza di $\mathbb{P}(\mathcal{H})$. La corrispondenza con i raggi è dovuta alla forma del proiettore, la quale dipende dalla metrica usata. Cambiando carta cambia la metrica e quindi la corrispondenza.

Consideriamo l'azione di un operatore lineare, T, sullo spazio proiettivo complesso, rappresentata da:

$$\frac{T \left|\psi\right\rangle \left\langle\psi\right| T^{\dagger}}{\left\langle T\psi\right| T\psi\right\rangle} \tag{1.40}$$

Generalizziamo quindi l'azione di T al caso di una miscela statistica, dovuta alla non completa conoscenza del sistema, in cui allo stato non sia associato un proiettore, e cioè, come abbiamo visto, $\rho^2 \neq \rho$ e $Tr(\rho^2) < 1$. Definiamo:

$$\varrho_T = \frac{T\varrho T^{\dagger}}{Tr(T\varrho T^{\dagger})} \tag{1.41}$$

Tale operatore ha le seguenti proprietà:

1. Essendo ρ autoaggiunto, ρ_T è Hermitiano.

2.
$$Tr\left(\frac{T\varrho T^{\dagger}}{Tr(T\varrho T^{\dagger})}\right) = 1$$
, quindi $Tr(\varrho_T) = Tr(\varrho) = 1$

3. Poichè ogni operatore positivo A si può scrivere come $A = MM^{\dagger}$, allora $\rho =$ NN^{\dagger} e di coseguenza: $\frac{TMM^{\dagger}T^{\dagger}}{T_{r}(T\varrho T^{\dagger})} = XX^{\dagger}$ quindi ϱ_{T} è positivo.

Dunque questa operazione associa stati a stati, anche se T non è un operatore unitario e se ρ corrisponde a uno stato misto.

Vogliamo ora studiare le azioni dei gruppi di matrici sullo spazio degli stati, ovvero analizzare le foliazioni della varietà dello spazio degli stati, definite dalle orbite dei gruppi di Lie che agiscono sullo spazio stesso.

1.2.3 Alcuni richiami sulla teoria dei Gruppi di Lie

Un gruppo di Lie è un gruppo topologico dotato di struttura di varietà differenziabile. Gruppi continui di trasformazioni lineari su spazi vettoriali sono detti gruppi di Lie lineari.

Azione di un gruppo Sia M una varietà e G un gruppo. Si dice **azione** di G su M ogni applicazione

$$\theta: G \times M \longrightarrow M$$
, $(g, p) \longrightarrow \theta_g(p)$ (1.42)

tale che:

- 1. $\forall p \in M \quad \theta_1 p = p$
- 2. $\forall p \in M, \forall g, h \in G \ \theta_{gh} = \theta_g(\theta_h x)$

Ad ogni azione θ_g di un gruppo G su una varietà M è associata una relazione di equivalenza binaria su M così definita:

$$\forall p, q \in M \ p \approx q \iff \exists g \in G : q = \theta_g(p) \tag{1.43}$$

Orbite di un gruppo Data un'azione θ_g di G su M, $\forall p \in M$ si dice orbita di p l'insieme $G(p) = \{\theta_g(p) : g \in G\}$ ovvero le classi di equivalenza date dalla relazione precedente \approx . Le orbite dei gruppi di Lie, come si vedrà in seguito, saranno associate alle foliazioni della varietà associata allo spazio degli stati. Un'azione di dice **transitiva** se esiste un'unica orbita su M, ovvero se un qualunque elemento p può essere trasformato in qualunque altro elemento $q \in M$, tramite l'azione di un g appartenente al gruppo.

$$\forall x, y \in X \; \exists g \in G \; : \; y = g * x \tag{1.44}$$

Esempi Le orbite del gruppo delle rotazioni $SO(n, \mathbb{R}) = O(n) \cap SL(n, \mathbb{R})$ sono sfere in \mathbb{R}^n . L'azione di O(n) su S^n è transitiva. L'azione di $GL(n, \mathbb{R})$ su \mathbb{R}^n ha esattamente due orbite: $\{\mathbf{0}\} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$.

Prodotto diretto Il prodotto diretto di due gruppi $(G_1, *_1) \in (G_2, *_2)$ è un gruppo $(G_1 \times G_2, *_x)$, che si ottiene munendo l'insieme $G_1 \times G_2$ dell'operazione $*_x$ definita:

$$(a_1, a_2) *_x (b_1, b_2) = (a_1 *_1 b_1, a_2 *_2 b_2) \quad \forall a_1, b_1 \in G_1, \ \forall a_2, b_2 \in G_2$$
(1.45)

1.3 Orbite dello spazio degli stati

1.3.1 Orbite di sistemi a k livelli

Lo studio delle strutture geometriche dello spazio degli stati deve tenere conto sia di stati puri che misti. Tra le varie differenze che sussistono tra queste tipologie di stati, quella che, nel corso di questa trattazione, avrà di sicuro più rilevanza è che $Tr\varrho_{puro}^2 = 1$ e $Tr\varrho_{misto}^2 < 1$, non essendo ϱ_{misto} un proiettore. In generale si può dire che $Tr\varrho^2 \leq 1$, dunque, come accennato nella sezione precedente, è possibile vedere gli stati puri come casi limite degli stati misti. Analizzeremo dunque più nel dettaglio la situazione degli stati misti, dal momento che, nel caso degli stati puri, la situazione è semplificata dalle simmetrie indotte dalle proprietà che ϱ assume.

Siano ρ_T le classi di equivalenza dello spazio degli stati *S*. Vogliamo analizzare l'azione di $T \in GL(n, \mathbb{C})$ sugli stati ρ_T definiti in (1.41). Possiamo porre

$$GL(n,\mathbb{C}) = SL(n,\mathbb{C}) \times \mathbb{C}_0 \tag{1.46}$$

dove C_0 , l'insieme dei numeri complessi diversi da 0, cattura l'informazione sul determinante. Visto che \mathbb{C}_0 agisce sugli stati, così definiti, come l'identità, si arriva alla conclusione che $GL(n, \mathbb{C})$ agisce come $SL(n, \mathbb{C})$ su $\mathbb{P}(H)$, ovvero transitivamente. Il



Figura 1.1:

caso sicuramente più interessante è quello in cui si ha una matrice di densità ρ di rango k.

$$\varrho = \frac{1}{k} \begin{pmatrix}
1 & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & \ddots & \end{pmatrix}$$
(1.47)

Moltiplicando questa matrice per T a sinistra, per T^{\dagger} a destra e dividendo il risultato per $Tr(T\varrho T^{\dagger})$ si ottiene una matrice, anch'essa di rango k. Quindi, l'azione di T sullo spazio degli stati è non-lineare ma conserva il rango. Lo spazio degli stati è una varietà stratificata, in cui gli strati sono orbite non-lineari del gruppo speciale lineare. Il bordo della varietà così rappresentata è formata dall'unione delle orbite di tutte le matrici di questo tipo quando il rango è strettamente minore di n. Tale bordo è a sua volta una varietà ma non è una varietà differenziabile, essendo unione di sottovarietà di dimensione diversa.

Un'ulteriore stratificazione si può ottenere tramite l'azione del gruppo U(n) su ρ . Per capire meglio cosa succede, consideriamo un sistema a due livelli. Consideriamo per semplicità lo stato rappresentato dalla matrice diagonale

$$\varrho_2 = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ & \lambda_2 \end{pmatrix} \tag{1.48}$$

L'azione di $SL(2, \mathbb{C})$ genera due strati. Uno strato è quello con $\lambda_1, \lambda_2 \neq 0$ (stati misti). L'altro strato è dato da $\lambda_1 = 0, \lambda_2 \neq 0$ o viceversa. Con l'azione di $SL(2, \mathbb{C})$ non cambia il rango dello stato, ma viene spannato tutto lo strato, quindi, in particolare cambia lo spettro. Un'ulteriore foliazione si può ottenere con l'azione di U(2)

$$\varrho = \frac{U\varrho U^{\dagger}}{Tr(U\varrho U^{\dagger})} \tag{1.49}$$

Questa è isospettrale ovvero genera tutti gli stati che hanno lo stesso spettro ma non conserva la forma diagonale. La condizione sugli autovalori di ρ si può rappresentare tramite il simplesso 1-dimensionale in figura 1.1.

Le intersezioni del segmento I con gli assi rappresentano il bordo della varietà che in



Figura 1.2:

questo caso corrisponde ai casi limite in cui λ_1 o λ_2 tendono a 0 ovvero lo stato diventa puro.

Si può fare un'ulteriore stratificazione considerando l'azione di U(2). Infatti ogni strato è a sua volta stratificato: applicando $U \in U^{\dagger}$ si ottiene un punto del segmento del simplesso, a cui corrisponde un'orbita di U(2). Poichè, cambiando base, gli autovalori cambiano, conservando la relazione $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, la matrice di questo sistema si potrà scrivere :

$$\begin{pmatrix} \lambda \\ & 1-\lambda \end{pmatrix}$$
 (1.50)

Si osserva che a punti simmetrici rispetto la diagonale, è associata la stessa orbita di U(2).

Per un sistema a 3 livelli, invece, come matrice rappresentativa di un dato strato si può secegliere la matrice diagonale

$$\begin{pmatrix} \chi_1 & & \\ & \chi_2 & \\ & & \chi_3 \end{pmatrix}$$
 (1.51)

con $\chi_1 + \chi_2 + \chi_3 = 1$. In questo caso, per modellizzare le possibili permutazioni degli autovalori, si usa il simplesso 2-dimensionale, mostrato in figura 1.2.

I vertici rappresentano gli stati puri, il punto al centro del triangolo è lo stato *più misto o di massima entropia* e si indica solitamente con mM (mixMax). I sei triangoli individuati dai segmenti, che congiungono i vetici con i punti medi del segmento opposto, sono a due a due simmetrici. Ovvero, in analogia con il caso del segmento *I* precedente, le orbite associate ai punti di un singolo triangolo passano per tutti i punti degli altri 5.

Riassumendo, gli strati, descritti dalle orbite non-lineari di $SL(3, \mathbb{C})$, sono tre, e ognuno di loro è a sua volta foliato dall'azione del gruppo unitario U(3), che associa a ogni elemento dello strato tutta la famiglia di stati che hanno lo stesso spettro. In generale, in un sistema a k livelli, descritto da una matrice di densità, l'insieme degli autovalori coincide con i punti di un simplesso solido (un ipertetraedro T_N).

1.3.2 Sottogruppi di isotropia

Si è già detto più volte che lo spazio degli stati in un sistema quantistico con un numero finito di livelli, pari a n, si può identificare come una varietà stratificata, i cui strati sono dati dalle orbite non lineari del gruppo speciale lineare, a loro volta costituite dell'unione di orbite del gruppo unitario. In generale, per determinare la natura degli strati dati dalle orbite di un gruppo G, si definisce il *Sottogruppo di isotropia* $G_{\varrho} \subset G$ il gruppo formato da elementi di G che lasciano ϱ invariato, ovvero

$$G_{\varrho} := \{ g \mid g \cdot \varrho \cdot g^{-1} = \varrho \}$$

$$(1.52)$$

Dato $\rho \operatorname{con} k \ge 1$ autovalori distinti λ_j , ciascuno con molteplicità geometrica n_j , allora le orbite di ρ sotto l'azione di U(n) sono omomorfe alle varietà:

$$\frac{U(n)}{U(n_1) \times U(n_2) \times \dots \times U(n_k)}$$
(1.53)

la cui dimensione è $n^2 - \sum_{i=1}^k n_i^2$. Lo stato ϱ si dice *semi-puro* se ha due autovalori distinti di molteplicità geometrica 1 e n - 1. Le orbite di uno stato semipuro sotto azione di U(n) sono omomorfe a

$$\frac{U(n)}{U(1) \times U(n-1)} \tag{1.54}$$

che è a sua volta omomorfo a \mathbb{CP}^{n-1} .

1.3.3 Palla di Bloch

Per un sistema a due livelli il gruppo fondamentale delle trasformazioni unitarie è U(2). La base dell'algebra $\mathfrak{u}(2)$ è formata dalle matrici :

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.55}$$

Queste costituiscono anche una base per le matrici complesse 2x2, pertanto qualunque stato del sistema a due livelli può essere rappresentato dalla matrice diagonale ρ_0 , che si può parametrizzare in funzione di un parametro $-1 \le \omega \le 1$ e si ottiene:

$$\varrho_0 = \frac{1}{2}(\sigma_0 + \omega\sigma_3) = \begin{pmatrix} \frac{1+\omega}{2} & 0\\ 0 & \frac{1-\omega}{2} \end{pmatrix}$$
(1.56)

quindi essendo

$$\varrho = U\varrho_0 U^{-1} = \frac{1}{2}(\sigma_o + \omega \vec{x} \cdot \vec{\sigma}) \tag{1.57}$$

Si può sostituire l'espressione di ρ_0 ed elevare ambo i membri al quadrato. Si ottiene

l

$$\sum_{j=1}^{3} x_j x_j = 1 \tag{1.58}$$

La varietà dei parametri è la Palla 3-dimensionale B^2 di raggio unitario. Viene chiamata **Bloch Ball**. Lo stato descritto da $\varrho = \frac{\mathbb{1}_2}{2}$ ha un unico autovalore di molteplicità geometrica 2, per cui, in base alle considerazioni fatte nella sezione precedente, le orbite di U(2) sono omomorfe a $\frac{U(2)}{U(2)}$ che è un punto, quindi una varietà 0-dimensionale. Negli altri casi, le orbite sono omomorfe a $\frac{U(2)}{U(1)\times U(1)} \simeq \mathbb{CP}^1$. Ma \mathbb{CP}^1 è diffeomorfo alla sfera \mathbb{S}^2 . Trafromazioni unitarie di ϱ si possono interpretare come rotazioni reali della sfera. L'azione del gruppo unitario su un insieme di stati lo divide in un insieme non numerabile di varietà omomorfe e concentriche alla sfera S^2 . Questo vale per tutti gli stati tranne per quello completamente random $\frac{1}{2}$ che viene mappato nel centro della sfera. Riassumendo, la varietà degli stati è una varietà stratificata formata da due strati: il bordo della sfera è l'insieme degli stati puri con $Ran(\varrho) = 1$ cioè $\omega^2 = 1$; l'interno invece è dato dall'unione delle orbite di SU(2) con $0 \le \omega^2 < 1$, ovvero l'insieme di tutti gli stati misti con $Ran(\varrho) = 2$.

1.3.4 Sistema a 3 livelli

Per un sistema a tre livelli il gruppo di trasformazioni unitarie è SU(3). La varietà dei parametri è una sottovarietà propria di matrici 3x3. Gli strati di questa varietà sono dati dall'unione delle orbite di SU(3) (che si vedrà essere sottovarietà 4-dimensionali e 6-dimensionali in \mathbb{R}^8), associate a stati densità di rango 1,2 e 3.

La matrice diagonale ρ_0 può essere scritta in funzione di parametri reali $k_1, k_2, k_3 > 0$ tali che $k_1 + k_2 + k_3 = 1$.

$$\varrho_0 = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0\\ 0 & k_2 & 0\\ 0 & 0 & k_3 \end{pmatrix}$$
(1.59)

Cosi come nel caso a due livelli ρ_0 si poteva scrivere come combinazione di matrici di Pauli, nel caso a tre livelli ρ_0 si può esprimere in termini delle matrici a traccia nulla di Gell-Mann λ_i di $\mathfrak{su}(3)$:

$$\lambda_{1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_{2} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$\lambda_{3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_{4} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$\lambda_{5} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_{6} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
$$\lambda_{7} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_{8} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

Scegliamo una base in cui

$$\varrho_0 = \alpha \lambda_0 + \beta \lambda_3 + \gamma \lambda_8 \tag{1.60}$$

dove $\lambda_0 = \mathbb{1}_3$ e le tre costanti sono:

$$\alpha = \frac{1}{3}(k_1 + k_2 + k_3)$$

$$\beta = \frac{1}{2}(k_1 - k_2)$$

$$\gamma = \frac{k_1 + k_2 - 2k_3}{2\sqrt{3}}$$

Come nel caso precedente

$$\varrho = U\varrho_0 U^{-1} = x_0 \lambda_0 + x^j \lambda_j \tag{1.61}$$

La condizione sulla traccia $Tr(\rho) = 1$ impone che $x_0 = \frac{1}{3}$. Di conseguenza si ottiene:

$$U(\beta\lambda_3 + \gamma\lambda_8)U^{-1} = x^j\lambda_j$$

Elevando ambo i membri al quadrato

$$2(\beta^2 + \gamma^2) = 2\sum_{j=1}^{8} x_j x_j$$

Riscriviamo ora β e γ in funzione dei tre parametri iniziali

$$\sum_{j=1}^{8} x_j x_j = \frac{1}{3} - (k_1 k_2 + k_2 k_3 + k_1 k_3)$$
(1.62)

Di conseguenza, se ρ ha un unico autovalore di molteplicità geometrica 3, $\rho = \frac{\mathbb{1}_3}{3}$, la sua orbita è omomorfa a $\frac{U(3)}{U(3)}$ cioè è un singolo punto. Se ρ ha due autovalori distinti allora è uno stato pseudo-puro. Il sottogruppo di isotropia è $U(1) \times U(2)$ e le sue orbite sono omomorfe alla varietà $\frac{U(3)}{U(1) \times U(2)}$ la cui dimensione è $n^2 - n_1^2 - n_2^2 = 9 - 1 - 4 = 4.$

Se ϱ è un presenta tre autovalori distinti con molteplicità geometrica 1, allora il suo gruppo di isotropia è $U(1) \times U(1) \times U(1)$, dunque le sue orbite sono omomorfe a $\frac{U(3)}{U(1) \times U(1) \times U(1)}$, la cui dimensione è $n^2 - n_1^2 - n_2^2 - n_3^2 = 9 - 1 - 1 - 1 = 6$. La frontiera della varietà contiene tutti gli stati stati che non sono massimamente misti.

Capitolo 2

La dinamica dello spazio degli stati

La dinamica di un sistema quantistico è descritta, nell'approccio di Schrödinger, da un'equazione differenziale alle derivate parziali, l'equazione di Schrödinger, lineare, che governa l'evoluzione della funzione d'onda associata allo stato. Le osservabili sono operatori lineari sullo spazio di Hilbert degli stati. Nell'approccio duale à la Heisenberg, l'evoluzione del sistema è descritta dall'equazione di Liouville quantistica (2.1), anch'essa lineare, che governa l'evoluzione nel tempo delle osservabili.

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]$$
(2.1)

Gli stati di un sistema classico sono invece associati a punti di una varietà differenziale, detta spazio carrier per la dinamica, che, a seconda degli approcci, può essere lo spazio delle configurazioni o lo spazio delle fasi, anche detti, rispettivamente, spazio tangente e spazio cotangente. Le osservabili sono, in ogni caso, funzioni sullo spazio carrier, a valori reali.

Nell'approccio newtoniano (evoluzione degli stati descritti come punti dello spazio delle configurazioni, Q), la dinamica è data in termini di diffeomorfismi definiti su Q. L'approccio che più facilmente si collega a quello quantistico è quello Hamiltoniano, in cui le osservabili, che sono funzioni sullo spazio delle fasi, possono essere dotate di una struttura di algebra di Poisson e la loro evoluzione temporale è descritta dall'equazione

$$\dot{f} = \{f, H\} \tag{2.2}$$

Si vede chiaramente che l'equazione di evoluzione delle osservabili quantistiche nell'approccio à la Heisenberg è l'analogo del caso classico nello spazio delle fasi, con le parentesi di Poisson sostituite dal commutatore di operatori.

Per comprendere a meglio le analogie tra il caso classico e quello quantistico, di seguito si rivedono alcuni concetti di dinamica classica Hamiltoniana. Nelle sezioni successive si passa quindi all'analisi dell'approccio à la Heisenberg della Meccanica Quantistica con l'intento di mettere in evidenza i punti di contatto.

2.1 Dinamica Hamiltoniana e Parentesi di Poisson

Detto S lo spazio degli stati e $\mathscr{F}^{\infty}(S)$ lo spazio delle funzioni differenziabili su S. Si può introdurre in questo spazio un formalismo Hamiltoniano definendo:

$$\{\bullet, \bullet\}: \mathscr{F}^{\infty}(S) \times \mathscr{F}^{\infty}(S) \to \mathscr{F}^{\infty}(S) \tag{2.3}$$

Tale applicazione è chiamata parentesi di Poisson. E' un'applicazione binaria bilineare, antisimmetrica che soddisfa l'identità di Jacobi.

$$\{f,g\} = -\{g,f\}$$

$$\{f+h,g\} = \{f,g\} + \{h,g\}, \{f,g+h\} = \{f,g\} + \{f,h\}$$

$$\{f,\{g,h\}\} + \{g,\{h,f\}\} + \{h,\{f,g\}\} = 0$$

$$\forall f,g,h \in \mathscr{F}^{\infty}(S)$$

A causa di queste proprietà, le parentesi di Poisson definiscono su $\mathscr{F}^{\infty}(S)$ una struttura di algebra di Lie.

Un'altra proprietà fondamentale, è che le parentesi di Poisson agiscono sul prodotto di due funzioni $f \cdot g$ tramite la regola di Leibniz:

$$\{f \cdot g, h\} = f\{g, h\} + \{f, h\}g \tag{2.4}$$

Fissata una funzione $f \in \mathscr{F}^{\infty}(S)$, l'applicazione:

$$\{\bullet, f\}: \mathscr{F}^{\infty}(S) \to \mathscr{F}^{\infty}(S) \tag{2.5}$$

è una derivazione, a cui si può dare la forma di campo vettoriale definendo:

$$\{g,f\} = X_f g \tag{2.6}$$

Se f è l'Hamiltoniana del sistema fisico, allora il campo si dice **Hamiltoniano**. Sia $\eta^{\alpha} \in \mathscr{F}^{\infty}(S)$ un sistema di funzioni coordinate. Poichè $X_H = \dot{\eta}^{\alpha} \frac{\partial}{\partial \eta^{\alpha}}$, si vede subito che:

$$\{\eta^{\alpha}, H\} = X_H \eta^{\alpha} = \dot{\eta}^{\alpha} \frac{\partial}{\partial \eta^{\alpha}} \eta^{\alpha}$$
(2.7)

ovvero

$$X_H = \{\eta^{\alpha}, H\} \frac{\partial}{\partial \eta^{\alpha}}$$
(2.8)

La parentesi di Poisson tra due funzioni è

$$\{f,g\} = \frac{\partial f}{\partial \eta^{\alpha}} \{\eta^{\alpha},\eta^{\beta}\} \frac{\partial g}{\partial \eta^{\beta}}$$
(2.9)

Le parentesi di Poisson di η^{α} e η^{β} definiscono un tensore antisimmetrico due volte controvariante, detto tensore di Poisson:

$$\Lambda^{\alpha\beta} := \{\eta^{\alpha}, \eta^{\beta}\}$$
(2.10)

Dunque $\Lambda \equiv \Lambda^{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial \eta^{\alpha}} \otimes \frac{\partial}{\partial \eta^{\beta}}$, ovvero

$$\Lambda(df, dg) = \{f, g\} \tag{2.11}$$

Un campo vettoriale su S è detto *canonico* se è generatore infinitesimale di una trasformazione canonica.

Se la matrice $\Lambda^{\alpha\beta}$ è invertibile, allora si può introdurre un tensore antisimmetrico 2 volte covariante $\omega_{\alpha\beta}$ tale che $\Lambda^{\alpha\beta}\omega_{\beta\gamma} = \delta^{\alpha}_{\gamma}$. In tal modo si è dotato S di una struttura simplettica.

Poiché Λ deve rispettare lidentità di Jacobi, si ha che ω deve essere una 2-forma chiusa.

$$d\omega = 0 \tag{2.12}$$

 ω è dunque una 2-forma antisimmetrica, chiusa e non degenere e viene chiamata **forma** simplettica.

Avendo introdotto il tensore ω inverso della struttura di Poisson, la definizione di campo Hamiltoniano, data dalle equazioni (2.8) e (2.6), può essere riformulata in termini di ω . Un campo vettoriale X si dice localmente Hamiltoniano se è generatore infinitesimale di trasformazioni simplettiche cioè se la 2-forma si conserva lungo le curve integrali del campo

$$L_X \omega = 0 \tag{2.13}$$

Usando la formula di Cartan¹:

$$L_X\omega = i_X d\omega + d(i_X\omega) \tag{2.17}$$

Per cui, essendo $d\omega=0$ a causa della chiusura

$$L_X\omega = di_x\omega = 0$$

Un campo vettoriale X si dice globalmente Hamiltoniano se la 1-forma $i_X \omega$ non solo è chiusa, ma è anche esatta:

$$E_x \omega = dH \tag{2.18}$$

Si osservi che l'equazione (2.18) è equivalente alla (2.6) o alla (2.8), quando Λ è invertibile.

Si definisce **varietà simplettica** la struttura (M, ω) dove M è una varietà differenziabile di dimensione 2n e ω una 2-forma chiusa non degenere. In un sistema di coordinate canonico

$$\omega = \sum_{i=1}^{n} d\eta^{i} \wedge d\eta^{i+n} \tag{2.19}$$

oppure usando la convenzione classica di porre $\eta^i = q^i$ e $\eta^{i+n} = p^i$

$$\omega = dq^i \wedge dp_i \tag{2.20}$$

Allora si ottiene che:

$$\{f,g\} = \omega(X_f, X_g) = \omega(\Omega_{df}, X_g) = (i_{\Omega_{df}}\omega)(X_g) = df(X_g) = X_g f = L_{X_g} f$$
(2.21)

¹Sia V uno spazio vettoriale e $\Lambda^k V$ l'insieme delle k forme su V. Per $X \in V$ si definisce:

$$i_X : \Lambda^k \to \Lambda^{k-1} \tag{2.14}$$

il prodotto interno, ovvero una derivazione di grado -1 che a ogni k-forma associa una (k-1)-forma, data dalla contrazione della forma differenziale con il vettore associato al prodotto.

$$(i_X\omega)(X_1,\ldots,X_{p-1}) = \omega(X,X_1,\ldots,X_{p-1})$$
 (2.15)

Tale applicazione è lineare in ω e in X, anticommutativa, e rispetta la regola di Leibniz graduata:

$$i_X(\omega \wedge \gamma) = (i_X\omega) \wedge \gamma + (-1)^k \omega \wedge (i_X\gamma)$$
(2.16)

2.2 Campi vettoriali hamiltoniani e campi gradiente

Sia σ un'applicazione binaria bilineare su uno spazio vettoriale E, che identificheremo nel seguito con lo spazio vettoriale tangente alla varietà carrier della dinamica:

$$\sigma: E \times E \longrightarrow E \tag{2.22}$$

allora, dato un sistema di coordinate e_k :

$$e_k \cdot e_j = a_{jk}^l e_l \tag{2.23}$$

dove il tensore a_{jk}^l rappresenta le costanti di struttura. Indichiamo inoltre con E^* lo spazio vettoriale duale.

Poichè $E \subset \mathcal{L}in(E^*)$ e $E^* \subset \mathcal{L}in(E)$, allora lo spazio E si può identificare con il suo duale. I vettori e_k si possono vedere come funzioni sul duale tali che:

$$e^k(f) = f(e^k) \tag{2.24}$$

Allora indichiamo con \hat{e}_j , o più semplicemente con x_j , i vettori dello spazio considerato, visti come funzioni sul duale. Il tensore associato alle costanti di struttura può essere decomposto in un tensore simmetrico e uno antisimmetrico.

$$a_{jk}^{l} = c_{jk}^{l} + d_{jk}^{l} (2.25)$$

I campi tensoriali ad esso associato saranno:

$$\Lambda = \frac{1}{2} c_{jk}^l x_l \frac{\partial}{\partial x_j} \wedge \frac{\partial}{\partial x_k} \qquad \mathcal{R} = d_{jk}^l x^l \frac{\partial}{\partial x_j} \otimes \frac{\partial}{\partial x_k}$$
(2.26)

(Si definisce $v \wedge w = v \otimes w - w \otimes v$)

Tramite i due campi tensoriali
$$\Lambda \in \mathcal{R}$$
, si potrà associare a ogni funzione $f \in E^*$ un campo vettoriale hamiltoniano e un campo vettoriale Gradiente, che indicheremo con $\tilde{X}_f \in \tilde{Y}_f$. Questi due campi sono fondamentali per lo studio della dinamica sulla varietà dello spazio degli stati. Tali campi sono dati dal prodotto interno

$$\tilde{X}_f = i(df)\Lambda \qquad \tilde{Y}_f = i(df)\mathcal{R}$$
(2.27)

Inoltre Λ definisce una struttura di Poisson, come già visto in precedenza, poiché:

$$\Lambda(df, dg) = (i(df)\Lambda)(dg) = X_f g = \{f, g\}$$
(2.28)

Analogamente \mathcal{R} definirà un operazione binaria simmetrica. Le regole di commutazione tra i campi Hamiltoniani e campi gradiente sono le seguenti:

$$\left[X_f, X_g\right] = X_{\{f,g\}} \tag{2.29}$$

$$\left\lfloor Y_f, Y_g \right\rfloor = -X_{\{f,g\}} \tag{2.30}$$

$$\left[X_f, Y_g\right] = Y_{\{f,g\}} \tag{2.31}$$

Distribuzioni su una varietà

Definizione 1. Sia M una varietà n-dimensionale. Una distribuzione k-dimensionale è un sottoinsieme $D \subset TM$ del fibrato tangente tale che $D_p = D \cap T_pM$ è un sottospazio k-dimensionale di T_pM per ogni $p \in M$. La distribuzione si dice liscia se per ogni $p \in M$ esiste un intorno apero $U \subseteq M$ di p e k campi vettoriali locali Y_1, \dots, Y_k tali che $D_p = Span(Y_1(p), \dots, Y_k(p))$ per ogni $p \in U$. L'insieme dei kspazi vettoriali (Y_1, \dots, Y_k) si dice riferimento locale per D su U.

Detto $\mathcal{T}(U)$ l'insieme dei campi vettoriali su U, dove U è un aperto di una varietà M, una sezione locale di una distribuzione liscia D su $U \subseteq M$, è un campo vettoriale $X \in \mathscr{T}(U)$ tale che $X_p \in D_p$ per ogni $p \in U$. Chiamiamo $\mathscr{T}_D(U)$ l'insieme delle sezioni locali di D su U. La distribuzione D si dice involutiva se

$$[X,Y] \in \mathscr{T}_D(U) \ \forall X,Y \in \mathscr{T}_D(U)$$

$$(2.32)$$

Cioè $[X, Y] \in Span\{X_1, \cdots, X_K\}.$

Tornando al caso dei campi hamiltoniani e campi gradiente, poiché ne faremo uso in seguito, possiamo definire le distribuzioni:

$$D_{\Lambda} = span(X_f \mid f \in \mathscr{F}^{\infty}(S)) \tag{2.33}$$

$$D_{\mathcal{R}} = span(Y_f \mid f \in \mathscr{F}^{\infty}(S))$$
(2.34)

$$D_1 = span(X_f, Y_f \mid f \in \mathscr{F}^{\infty}(S)) = D_{\Lambda} + D_{\mathcal{R}}$$
(2.35)

Notiamo che le distribuzioni D_{Λ} e D_1 sono involutive mentre $D_{\mathcal{R}}$ non lo è.

2.3 Spazio degli stati

Nella descrizione di Heisenberg della meccanica quantistica, gli stati sono funzionali positivi normalizzati, sullo spazio delle osservabili. Ovvero si può vedere lo spazio degli stati come sottospazio del duale delle osservabili $S \subset O^*$.

Dati due stati $\varrho_1 e \varrho_2 e$ i coefficienti $\lambda_1, \lambda_2 \ge 0$, la combinazione $\lambda_1 \varrho_1 + \lambda_2 \varrho_2$ è ancora uno stato solo se vale la condizione $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$. Le uniche combinazioni possibili di stati sono combinazioni convesse quindi lo spazio degli stati non ha la struttura di spazio vettoriale.

Poichè la descrizione degli stati è equivalente alla descrizione algebrica degli operatori densità, è possibile classificare gli stati in base al rango dello stato densità corrispondente.

Sia P il sottoinsieme di O^* formato da funzionali \mathbb{R} -lineari positivi.

$$P = \bigcup_{k=1}^{n} P^k \tag{2.36}$$

dove P^k è lo strato formato da elementi di P di rango k. Ogni strato è una foglia della foliazione F_1 corrispondente alla distribuzione D_1 (2.35) generata dai campi hamiltoniani e gradiente. Allora, come visto in precedenza, lo spazio degli stati è una varietà stratificata

$$S = \bigcup_{k=1}^{n} D^k \tag{2.37}$$

essendo $D^k=P^k\cup\{\varrho\in O^* \ : \ \|\varrho\|=1\}.$

2.4 Dinamica sulla Palla di Bloch

Avendo dotato lo spazio degli stati di struttura di varietà, possiamo provare a descrivere la dinamica quantistica con procedimenti del tutto analoghi a quelli usati in meccanica classica. Sfruttando la struttura geometrica studiata nei paragrafi precedenti, possiamo infatti tentare un approccio radicalmente diverso da quelli usuali (Schrödinger e Heisenberg). Per restituire un'idea concreta di quanto detto nei capitoli precedenti, illustriamo, come esempio, l'evoluzione dinamica di un sistema quantistico a due livelli. Tale spazio degli stati, è rappresentato, come già abbondantemente visto, dalla Palla di Bloch. Gli strati sono il bordo (stati puri) di rango 1 e l'interno della sfera (stati misti) di rango 2.

$$S = D_1 \cup D_2 \tag{2.38}$$

essendo D_1 la superfice della palla e D_2 il suo interno. I campi tensoriali $\Lambda \in \mathcal{R}$ assumono la forma:

$$\Lambda = \frac{1}{2} \epsilon_{jkl} x^l \frac{\partial}{\partial x_j} \wedge \frac{\partial}{\partial x_k} \quad \mathcal{R} = \frac{\partial}{\partial x_j} \otimes \frac{\partial}{\partial x_j} - x_j x_k \frac{\partial}{\partial x_j} \otimes \frac{\partial}{\partial x_k}$$
(2.39)

Note queste espressioni, si possono ottenere i campi hamiltoniani e gradiente. Se per esempio consideriamo un'Hamiltoniana H associata a un campo magnetico $\vec{B} = (B^1, B^2, B^3)$. Allora

$$H = B^{j}\sigma_{j} \longrightarrow e_{H}(\varrho) = B^{j}x_{j} = \vec{B} \cdot \vec{x}$$
(2.40)

essendo $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ le coordinate di ϱ .

Il valore della funzione e_H calcolata nello stato ρ coincide con l'energia di questo stato. Fatte queste premesse, possiamo ottenere l'espressione analitica dei campi hamiltoniani e gradiente tramite i quali individueremo gli stati stazionari sulla palla di Bloch e studieremo la stabilità o del sistema durante l'evoluzione. I campi associati all'osservabile H sono:

$$i(dH)\Lambda = \epsilon_{jkl} x^l B^j \frac{\partial}{\partial x_k} = \tilde{X}_H \tag{2.41}$$

$$i(dH)\mathcal{R} = B^{j}\frac{\partial}{\partial x_{j}} - (\vec{B}\cdot\vec{x})x_{j}\frac{\partial}{\partial x_{j}} = \tilde{Y}_{H}$$
(2.42)

Gli stati stazionari associati a \tilde{X}_H sono quelli il cui vettore delle coordinate \vec{x} è parallelo al campo magnetico \vec{B} . In particolare gli unici stati stazionari puri sono gli autostati dell'Hamiltoniana H. Durante l'evoluzione dinamica del sistema governata da \tilde{X}_H , l'energia si conserva.

Per quanto riguarda invece l'evoluzione governata da \tilde{Y}_H , gli stati stazionari, di coordinate \vec{x}_s devono soddisfare la condizione

$$\vec{B} = (\vec{B} \cdot \vec{x}_s)\vec{x}_s \tag{2.43}$$

Una soluzione formale della (2.43) si può ottenere facendo la norma di entrambi i membri dell'equazione. Allora

$$\|\vec{B}\| = \|\vec{B}\| \|\vec{x}_s\|^2 |\cos\vartheta| \longrightarrow \|\vec{x}_s\|^2 |\cos\vartheta| = 1$$
(2.44)

essendo ϑ l'angolo tra \vec{B} e \vec{x}_s . Poiché ci troviamo sulla Palla di Bloch, di raggio unitario in \mathbb{R}^3 , le uniche soluzioni sono quelle per cui $\|\vec{x}_s\| = 1$ e $\cos \vartheta = \pm 1$. Di conseguenza

$$\vec{x}_s = \pm \|\vec{B}\|^{-1}\vec{B} \tag{2.45}$$



Figura 2.1:

Questi sono di nuovo auostati dell'Hamiltoniana.

Per quanto riguarda la stabilità del sistema, prendiamo in esame come varia l'energia lungo le curve integrali di \tilde{Y}_{-H} . Tale variazione sarà data, tenendo conto delle espressioni (2.40) e (2.42), da:

$$\tilde{Y}_{-H}(e_H) = -\|\vec{B}\|^2 + (\vec{B} \cdot \vec{x})^2 = \|\vec{B}\|^2 (-1 + \|\vec{x}\|^2 |\cos\vartheta|^2 \le 0$$
(2.46)

L'ugualianza è vera solo per gli stati stazionari che soddisfano la (2.45). Allora il ground state del sistema è stabile durante l'evoluzione, mentre lo stato eccitato è instabile. Il campo vettoriale gradiente sta descrivendo un processo fisico dissipativo. Il comportamento opposto, come l'evoluzione da uno stato eccitato stabile in un ground state instabile, si può ottenere invertendo il segno del campo, ovvero considerando \tilde{Y}_H . In questo caso stiamo modellizzando un sistema che riceve energia dall'ambiente.

Una caratteristica importante ell'evoluzione governata da \tilde{Y}_H , è che gli stati puri si conservano. Se prendessimo in esame un campo magnetico di componenti $\vec{B} = (0, 0, 1)$, il ground state e lo stato eccitato dell'Hamiltoniana corrisponderebbero rispettivamente al polo sud e al polo nord della Palla di Bloch. In figura 2.1 sono mostrati i campi hamiltoniani e gradiente di questo sistema: i poli sono stati stazionari per entrambi i campi; le curve integrali di \tilde{X}_H sono circonferenze attorno all'asse parallelo al campo magnetico mentre le curve integrali di \tilde{Y}_H vanno dallo stato eccitato al ground state. Come detto in precedenza, in entrambi i casi, lo strato degli stati puri, ovvero la superficie della Palla di Bloch, si conserva durante l'evoluzione. I campi hamiltoniani e gradiente associati alle funzioni coordinate x_j sono

$$\tilde{X}_j = \epsilon_{jkl} x_l \frac{\partial}{\partial x_k} \quad \tilde{Y}_j = \frac{\partial}{\partial x_j} - x_j x_k \frac{\partial}{\partial x_k} \quad j = 1, 2, 3$$
(2.47)

I commutatori di tali campi sono le seguenti:

$$[\tilde{X}_j, \tilde{X}_k] = \epsilon_{jkl} \tilde{X}_l \tag{2.48}$$

$$[\tilde{Y}_j, \tilde{Y}_k] = -\epsilon_{jkl} \tilde{X}_l \tag{2.49}$$

$$[\tilde{X}_j, \tilde{Y}_k] = \epsilon_{jkl} \tilde{Y}_l \tag{2.50}$$

Questi campi vettoriali chiudono l'algebra $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$. Generano inoltre, come abbiamo visto in precedenza due distribuzioni involutive

$$D_{\Lambda} = span(\tilde{X}_1, \tilde{X}_2, \tilde{X}_3) \tag{2.51}$$

$$D_1 = span(\tilde{X}_1, \tilde{X}_2, \tilde{X}_3, \tilde{Y}_1, \tilde{Y}_2, \tilde{Y}_3)$$
(2.52)

Alla distribuzione D_{Λ} è associata una foliazione della varietà \mathcal{F}_{Λ} le cui foglie sono sottovarietà simplettiche che corrispondono alle orbite del gruppo unitario. Alla distribuzione D_1 è invece associata la foliazione \mathcal{F}_1 le cui foglie sono l orbite

del gruppo speciale lineare. Dunque l'evoluzione governata dai campi hamiltoniani conserva lo spettro degli stati, mentre quella governata dai campi gradiente ne conserva il rango.

Conclusioni

Abbiamo visto che lo spazio degli stati in meccanica quantistica piò essere trattato come una varietà stratificata. La dimensione di questi strati è data dal rango delle matrici densità che rappresentano gli stati. Studiando le orbite del gruppo speciale lineare e del gruppo unitario abbiamo ottenuto il risultato che, per un sistema fisico a n livelli, per n > 2, il bordo topologico della varietà è a sua volta stratificato, motivo per cui non può essere trattato come un varietà differenziabile.

Quanto detto in precedenza trova un'applicazione fisica concreta, qualora si voglia descrivere l'evoluzione dinamica dei sistemi quantistici usando un approccio analogo al caso classico della dinamica sullo spazio delle fasi. Questo lavoro funge da base per lo studio di sistemi dinamici più complessi, quali quelli coinvolti in fenomeni di dissipazione e di decoerenza, in cui nel corso dell'evoluzione gli stati possono cambiare rango, passando da uno strato all altro della varietà. Risulta quindi comodo conoscere la struttura di base di questi spazi e quali campi governano eventuali evoluzioni unitarie su di essi.

Appendice Richiami di teoria dei gruppi

Gruppi e algebre di Lie

Gruppi di Lie

Definizione 1. Si definisce Gruppo un insieme G munito di un'operazione binaria * che a ogni coppia $(a, b) \in G \times G$ associa $a * b \in G$ che rispetta i seguenti assiomi:

- 1. a * (b * c) = (a * b) * c (Proprietà Associativa)
- 2. \exists elemento neutro $e : a * e = e * a = a \forall a \in G$
- 3. $\forall a \in G \exists a' tale che : a * a' = a' * a = e$

Un gruppo si dice **topologico** se è anche uno spazio topologico in cui le operazioni di gruppo sono continue. Essendo uno spazio topologico, si possono applicare le nozioni di continuità, compattezza e connessione.

Un **Gruppo di Lie** è un gruppo topologico che è anche una varietà differenziabile su cui le operazioni di gruppo sono differenziabili.

Gruppi continui di trasformazioni lineari di spazi vettoriali sono detti gruppi di Lie lineari. Alcuni esempi di Gruppi di Lie sono GL(n, K), SL(n, K), U(n), SO(n, k) ... Questi gruppi possono essere definiti sia sul Campo \mathbb{R} che sul campo \mathbb{C} .

Le matrici

$$R(\vartheta) = \left(\begin{array}{cc} \cos\vartheta & -\sin\vartheta\\ \sin\vartheta & \cos\vartheta \end{array}\right)$$

al variare del parametro ϑ formano il gruppo SO(2) delle rotazioni di un piano. Inoltre vale che $R(\vartheta)R(\varphi) = R(\vartheta + \varphi)$. Questo gruppo può essere rappresentato² da S^1 , il cerchio unitario in \mathbb{C} . \mathbb{R}^1 si può mappare su S^1 definendo:

$$\rho(x) = e^{2\pi i x}$$

La trasformazione è 1 a 1 localmente ma non globalmente, perche a più valori di x corrisponde lo stesso punto su S^1 . \mathbb{R}^1 è semplicemente connesso, S^1 non lo è. \mathbb{R}^1 si dice **ricoprimento universale** di S^1 .

Il ricoprimento universale di un gruppo topologico G connesso, è a sua volta un gruppo topologico semplicemente connesso.

²La rappresentazione di un gruppo G su uno spazio vettoriale V è un omomorfismo da G all'insieme delle trasformazioni lineari di V. Questa rappresentazione non deve sempre corrispondere a una matrice.

Il Gruppo delle rotazioni

Il gruppo delle rotazioni di uno spazio 3-dimensionale è SO(3). Una matrice $R \in SO(3)$ si può parametrizzare tramite un asse di rotazione \hat{n} e l'angolo ϑ di rotazione: $R = (\hat{n}, \vartheta)$. L'asse richiede 2 angoli per essere identificato quindi in totale SO(3)) è un gruppo a 3 parametri. Il gruppo si può rappresentare come una sfera solida di raggio π . Un punto P della sfera, che forma un angolo ϑ con l'origine, rappresenta una rotazione attorno all'asse \vec{OP} di angolo ϑ . Poichè i parametri variano su un insieme compatto, SO(3) è un gruppo compatto, la cui origine coincide con l'identità. Poichè i punti diametralmente opposti sulla sfera rappresentano la stessa rotazione, SO(3) non è semplicemente connesso, ma ammette un ricoprimento universale.

Il gruppo SO(3) si può rappresentare anche osservando che le rotazioni sono trasformazioni lineari che conservano il prodotto scalare.

$$(a,b) = \sum_{i} a^{i} b^{i}$$
$$(Ra,Rb) = (a,b) \rightarrow RR^{T} = \mathbb{1}$$

Poichè R ha determinante non nullo si ha che:

$$R^T = R^{-1}$$

O(3) è il gruppo delle matrici 3x3 ortogonali. SO(3) è il gruppo delle matrici 3x3 ortogonali con det(R) = 1. O(3) non è connesso ma è dato dall'unione:

$$O(3) = \{R : R \in SO(3)\} \cup \{-R : R \in SO(3)\}$$

Le matrici ortogonali che corrispondono a rotazioni antiorarie di \mathbb{R}^3 sono:

$$R_1(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$
$$R_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix}$$
$$R_3(\gamma) = \begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Cenni sul gruppo di Möbius

Il gruppo M di Möbius è il gruppo delle trasformazioni che mappano $\mathbb{C} \to \mathbb{C}$:

$$m(z) = \frac{az+b}{cz+d} \qquad \qquad ad-bc \neq 0$$

Data la condizione sui coefficienti, m(z) è invertibile, ovvero c'è un isomorfismo tra M e $GL(2, \mathbb{C})$.

$$\varrho: \left(\begin{array}{cc} a & b \\ c & d \end{array}\right) \to m(z) = \frac{az+b}{cz+d}$$

Osserviamo per $\forall \lambda \in \mathbb{C}$ le matrici $\lambda \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ di $GL(2, \mathbb{C})$ restituiscono la stessa trasformazione.

Inoltre :

$$det \left[\lambda \left(\begin{array}{cc} a & b \\ c & d \end{array} \right) \right] = \lambda^2 det \left(\begin{array}{cc} a & b \\ c & d \end{array} \right)$$

Per cui si può scegliere λ in due modi affinchè $det(\lambda A) = 1$.

Ogni trasformazione di Möbius è coperta da 2 matrici unitarie. Così come accade per SO(3) anche M non può essere semplicemente connesso. $SL(2, \mathbb{C})$ è il gruppo che ricopre M, ed essendo semplicemente connesso, è il suo ricoprimento universale. L'omomorfismo tra $SL(2, \mathbb{C})$ e M si ottiene in questo modo:

$$u' = au + bv \quad v' = cu + dv$$
$$z = \frac{u}{v} \qquad w = \frac{u'}{v'}$$
$$w = \frac{az + b}{cz + d}$$
(2.53)

La quantità $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ si chiama *spinore* ed è usata in meccanica quantistica per descrivere una particella con spin $\frac{1}{2}$.

Ricoprimento di SO(3)

Consideriamo un sottogruppo di M che corrisponde alla rotazione della sfera di Riemann. Un rotazione della sfera di Riemann corrisponde a una rotazione delle variabili $\chi - \eta - \zeta$. Ruotare attorno al terzo asse di un angolo γ , è una trasformazione data da $R_3(\gamma)$. La trasformazione di Möbius associata è : $w = ze^{i\gamma}$.

La matrice associata a w in $SL(2,\mathbb{C})$ è: ($e^{i\frac{\gamma}{2}} \quad 0 \quad \Big\rangle$

$$\pm \left(\begin{array}{cc} e^{-i\frac{\gamma}{2}} & 0\\ 0 & e^{-i\frac{\gamma}{2}} \end{array}\right)$$

Queste due matrici corrispondono alla stessa matrice $R_3(\gamma)$ di SO(3), che infatti non è semplicemente connesso. Vogliamo ora ottenere una forma per la trasformazione di Möbius anche di $R_1(\alpha)$ e di $R_2(\beta)$. Per ottenere la rotazione di β si svolgono 3 passaggi:

- 1. Rotazione dell'asse η verso $\zeta \operatorname{con} R_1(\frac{\pi}{2})$
- 2. Rotazione attorno a ζ di un angolo β
- 3. Rotazione di η verso $\zeta \operatorname{con} R_1(-\frac{\pi}{2})$

La trasformazione di Möebius associata a queste rotazioni è: $w(z) = -i\frac{z+i}{z-i}$

La matrice in $SL(2, \mathbb{C})$ corrispondente a w(z) è:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{cc} 1 & i \\ i & 1 \end{array} \right)$$

Definiamo la matrice:

$$U_{\eta}(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\beta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\beta}{2}} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

La matrice $U_{\eta}(\beta)$ corrisponde a $R_2(\beta)$ su SO(3). La trasformazione di Möebius associata alle rotazioni sul primo è:

$$w(z) = \frac{z-1}{z+1}$$

e la corrispondente matrice in $SL(2, \mathbb{C})$ è:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.54}$$

Da cui si arriva a definire:

$$U_{\eta}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\alpha}{2} & i\sin\frac{\alpha}{2} \\ i\sin\frac{\alpha}{2} & \cos\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}$$

Le 3 matrici di $SL(2, \mathbb{C})$ appena trovate mappano le rotazioni della sfera di Riemann, in corrispondenza 1 a 1 con lerotazioni di $SO(3, \mathbb{R})$). Queste tre matrici sono unitarie. Appartengono al gruppo SU(2) delle matrici 2x2 unitarie con determinante +1. Una matrice di SU(2) si può scrivere come combinazione di queste tre e viene mappata in un prodotto di matrici di rotazione di SO(3). Dunque SU(2) ricopre SO(3). Un elemento arbitrario di SU(2) ha la forma:

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix} \to |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

SU(2), visto come varietà, è la sfera S^3 , che è semplicemente connessa,quindi SU(2)è il ricoprimento universale di SO(3).

Le tre matrici si possono scrivere come:

$$U_{\chi}(\alpha) = e^{i\frac{\alpha}{2}\sigma_1} \quad U_{\eta}(\beta) = e^{-i\frac{\beta}{2}\sigma_2} \quad U_{\zeta}(\gamma) = e^{i\frac{\gamma}{2}\sigma_3}$$

Infatti:

$$U_{\chi}(\alpha) = e^{\begin{pmatrix} 0 & i\frac{\alpha}{2} \\ i\frac{\alpha}{2} & 0 \end{pmatrix}} = \sum_{k} \frac{\begin{pmatrix} 0 & i\frac{\alpha}{2} \\ -i\frac{\alpha}{2} & 0 \end{pmatrix}^{k}}{k!} =$$
$$= \mathbb{1}_{2} + \begin{pmatrix} 0 & i\frac{\alpha}{2} \\ -i\frac{\alpha}{2} & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\frac{\alpha^{2}}{4} & 0 \\ 0 & -\frac{\alpha^{2}}{4} \end{pmatrix} + \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\alpha^{3}}{8} \\ i\frac{\alpha^{3}}{8} & 0 \end{pmatrix} + \dots =$$
$$= \begin{pmatrix} \cos\frac{\alpha}{2} & i\sin\frac{\alpha}{2} \\ -i\sin\frac{\alpha}{2} & \cos\frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}$$

Algebre di Lie

Sappiamo che un Gruppo di Lie G è una varietà differenziabile, tale che le operazioni di moltiplicazione e inversione sono applicazioni differenziabili:

$$\mu: G \times G \to G \quad \mu(x, y) = xy$$
$$\nu: G \to G \quad \nu(x) = x^{-1}$$

Essendo G una varietà differenziabile, ha senso parlare di spazi tangenti alla varietà. In particolare, lo spazio tangente all'identità del gruppo si chiama *algebra di Lie*. Nel caso dei gruppi lineari, l'algebra si può calcolare esplicitamente differenziando le curve passanti per lì'identità.

Per esempio, in SO(3), una base canonica è data dalle matrici $R_1(\alpha)$, $R_2(\beta)$ e $R_3(\gamma)$. La loro derivata nell'origine è $L_j = \dot{R}_j(0)$ sarà rispettivamente:

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Queste matrici formano la base dell'algebra $\mathfrak{so}(3)$. A loro volta generano un sottogruppo a un parametro tramite l'esponenziazione $R_j(\alpha) = e^{\alpha L_j}$. Si dice che le matrici L_j sono i **generatori infinitesimali** del gruppo di Lie SO(3).

Definizione 1. Un'algebra di Lie è uno spazio vettoriale V che, a causa delle strutture di gruppo e di varietà associate, eredita una ricca struttura algebrica. Sullo spazio V è, infatti, definita un'applicazione:

$$[\bullet,\bullet]:V\times V\to V$$

detta Parentesi di Lie, che soddisfa le seguenti proprietà:

- 1. $[x, \alpha y + \beta z] = \alpha [x, y] + \beta [x, z]$
- 2. [x, y] = -[y, x]
- 3. [x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0

Un'algebra di Lie si dice **matriciale** se la parentesi di Lie sopra definita è data dal Commutatore tra matrici.

Costanti di struttura Sia $\{E_i\}$ una base per l'algebra $\mathfrak{g} \in [E_i, E_j] \in \mathfrak{g}$. Allora:

$$[E_i, E_j] = C_{ij}^k E_k$$

Le grandezze C_{ij}^k si chiamano *Costanti di struttura* dell'algebra. Vista l'antisimmetria delle Parentesi di Lie vale che:

$$C_{ij}^k = -C_{ji}^k$$

Inoltre per l'identità di Jacobi:

$$C_{ij}^{m}C_{mk}^{r} + C_{jk}^{m}C_{mi}^{r} + C_{ki}^{m}C_{mj}^{r} = 0$$

Esempi di Algebre di Lie

Un esempio banale di algebra di Lie è \mathbb{R}^3 munito di prodotto vettoriale:

$$[X,Y] = X \times Y$$

Se $(E_1, E_2.E_3)$ una base ortonormale per \mathbb{R}^3 , segue che:

$$E_i \times E_k = \varepsilon_{ikl} E_l$$

dove la quantità ε_{jkl} è il simbolo di Levi-Civita ed è un tensore antisimmetrico, 3 volte covariante.

Un altro esempio è l'algebra delle matrici di SO(3) ovvero $L_j = \dot{R}(0)$. I commutatori delle L_j restituiscono i seguenti risultati:

$$[L_j, L_k] = \varepsilon_{jkl} L_l$$

Questa è l'algebra delle rotazioni $\mathfrak{so}(3)$.

Le due algebre appena viste sono chiaramente isomorfe, ovvero esiste $\varrho : \mathfrak{g}_1 \to \mathfrak{g}_2$ tale che:

$$\varrho(\alpha x + \beta y) = \alpha \varrho(x) + \beta \varrho(y)$$
$$[\varrho(x), \varrho(y)]_2 = \varrho\left([x, y]_1\right)$$
(2.55)

dove $[\bullet, \bullet]_1$ e $[\bullet, \bullet]_2$ indicano rispettivamente le parentesi definite su \mathfrak{g}_1 e \mathfrak{g}_2 . Un terzo esempio è l'algebra di $\mathfrak{su}(2)$ le cui matrici di base sono:

$$E_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$
$$E_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
$$E_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

Si nota che:

$$E_j = -\frac{1}{2}\sigma_j$$

Ogni elemento X di SU(2) si puo scrivere come combinazioni di E_j con coefficienti reali.

L'insieme delle matrici 2×2 a traccia nulla forma l'algebra di Lie complessa $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$. Poichè le matrici E_j hanno traccia nulla, formano una base per $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$. Allora $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ può ottenersi come coniugio di $\mathfrak{su}(2)$. Ogni elemento di $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ si può scrivere come combinazione di matrici di $\mathfrak{su}(2)$ con coefficienti complessi.

Rappresentazione di algebre di Lie

Le algebre di Lie sono spesso usate come operatori su spazi vettoriali, in cui l'operazione che funge da Parentesi di Lie è il commutatore. Ad esempio, la classe di operatori differenziali che agisce su $\mathbb{C}^{\infty}(\mathbb{R}^3)$ data da:

$$R_k = x^j \frac{\partial}{\partial x^i} - x^i \frac{\partial}{\partial x^j} \quad [R_j, R_k] = \varepsilon_{jkl} R_l$$

restiruisce una rappresentazione ∞ -dimensionale si $\mathfrak{so}(3)$.

Definizione 1. Una rappresentazione di un'algebra di Lie \mathfrak{g} su uno spazio vettoriale V è una funzione ϱ da \mathfrak{g} allo spazio delle trasformazioni lineari su V, tale che:

- $\varrho(\alpha x + \beta y) = \alpha \varrho(x) + \beta \varrho(y)$
- $\varrho([x,y]_g) = \varrho(x)\varrho(y) \varrho(y)\varrho(x)$

Rappresentazione aggiunta

Sia g un'algebra su un gruppo di Lie e $X \in \mathfrak{g}$. L'operatore che mappa Y in [X, Y] è una trasformazione lineare da g in sè stesso. Per l'identità di Jacobi vale che

$$ad[X,Y] = [adX,adY]$$

La rappresentazione di X si chiama rappresentazione aggiunta e restituisce una rappresentazione matriciale dell'algebra. Se $\{E_i\}$ è una base per g allora:

$$adE_i(E_j) = [E_i, E_j] = C_{ij}^k E_k$$
 (2.56)

La matrice di trasformazione è :

$$\left(M_i\right)_{jk} = C^j_{ik}$$

La matrice aggiunta dell'algebra $\mathfrak{so}(3)$ è :

$$\left(M_i\right)_{jk} = \varepsilon_{ijk} \tag{2.57}$$

Gruppi e Algebre di Lie: approccio matriciale

Generatori Infinitesimali

Se \mathfrak{G} è un gruppo di Lie di matrici, gli elementi della sua algebra \mathfrak{g} si possono ottenere differenziando le curve delle matrici. Per esempio, in SO(2):

$$R(\vartheta) = \left(\begin{array}{cc} \cos\vartheta & -\sin\vartheta\\ \sin\vartheta & \cos\vartheta \end{array}\right)$$

Il vettore tangente nell'identità è:

$$\delta R = \dot{R}(0) = \left(\begin{array}{cc} 0 & -1\\ 1 & 0 \end{array}\right)$$

R è un gruppo a un parametro: $R(\vartheta + \varphi) = R(\vartheta)R(\varphi)$.

$$L = \dot{R}(0) \rightarrow \frac{dR}{d\vartheta} = LR(\vartheta)$$
 (2.58)

 $R(\vartheta)$ è la soluzione di un sistema di equazioni differenziali ordinarie a coefficienti costanti. $R(\vartheta) = e^{\vartheta L} = \mathbb{1} + \vartheta L + \frac{1}{2}\vartheta^2 L^2 + o(3)\cdots$ Questa serie di Taylor converge sempre. Per un gruppo a un parametro, si definisce **generatore infinitesimale** del gruppo la quantità

$$L = \dot{R}(0)$$

Poichè la funzione che mappa $B \to log(B)$ è analitica per $||B - \mathbb{1}|| < 1$, e^{zB} è definito $\forall z \in \mathbb{C}$ e $\forall B$ vicino all'identità. La rappresentazione dell'aggiunto è data da adA(B) = [A, B]. Definendo:

$$\varrho_{\vartheta}(B) = e^{\vartheta A} B e^{-\vartheta A}$$

Differenziando questa espressione si ottiene:

$$\frac{d}{d\vartheta}\varrho_\vartheta(B) = [A, \varrho_\vartheta(B)] = adA(\varrho_\vartheta(B))$$

Risolvendo si ottiene:

$$\varrho_{\vartheta}(B) = \mathbb{1} + \vartheta[A, B] + \frac{\vartheta^2}{2}[A, [A, B]] + o(3) = e^{adA}(B)$$

Sia A(t) una matrice i cui valori sono funzioni della variabile t. Si dimostra che se

$$B(s,t) = e^{sA(t)} \frac{d}{dt} e^{-sA(t)}$$

allora

•

$$\frac{\partial B}{\partial s} = [A, B] - \dot{A}(t)$$

Teorema 1. Sia \mathfrak{g} un algebra di Lie generata da $\mathscr{L}_1, \cdots, \mathscr{L}_n$. Allora $e^{\vartheta_1 \mathscr{L}_1 + \cdots + \vartheta_n \mathscr{L}_n}$ genera un Gruppo di Lie lineare per $|\vartheta|$ sufficientemente piccolo.

Questo teorema non vale nel caso globale: non è detto che ogni elemento di G si possa ottenere tramite l'esponenziazione di elementi dell'algebra.

Bibliografia

- [1] Piero Caldirola, (1982) "Introduzione alla fisica teorica", UTET
- [2] G. Marmo, G. Esposito, G. Sudarshan (2010) "*From Classical to Quantum Mechanics: an introduction to the formalism, foundations and applications*", *Cambridge University Press*
- [3] J.F. Cariñena, J. Clemente-Gallardo, J.A. Jover-Galtier, G. Marmo (2017) "Tensorial dynamics on the space of quantum states", J. Phys. A: Math. Theor., 50, 365301, 2017
- [4] VladimirI. Man'ko, Giuseppe Marmo, Franco Ventriglia, Patrizia Vitale (2017) "Metric on the space of quantum states from relative entropy. Tomographic reconstruction", J. Phys. A: Math. Theor. 50 (2017) 335302
- [5] L. Boya, K. Dixit (2008) "Geometry of density matrix states", Phys. Rev. A 10.1103/PhysRevA.78.042108
- [6] S. G. Schrimer, T. Zhang, J. V. Leahy (2004) "Orbits od quantum states and geometry of Bloch vectors for N-level system", J. Phys., A 37, 1389
- [7] Marco Abate, Francesca Tovena (2011) "Geometria Differenziale", Springer