

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

Studio sulla bontà dell'approssimazione perturbativa
per l'oscillatore anarmonico

Relatore:
Prof. Michele Cicoli

Presentata da:
Sofia Panagiota Corbà

Anno Accademico 2015/2016

Abstract

Nell'ambito della meccanica quantistica è stato sviluppato uno strumento di calcolo al fine di studiare sistemi per i quali è troppo difficile risolvere il problema di Schrödinger. Esso si basa sull'idea di considerare un sistema semplice, totalmente risolvibile, e perturbarlo fino ad ottenere un'Hamiltoniana simile a quella che si vuole studiare. In questo modo le soluzioni del sistema più complicato sono le soluzioni note del problema semplice corrette da sviluppi in serie della perturbazione. Nonostante il grande successo della Teoria perturbativa, essendo una tecnica di approssimazione, presenta delle limitazioni e non può essere usata in ogni circostanza.

In questo lavoro di tesi è stata valutata l'efficacia della Teoria perturbativa ricercando la compatibilità tra le soluzioni trovate col metodo analitico e quelle esatte ottenute numericamente. A tale scopo è stato usato il sistema fisico dell'oscillatore anarmonico, ovvero un oscillatore armonico standard sottoposto ad una perturbazione quartica. Per l'analisi numerica invece è stato utilizzato il programma *Wolfram Mathematica*. La trattazione seguita ha dimostrato che la Teoria perturbativa funziona molto bene in condizioni di bassa energia e di piccole perturbazioni. Nel momento in cui il livello energetico aumenta e l'intensità della perturbazione diventa significativa, i risultati analitici cominciano a divergere da quelli ottenuti numericamente.

Indice

1	Fondamenti della Meccanica Quantistica	7
1.1	Equazione di Schrödinger	10
1.2	Formulazione operatoriale	16
1.3	Interpretazione fisica	19
1.4	Evoluzione temporale e rappresentazioni	21
2	L'oscillatore armonico quantistico	25
2.1	Soluzione dell'equazione di Schrödinger: metodo analitico	26
2.2	Soluzione dell'equazione di Schrödinger: metodo operatoriale	32
2.3	Rappresentazione di Heisenberg	40
2.4	L'importanza dell'oscillatore armonico	41
3	Teoria perturbativa indipendente dal tempo	43
3.1	Caso generale	44
3.2	Caso non degenere	52
4	Studio perturbativo dell'oscillatore anarmonico	57
4.1	Approssimazione perturbativa	58
4.2	Confronto con la soluzione esatta	67
4.3	Interpretazione fisica	70
	Bibliografia	77

Capitolo 1

Fondamenti della Meccanica Quantistica

Nei primi decenni del secolo scorso si svilupparono due grandi teorie che rivoluzionarono la fisica: la Teoria della Relatività e la Teoria dei Quanti. La prima, creazione di Albert Einstein, è suddivisa in due parti: la Teoria della Relatività Ristretta, pubblicata nel 1905, e la Teoria della Relatività Generale, pubblicata nel 1915.

La Teoria dei Quanti nasce con il contributo di diversi scienziati, a cominciare da Max Planck, nel 1900, che fu il primo a introdurre nella fisica il concetto di quanto di energia. Parlando in una riunione della Società tedesca di Fisica egli affermò che ci si poteva liberare dai paradossi che caratterizzavano la teoria classica dell'emissione e dell'assorbimento della luce da parte dei corpi materiali, ammettendo che l'energia raggiante poteva esistere soltanto sotto forma di quantità discrete. Planck, con tale postulato, diede la soluzione al problema del corpo nero in quanto si poteva evitare il pericolo della catastrofe ultravioletta se si accettava la quantizzazione dell'energia delle onde elettromagnetiche e il suo rapporto di proporzionalità con la corrispondente frequenza. Tuttavia, egli non pensava ai quanti energetici come degli oggetti fisici, ma li considerava soltanto pure strutture matematiche astratte.

Cinque anni dopo Albert Einstein, applicando con successo l'idea dei quanti per spiegare le leggi empiriche dell'effetto fotoelettrico, concretizzò la loro natura fisica. Più precisamente, nella sua conferenza del 1909 affermò che la luce ha natura duale, corpuscolare e ondulatoria. Egli, inoltre, fu interessato a capire se il principio di dualità si poteva applicare alla materia come alla luce. Più tardi, nel 1923, Arthur Compton eseguì il suo famoso esperimento dimostrando l'analogia tra il principio che regola la collisione di due sfere elastiche e quello della diffusione di raggi X da parte di elettroni liberi, confermando le proprietà corpuscolari dei fotoni.

Attraverso il lavoro portato avanti da Ernest Rutherford, nel 1911 si accettò il modello atomico che prevedeva orbite circolari dell'elettrone attorno al nucleo. In tal modo, però, le contraddizioni della fisica classica diventarono ancora più evidenti, in quanto non si riusciva a spiegare la stabilità degli atomi. Per dare una soluzione a questo problema, Niels Bohr, nel 1913, estese l'idea di Planck della quantizzazione dell'energia raggiante,

alla descrizione dell'energia meccanica degli elettroni all'interno di un atomo. Nel 1925 Louis de Broglie pubblicò uno studio in cui dava un'interpretazione del tutto nuova delle orbite quantiche di Bohr. Egli divenne famoso per aver dato inizio alla nuova teoria dei quanti. Ispirato dal programma di dualità avviato da Einstein ipotizzò che anche la materia stessa potesse avere sia proprietà di particella sia di onda. Nonostante fosse eretica l'idea era del tutto avallata dalle prove sperimentali fornite da Davisson e Germer nel 1927. Un anno dopo la loro pubblicazione le idee di de Broglie vennero sviluppate e messe in forma matematica più precisa da Erwin Schrödinger, la cui teoria divenne nota come Meccanica Ondulatoria. Egli dimostrò che le regole introdotte a priori da Bohr nella sua teoria per l'atomo di idrogeno erano semplici conseguenze della sua equazione. Schrödinger era convinto di aver elaborato una teoria capace di penetrare nell'essenza stessa delle leggi quantiche, senza necessariamente portare a una rottura con la scienza classica. A suo avviso la meccanica tradizionale non era in grado di analizzare fenomeni fisici connessi a orbite con dimensioni molto piccole senza incorrere in paradossi. Questo implicava la necessità di ristrutturare la meccanica restando nel quadro della teoria Hamiltoniana e sviluppando uno schema ondulatorio coerente. Anziché seguire un punto rappresentativo, Schrödinger suggeriva di rappresentare il fenomeno in esame mediante la propagazione di onde.

Contemporaneamente alla pubblicazione del lavoro di Schrödinger sulla meccanica ondulatoria appare lo scritto di Heisenberg, allora ancora molto giovane, che elaborò un metodo per affrontare i problemi quantici servendosi dell'algebra non commutativa. La comparsa simultanea dei lavori di Schrödinger e Heisenberg su due diverse riviste tedesche sorprese il mondo della fisica teorica. I due approcci portavano agli stessi risultati ma erano molto diversi tra loro. Anche le interpretazioni sovrapposte ai due schemi matematici erano tra loro alternative. Schrödinger era fortemente incline a costruire una spiegazione quantica che non si distaccasse dalla meccanica classica, mentre i sostenitori dell'algebra delle matrici erano convinti a tracciare una linea netta di confine tra la nuova teoria e il passato.

Con lo sviluppo della nuova teoria dei quanti i fisici si trovarono di fronte a difficili questioni filosofiche. La visione dell'elettrone come un'onda era in contraddizione con tutto quello che gli scienziati sapevano su di esso. Così, malgrado le onde quantiche riuscissero a descrivere correttamente l'atomo di idrogeno, non sembrava possibile che esse potessero rappresentare un elettrone che si muove nello spazio aperto. A questi problemi concettuali cercò di dare soluzione Max Born dando alla meccanica quantistica un'interpretazione in termini probabilistici. Egli, infatti, affermò che la funzione d'onda non descrive l'elettrone in quanto tale ma la probabilità di trovarlo in una determinata regione dello spazio. Tale probabilità è rappresentata dal modulo quadro della soluzione dell'equazione di Schrödinger.

L'idea di Born venne sostenuta da Heisenberg, il quale, nel 1927, enunciò il principio di indeterminazione. Questo si basa sul fatto che l'atto di osservazione di un elettrone introduce necessariamente un'incertezza, la quale non è dovuta a una inadeguatezza degli strumenti, ma a una legge della natura. Infatti, il processo di misura della posizione di un elettrone implica dirigervi sopra un raggio di luce e quindi dei fotoni che collidono

su di esso rendendo incerto l'esito. Di conseguenza, se, in seguito ad una misurazione, l'elettrone ha una posizione precisa, non ha in generale nessuna velocità determinata. Viceversa, se ha una velocità definita diventa indeterminata la sua posizione.

L'inizio della meccanica quantistica non fu affatto semplice in quanto le idee che rifletteva erano in profondo disaccordo con l'intuito che fino a quel momento caratterizzava le teorie fisiche. Tuttavia, in pochi anni, la nuova idea della quantizzazione dell'energia si consolidò, sia nella fisica teorica che in quella sperimentale.

1.1 Equazione di Schrödinger

Partendo dall'ipotesi di de Broglie secondo cui ad ogni particella di massa m e velocità v sono associate delle proprietà ondulatorie, come la lunghezza d'onda

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (1.1.1)$$

dove $h = 6.626 \times 10^{-34} J \cdot s$ è la costante di Planck, Schrödinger ricavò l'equazione che governa la dinamica dei sistemi quantistici

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi \quad (1.1.2)$$

con $\hbar = h/2\pi$.

La soluzione di tale equazione è la funzione d'onda ψ , la quale, però, non essendo misurabile non ha un significato fisico. Ciò che veramente descrive una quantità reale è il suo modulo quadro, che rappresenta la densità di probabilità di trovare la particella in una determinata regione di spazio. Di conseguenza, $|\psi|^2 d^3x$ è la probabilità che una misura eseguita sul sistema dia valori delle coordinate contenuti nell'elemento d^3x dello spazio delle configurazioni. Il valore di aspettazione di un osservabile è la media di misure ripetute su un insieme di sistemi preparati in modo identico. In generale esso è dato da

$$\langle Q \rangle = \int_{\mathcal{D}} \psi^* Q \psi d^3x \quad (1.1.3)$$

dove Q è l'operatore associato all'osservabile. Per le principali grandezze fisiche i valori di aspettazione sono dati dalle

$$\langle \mathbf{q} \rangle = \int \psi^* \mathbf{x} \psi d^3x \quad (1.1.4a)$$

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \psi^* (-i\hbar \nabla) \psi d^3x \quad (1.1.4b)$$

$$\langle \mathbf{l} \rangle = \int \psi^* (-i\hbar \mathbf{x} \times \nabla) \psi d^3x \quad (1.1.4c)$$

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi \right) d^3x \quad (1.1.4d)$$

L'equazione di Schrödinger nella forma (1.1.2) è piuttosto complicata da risolvere. Con il presupposto che il potenziale U non dipenda dal tempo e conducendo un'ipotesi di lavoro sulla forma della funzione d'onda si separano le variabili spaziali e temporali e si semplifica l'equazione. Supponendo, infatti, $\psi(\mathbf{x}, t) = \alpha(t)\phi(\mathbf{x})$ e sostituendola nella (1.1.2) si ha

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\alpha(t)\phi(\mathbf{x})) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (\alpha(t)\phi(\mathbf{x})) + U\alpha(t)\phi(\mathbf{x}) \Rightarrow$$

$$i\hbar\phi(\mathbf{x})\frac{d\alpha(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\alpha(t)\nabla^2\phi(\mathbf{x}) + U\alpha(t)\phi(\mathbf{x}) \Rightarrow$$

moltiplicando il tutto per $\frac{1}{\phi(\mathbf{x})\alpha(t)}$ si ottiene

$$i\hbar\frac{1}{\alpha(t)}\frac{d\alpha(t)}{dt} = \frac{1}{\phi(\mathbf{x})}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{x}) + U\phi(\mathbf{x})\right) \Rightarrow$$

Notando che le due espressioni dell'uguaglianza dipendono da variabili diverse si conclude che sono delle costanti.

$$i\hbar\frac{1}{\alpha(t)}\frac{d\alpha(t)}{dt} = w$$

$$\frac{1}{\phi(\mathbf{x})}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{x}) + U\phi(\mathbf{x})\right) = w$$

■

Si ha quindi

$$\alpha(t) = \exp\left(-\frac{iwt}{\hbar}\right) \quad (1.1.5)$$

dove si può assumere $\alpha(0) = 1$ inglobando $\alpha(0)$ in ϕ in quanto non cambia il significato fisico e

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{x}) + U\phi(\mathbf{x}) = w\phi(\mathbf{x}) \quad (1.1.6)$$

Da un'analisi dimensionale si conclude che w ha le dimensioni di un'energia. La (1.1.6) è chiamata *equazione di Schrödinger indipendente dal tempo* e costituisce un problema agli autovalori per l'operatore Hamiltoniano. Risolvendola si ottengono le funzioni d'onda stazionarie $\phi(\mathbf{x})$.

La soluzione totale quindi si scrive come

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \exp\left(-\frac{iwt}{\hbar}\right)\phi(\mathbf{x}) \quad (1.1.7)$$

Quando, come nel nostro caso, l'evoluzione temporale della funzione d'onda avviene tramite la moltiplicazione per una fase, allora il modulo quadro della funzione d'onda totale non dipende dal tempo e di conseguenza neanche i valori medi delle principali grandezze fisiche. Dunque, gli stati descritti da autofunzioni, soluzioni del problema agli autovalori per l'operatore Hamiltoniano, vengono chiamati stazionari e corrispondono a valori dell'energia determinati.

Una funzione d'onda stazionaria $\phi(\mathbf{x})$ deve essere monodroma e continua in tutto lo spazio, anche nei punti di discontinuità dell'energia potenziale. In questi ultimi è richiesta in aggiunta la continuità della sua derivata. Altre proprietà che devono essere soddisfatte si specificano a seconda che la particella sia confinata o meno.

► I casi in cui si ha una particella confinata in una regione \mathcal{D} dello spazio delle configurazioni a causa di un potenziale forte sono molto frequenti.

Se $\phi(\mathbf{x})$ è una soluzione dell'equazione, allora anche $A\phi(\mathbf{x})$ lo è, con A una costante. Si può dunque sempre scegliere una costante tale da soddisfare la condizione di normalizzazione

$$\int_{\mathcal{D}} |\phi(\mathbf{x})|^2 d^3x = 1 \quad (1.1.8)$$

Infatti, la somma delle probabilità di tutti i valori possibili delle coordinate deve per definizione essere uguale a uno. Partendo dal presupposto che i valori medi degli osservabili devono essere reali, in quanto descrivono delle grandezze fisiche, si dimostra che la funzione d'onda stazionaria si annulla sulla frontiera della regione permessa.

Risolviendo l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo si ottengono un insieme infinito di funzioni d'onda stazionarie ϕ e per ognuna di esse il valore energetico w corrispondente allo stato da lei rappresentato. I valori energetici devono essere reali e maggiori strettamente del minimo che il potenziale presenta nella regione confinata. Tuttavia, non a tutti i valori energetici corrispondono delle funzioni d'onda stazionarie che soddisfano sia l'equazione di Schrödinger che le condizioni elencate in precedenza. Le soluzioni di w alle quali corrispondono delle funzioni d'onda accettate formano una sequenza discreta $w_n, n = 1, 2, \dots$ di valori chiamati *autovalori energetici*, i quali iniziano sopra al minimo del potenziale e si estendono all'infinito. L'insieme di tali valori prende il nome di *spettro energetico*. Le funzioni d'onda stazionarie corrispondenti agli autovalori energetici vengono chiamate autofunzioni. Esse sono ortogonali tra loro, di conseguenza

$$\int_{\mathcal{D}} \phi_r^* \phi_s d^3x = \delta_{r,s} \quad (1.1.9)$$

dove $\delta_{r,s}$ è la *delta* di Kronecker¹.

Inoltre, secondo il postulato della meccanica quantistica, lo spazio delle autofunzioni è completo, cioè, ogni funzione d'onda stazionaria è limite di una serie di autofunzioni

$$\phi = \sum_r \phi_r c_r \quad (1.1.10)$$

con

$$c_r = \int_{\mathcal{D}} \phi_r^* \phi d^3x \quad (1.1.11)$$

Riassumendo, la soluzione più generale dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo si scrive come combinazione lineare delle autofunzioni ortogonali ottenute come soluzioni separabili del problema di Schrödinger stazionario. Tali autofunzioni formano una base ortonormale dello spazio vettoriale infinito dimensionale di funzioni complesse quadrato sommabili. Queste caratteristiche si ritrovano nello spazio di *Hilbert* \mathcal{H} e tale formalizzazione, come verrà descritto più dettagliatamente nella sezione successiva, implica lo sviluppo di un formalismo matematico introdotto da Dirac e molto utile nello

¹ $\delta_{r,s} = \begin{cases} 1, & \text{se } r = s \\ 0, & \text{se } r \neq s \end{cases}$

studio dei sistemi quantistici.

Una particella limitata, in meccanica quantistica, può trovarsi anche nelle regioni dello spazio dove l'energia totale è minore dell'energia potenziale. In queste regioni, infatti, anche se la probabilità di presenza della particella tende rapidamente a zero, essa non è identicamente nulla. Questo effetto, noto come *effetto tunnel*, è puramente quantistico e non può in nessun modo verificarsi nell'ambito della meccanica classica.

► Quando il dominio è illimitato la soluzione dell'equazione di Schrödinger stazionaria è una generalizzazione di quella ottenuta nel caso limitato. Durante questo passaggio lo spettro energetico diventa continuo e le autofunzioni si estendono all'infinito spaziale rimanendo limitate. Esse non sono normalizzabili, quindi non appartengono allo spazio di Hilbert, in quanto si perde la quadrato sommabilità, e non hanno di conseguenza una interpretazione probabilistica o una rappresentazione di stati fisicamente possibili. Il rapporto dei quadrati delle funzioni d'onda in due diversi punti dello spazio delle configurazioni, determina la probabilità relativa dei corrispondenti valori delle coordinate. Lo spazio delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo, in questo caso, è lo spazio di *Hilbert generalizzato*, indicato con \mathcal{H}' , il quale contiene lo spazio di Hilbert classico e nel quale quest'ultimo è denso. Di conseguenza, gli elementi dello spazio \mathcal{H}' possono essere rappresentati da serie di elementi in \mathcal{H} . Nel moto infinito le autofunzioni soddisfano le proprietà di ortonormalità e completezza generalizzate

$$\int_{\mathcal{D}} \phi_{\rho}^* \phi_{\rho'} d^3x = N(\rho') \delta(\rho - \rho') \quad (1.1.12)$$

dove $N(\rho')$ è una costante di normalizzazione e $\delta(\rho - \rho')$ la *delta* di Dirac².

$$\phi = \int \frac{1}{N(\rho)} c_{\rho} \phi_{\rho} d\rho \quad (1.1.13)$$

con

$$c_{\rho} = \int \phi_{\rho}^* \phi d^3x \quad (1.1.14)$$

► Il caso più generale si riscontra quando il dominio ha delle dimensioni che restano finite e altre invece che divergono. In tal caso, lo spettro energetico ha una parte discreta e una continua, e le diverse soluzioni viste separatamente in precedenza si compongono in una più generale

$$\int_{\mathcal{D}} \phi_{i,\rho}^* \phi_{j,\sigma} d^3x = N_j(\sigma) \delta_{i,j} \delta(\rho - \sigma) \quad (1.1.15)$$

$$\phi = \sum_i \int \frac{1}{N_i(\rho)} c_{i,\rho} \phi_{i,\rho} d\rho \quad (1.1.16)$$

² $\delta(\rho - \rho') = \begin{cases} \infty, & \text{se } \rho = \rho' \\ 0, & \text{se } \rho \neq \rho' \end{cases}$

con

$$c_{i,\rho} = \int_{\mathcal{D}} \phi_{i,\rho}^* \phi d^3x \quad (1.1.17)$$

Le soluzioni più generali appartengono allo spazio di Hilbert generalizzato, che può rappresentare sia gli stati legati dei domini limitati, che quelli corrispondenti ai domini non limitati, in quanto lo spazio di Hilbert classico è contenuto in esso.

Nel caso più generale la soluzione totale dell'equazione di Schrödinger si scrive come

$$\psi = \sum_i \int \frac{c_{i,\rho}}{N_i(\rho)} \exp\left(-\frac{iw_{i,\rho}t}{\hbar}\right) \phi_{i,\rho} d\rho \quad (1.1.18)$$

Equazione di Schrödinger in una dimensione

Nel caso di una dimensione il problema di Schrödinger si semplifica sensibilmente e la (1.1.6) diventa

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(w - U)\phi = 0 \quad (1.1.19)$$

con $\xi_- < x < \xi_+$.

Le caratteristiche viste in precedenza per le funzioni d'onda tridimensionali si estendono al caso di una dimensione. Esse devono tenersi limitate andando all'infinito nel caso $\xi_- = -\infty$ e $\xi_+ = +\infty$ oppure annullarsi sulla frontiera della regione di confinamento se il dominio è limitato. Inoltre, sia la funzione d'onda che la sua derivata devono essere continue ovunque, compreso nei punti di discontinuità del potenziale. Lo spettro energetico è dato dal *Teorema di struttura spettrale* e dipende dalla forma del potenziale $U(x)$. Più precisamente, se si indica

$$U_* = \min_{-\infty < x < \infty} U(x) \quad (1.1.20)$$

$$U_{\pm} = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} U(x) \quad (1.1.21)$$

$$U_{<} = \min(U_+, U_-) \quad U_{>} = \max(U_+, U_-) \quad (1.1.22)$$

allora il Teorema di struttura spettrale afferma che tutto lo spettro energetico è contenuto nell'intervallo $w > U_*$ e si distingue in tre possibili zone:

1. in una parte discreta non degenera nell'intervallo $U_* < w < U_{<}$
2. in una parte continua non degenera nell'intervallo $U_{<} < w < U_{>}$ e
3. in una parte continua doppiamente degenera nell'intervallo $U_{>} < w$

Le autofunzioni corrispondenti allo spettro discreto sono normalizzabili mentre quelle che appartengono allo spettro continuo non lo sono. Se la particella non è libera di muoversi in tutto lo spazio ma, a causa di un potenziale repulsivo viene limitata, allora si applica

di nuovo il Teorema di struttura spettrale ma questa volta ad un potenziale efficace risultato della somma di quello classico più la componente confinante. Le autofunzioni risultanti dalla risoluzione del problema unidimensionale hanno delle particolarità legate alla simmetria del potenziale. Più dettagliatamente, se $U(x) = U(-x)$ in un intervallo simmetrico, allora esse hanno una parità definita, chiamata *positiva* se $\phi(x) = \phi(-x)$ e *negativa* se $\phi(x) = -\phi(-x)$. Nel caso dello spettro discreto esistono dei punti dove le autofunzioni si annullano chiamati *nodi*. Il numero dei nodi coincide con il valore dell'indice che etichetta il corrispondente autovalore. Esso è pari se l'autofunzione ha parità positiva e dispari in caso di parità negativa.

Il problema di Schrödinger tridimensionale, quando il potenziale è caratterizzato da una particolare simmetria si riduce al caso unidimensionale. Per questo motivo la precedente trattazione risulta utile nella risoluzione di molti problemi quantistici.

1.2 Formulazione operatoriale

Lo spazio di Hilbert, ossia lo spazio vettoriale al quale appartengono le funzioni d'onda stazionarie, soluzioni del problema di Schrödinger indipendente dal tempo per una particella confinata, e la sua versione generalizzata rientrano in un modello matematico generale capace di rappresentare tutti gli oggetti fisici riscontrati fino ad ora. Esso nasce con lo sviluppo della meccanica quantistica e col mutamento nelle opinioni che i fisici avevano dei fondamenti matematici nella loro materia. Inizialmente si credeva che i principi della meccanica newtoniana fornissero le basi per la descrizione di tutti i problemi fisici. In seguito, tuttavia, si riconobbe la loro inadeguatezza e si sviluppò la notazione della meccanica delle matrici da parte di Dirac.

Le autofunzioni stazionarie vengono rappresentate da vettori nello spazio di Hilbert generalizzato, che riproduce i risultati sia per i domini limitati che quelli illimitati. Gli osservabili, come le coordinate, le componenti della velocità, dell'impulso, e del momento angolare vengono rappresentati, a loro volta, da operatori autoaggiunti.

Il nuovo schema divenne una teoria fisica esatta. Ad ogni oggetto fisico è associato un oggetto matematico e ad ogni relazione tra due oggetti fisici è associata una relazione tra i corrispondenti oggetti matematici. La giustificazione dell'intero schema dipende, oltre che dalla compatibilità interna, dall'accordo dei risultati finali con l'esperienza.

Più precisamente, ciascun stato di un sistema dinamico, ossia, ogni autofunzione stazionaria corrisponde ad un vettore chiamato *ket* e indicato con $|k\rangle$. La corrispondenza è tale che, se uno stato risulta dalla sovrapposizione di certi altri, il suo corrispondente *ket* sia esprimibile linearmente in funzione di quelli corrispondenti agli altri stati e viceversa. Se il vettore *ket* viene moltiplicato per un numero complesso qualunque, non nullo, il *ket* risultante corrisponde allo stesso stato. Uno stato è dunque caratterizzato dalla direzione di un vettore *ket* mentre non ha nessuna importanza la sua lunghezza. Per questo motivo si dice che esiste una corrispondenza biunivoca tra lo stato di un sistema e un sottospazio unidimensionale dello spazio di Hilbert contenente i *ket* aventi la stessa direzione. Questo modo di rappresentare le autofunzioni deriva dal principio di sovrapposizione, il quale implica che gli stati devono essere collegati a grandezze matematiche tali da poter essere sommate e darne altre della stessa specie.

Insieme ai vettori *ket* $|k\rangle$ vengono definiti anche i vettori *bra* $\langle k|$ che sono i loro complessi coniugati. In virtù della corrispondenza biunivoca tra essi uno stato qualunque del nostro sistema dinamico in un determinato istante può essere caratterizzato indifferentemente o dalla direzione del *ket* o del *bra*.

Risolvendo l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per una particella confinata, si ottengono un insieme $\{|k\rangle\}$ di autofunzioni o *autoket* e le relazioni viste nella sezione precedente si traducono nell'attuale formalismo. L'insieme delle soluzioni forma una base ortonormale dello spazio di Hilbert, cioè un insieme completo di elementi linearmente indipendenti e ortogonali tra loro

$$\langle k|k'\rangle = \delta_{k',k} \quad (1.2.1)$$

$$\sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{1} \quad (1.2.2)$$

$$|\phi\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|\phi\rangle \quad (1.2.3)$$

e analogamente

$$\langle\phi| = \sum_k \langle\phi|k\rangle \langle k| \quad (1.2.4)$$

Gli elementi $c_k = \langle k|\phi\rangle$ sono le proiezioni dei *ket* $|\phi\rangle$ sugli *autoket* $|k\rangle$ e, essendo i coefficienti della combinazione lineare, rappresentano i pesi con i quali ogni *autoket* partecipa nella combinazione.

Un operatore generico \hat{A} viene espresso tramite la

$$\hat{A} = \sum_k \sum_l |k\rangle \langle k|\hat{A}|l\rangle \langle l| \quad (1.2.5)$$

Se esistono anche delle dimensioni infinite della regione di confinamento allora la soluzione dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo si esprime nella base generalizzata costituita dagli *autoket* appartenenti allo spazio di Hilbert esteso. Essa è caratterizzata da due tipi di indici, discreti e continui, per poter rappresentare rispettivamente il dominio limitato e quello illimitato.

$$\langle l, \lambda|m, \mu\rangle = K_m(\mu)\delta_{l,m}\delta(\lambda - \mu) \quad (1.2.6)$$

dove $K_m(\mu) > 0$ è una costante,

$$\sum_l \int |l, \lambda\rangle \frac{d\lambda}{K_l(\lambda)} \langle l, \lambda| = \hat{1} \quad (1.2.7)$$

$$|\phi\rangle = \sum_l \int |l, \lambda\rangle \frac{d\lambda}{K_l(\lambda)} \langle l, \lambda|\phi\rangle \quad (1.2.8)$$

e analogamente

$$\langle\phi| = \sum_l \int \langle\phi|l, \lambda\rangle \frac{d\lambda}{K_l(\lambda)} \langle l, \lambda| \quad (1.2.9)$$

In questo caso gli operatori vengono rappresentati da

$$\hat{A} = \sum_l \sum_m \int \int |l, \lambda\rangle \frac{d\lambda}{K_l(\lambda)} \langle l, \lambda|\hat{A}|m, \mu\rangle \frac{d\mu}{K_m(\mu)} \langle m, \mu| \quad (1.2.10)$$

Per ottenere i valori che un osservabile può assumere bisogna risolvere il problema agli autovalori del rispettivo operatore autoaggiunto che lo rappresenta. Se viene richiesto che gli *autoket* ottenuti come soluzioni del problema agli autovalori appartengano allo spazio di Hilbert si ottengono poche o nessuna soluzione. Di conseguenza, conviene cercare le soluzioni nello spazio di Hilbert generalizzato. Ogni autovalore di un operatore reale è reale. Un qualsiasi operatore autoaggiunto una volta diagonalizzato garantisce una base ortonormale di *autoket*. Se si ha un insieme di operatori autoaggiunti che commutano tra di loro, allora diagonalizzandoli si ottiene un insieme comune di *autoket* che formano

una base ortonormale. Infine, se la base comune di *autoket* è unica, l'insieme di operatori autoaggiunti è detto completo.

Commutatore

Gli operatori in generale non commutano. In meccanica quantistica la non commutatività degli operatori è fondamentale. Per questo motivo si definisce il commutatore di due operatori \hat{A} e \hat{B} l'oggetto

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.2.11)$$

Se il commutatore di due operatori è nullo allora essi commutano. Le proprietà fondamentali del commutatore sono le

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (1.2.12)$$

e

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] = 0 \quad (1.2.13)$$

Per le principali grandezze fisiche valgono le seguenti regole di commutazione

$$[\hat{q}, \hat{q}] = 0 \quad (1.2.14a)$$

$$[\hat{p}, \hat{p}] = 0 \quad (1.2.14b)$$

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar\hat{1} \quad (1.2.14c)$$

Principio di Indeterminazione

Questa sezione si conclude con il *Principio di Indeterminazione* enunciato nel 1927 da Werner Heisenberg. Esso afferma che durante una misura quanto più precisa è la determinazione della posizione di una particella tanto meno precisa è la determinazione della quantità di moto e viceversa. Ovvero,

$$\Delta\hat{q}\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.2.15)$$

Questa relazione in realtà è solo un'applicazione di un teorema più generale. In effetti esiste un formula analoga alla (1.2.15) per ogni coppia di operatori che non commutano. Questo risultato ha un'interpretazione fisica fondamentale legata all'interferenza nella misura di due osservabili che sarà spiegata dettagliatamente nella sezione successiva. Il Principio di Indeterminazione è una delle differenze più grandi della meccanica quantistica con la fisica classica nella quale i limiti e le incertezze nella misurazione di un osservabile possono derivare soltanto da debolezze dell'apparato sperimentale ma non sono legate alla natura stessa dei sistemi studiati.

1.3 Interpretazione fisica

I formalismi visti precedentemente sono molto importanti per lo studio della meccanica quantistica e vengono usati spesso senza nessuna distinzione. Tuttavia, le teorie fisiche, a prescindere dalla loro sistemazione formale sono costruite a partire da oggetti reali. La matematica, pur essendo il contesto più adatto per descrivere i concetti astratti che si riscontrano in tanti ambiti della fisica, è solo uno strumento e non avanza la natura concreta della realtà.

Il ruolo fondamentale che hanno le funzioni d'onda, soluzioni dell'equazione di Schrödinger stazionaria, o, equivalentemente i *ket* di Dirac, è giustificata dal fatto che in ultima istanza essi rappresentano gli stati di un sistema in un determinato istante, ovvero i suoi modi diversi e fisicamente distinti di essere. Gli operatori autoaggiunti, invece, si materializzano, come già detto, nel concetto di osservabile, ossia quella proprietà numericamente quantificabile del sistema.

Il protocollo sperimentale della misurazione di un osservabile consiste nel preparare il sistema in un determinato stato attraverso un dispositivo adatto e, successivamente, eseguire la misura. Nell'ambito della meccanica classica, ripetendo più volte questa procedura, nelle stesse condizioni si ottiene, entro i limiti delle incertezze sperimentali, sempre lo stesso valore che viene assegnato all'osservabile. Differentemente, in meccanica quantistica il valore dell'osservabile non è sempre definibile, poiché ci sono stati nei quali, eseguendo più volte la misurazione, si ottengono risultati diversi ad ogni ripetizione. Gli stati nei quali la ripetizione del protocollo sperimentale dà sempre lo stesso esito vengono chiamati *autostati*. Essi non sono altro che gli *autoket* o le autofunzioni stazionarie originate come soluzioni separabili dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo. Il valore ottenuto dalla misura è rappresentato dall'autovalore corrispondente all'*autoket* che descrive l'autostato.

Nel caso degli stati generici non si sa con certezza il risultato ma si conosce la probabilità che si verifichi uno dei possibili esiti. L'insieme di tutti i valori dell'osservabile in tutti i possibili stati costituisce il suo spettro. La *saturazione spettrale* afferma che lo spettro di un osservabile consiste interamente nei valori che si verificano quando la misura avviene negli autostati. Per ogni valore dello spettro di un osservabile l'autostato per il quale si verifica generalmente non è unico. Quest'ultima affermazione è conseguenza del fatto che ad ogni autovalore possono corrispondere più *autoket*.

Stati arbitrari del sistema possono essere combinati con determinati pesi in sovrapposizione per la formulazione di un nuovo stato e tale scelta non è unica. Lo stato risultante è più simile agli stati che partecipano alla sovrapposizione con pesi maggiori. Si visualizza così, la combinazione lineare delle autofunzioni per la formazione della funzione d'onda stazionaria. Se in una collezione di stati nessuno di loro può essere visto come sovrapposizione degli altri, allora vengono chiamati *indipendenti*. Un'insieme di stati indipendenti viene definito *completo* se qualunque altro stato può essere ottenuto da una loro sovrapposizione.

Come già detto, diagonalizzando un operatore autoaggiunto si ottiene un insieme di *autoket* che forma una base ortonormale. In analogia, per ogni osservabile esiste un in-

sieme completo di stati indipendenti costituito da autostati del sistema.

In meccanica classica la misura è soltanto un modo per scoprire il valore definito di una grandezza fisica. Essa può influire sullo stato del sistema solo tramite lo strumento di misura e tale influenza può essere resa piccola a piacere migliorando l'apparato sperimentale. In meccanica quantistica, il valore di un osservabile esiste solo dopo la misura e costituisce una proprietà intrinseca del sistema. La misurazione influisce sullo stato sia con la componente estrinseca esistente anche nella meccanica classica, sia con una componente intrinseca che, a differenza della prima, non può essere eliminata.

Secondo quanto detto in precedenza, la determinazione del valore dell'osservabile è possibile soltanto se il sistema si trova in un autostato. Di conseguenza, quando esso si trova in uno stato generico l'esecuzione del processo di misura, prima forza la transizione del generico stato ad un autostato, e in seguito fornisce il risultato. In questo senso la misura influisce in modo intrinseco sul sistema. Si capisce dunque l'origine della saturazione spettrale in quanto gli esiti di una misura in tutti i possibili stati sono quelli degli autostati nei quali è avvenuta la riduzione. L'approccio probabilistico si giustifica dalla difficoltà ad individuare l'autostato al quale avverrà la riduzione. La grandezza che si conosce a priori è la probabilità con la quale ogni autostato può verificarsi, oppure, equivalentemente, il coefficiente con il quale l'*autoket* corrispondente partecipa alla combinazione lineare.

In questo schema qualitativo trova la sua interpretazione anche il principio di Heisenberg e la non commutatività degli operatori. Più precisamente, quando si misurano più osservabili spesso accade di non riuscire a determinarli contemporaneamente e si dice che essi interferiscono. Siccome per la misura di ogni osservabile avviene la riduzione ad un autostato, quando si hanno più osservabili, si riesce a determinare i loro valori solo se hanno un autostato comune dove far avvenire la riduzione. In tal caso si dice che formano un insieme di osservabili *compatibili*. Come già detto, un insieme di operatori autoaggiunti hanno degli *autoket* comuni che formano una base solo se commutano. Dunque la compatibilità degli osservabili si traduce nella commutatività dei rispettivi operatori autoaggiunti. Se invece gli operatori non commutano tra di loro allora vale la relazione del Principio di Indeterminazione ed essi non possono essere misurati contemporaneamente.

1.4 Evoluzione temporale e rappresentazioni

Per concludere questo capitolo introduttivo vale la pena fare una distinzione tra le diverse rappresentazioni esistenti in meccanica quantistica. A tale scopo è necessario introdurre la dipendenza dal tempo. In tutta la trattazione vista fino ad ora si è supposto che il potenziale non dipendesse dal tempo e di conseguenza neanche l'Hamiltoniana. Così si è potuta fare la separazione delle variabili e ottenere l'equazione di Schrödinger stazionaria, mantenendo tutti i risultati indipendenti dal tempo. Questa ipotesi è giustificata in quanto rappresenta una situazione molto comune tra i sistemi quantomeccanici. Tuttavia, a volte, l'Hamiltoniana dipende dal tempo. In tal caso anche i *ket* descriventi i diversi stati dipendono dal tempo e si indicano con $|\psi(t)\rangle$. Essi soddisfano l'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \quad (1.4.1)$$

L'evoluzione temporale di $|\psi(t)\rangle$ è codificata nell'*operatore di evoluzione* $\hat{U}(t, s)$ dipendente dagli istanti iniziale s e finale t . Esso deve soddisfare le equazioni di evoluzione

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, s)}{\partial t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t, s) \quad (1.4.2a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, s)}{\partial s} = -\hat{U}(t, s)\hat{H}(s) \quad (1.4.2b)$$

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

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, s)|\psi(s)\rangle \quad (1.4.3)$$

L'operatore $\hat{U}(t, s)$ implementa l'evoluzione temporale del *ket* $|\psi(t)\rangle$ dal momento iniziale s al momento finale t . Valgono inoltre le

$$\hat{U}(t, s)^\dagger = \hat{U}(t, s)^{-1} \quad (1.4.4)$$

$$\hat{U}(t, u)\hat{U}(u, s) = \hat{U}(t, s) \quad (1.4.5)$$

Da quanto detto è chiaro che nel caso di un'Hamiltoniana dipendente dal tempo la risoluzione dell'equazione di Schrödinger si riduce nel calcolo esplicito dell'operatore di evoluzione associato ad $\hat{H}(t)$.

Un caso nel quale si ha una forma esplicita dell'operatore è quello in cui l'Hamiltoniana è indipendente dal tempo. Se $\hat{H}(t) = \hat{H}_0$ allora si ha

$$\hat{U}(t, s) = \exp(-i\hbar^{-1}(t-s)\hat{H}_0) = \hat{U}_0(t, s) \quad (1.4.6)$$

Rappresentazioni

Le leggi della meccanica quantistica sono leggi probabilistiche, quindi le grandezze rilevanti sono i valori medi degli esiti delle varie misure. Tali grandezze sono indipendenti da trasformazioni dei *ket* del tipo

$$|\psi\rangle_T = \hat{T}^{-1}|\psi\rangle \quad (1.4.7)$$

e degli operatori del tipo

$$\hat{A}_T = \hat{T}^\dagger \hat{A} \hat{T} \quad (1.4.8)$$

dove \hat{T} è un operatore unitario arbitrario.

Quando subentra la dipendenza dal tempo si può sempre scegliere tale operatore dipendente dal tempo. Si scelgono dunque un operatore autoaggiunto $\hat{K}(t)$ e un operatore $\hat{T}(t, s)$ dipendente dagli stati iniziale e finale tali che

$$i\hbar \frac{\partial \hat{T}(t, s)}{\partial t} = \hat{K}(t) \hat{T}(t, s) \quad (1.4.9a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{T}(t, s)}{\partial s} = -\hat{T}(t, s) \hat{K}(s) \quad (1.4.9b)$$

con $\hat{T}(t, s)$ che assomiglia all'operatore di evoluzione associato all'Hamiltoniana $\hat{K}(t)$. Diciamo che si è in una rappresentazione-K quando la relazione (1.4.7) è data proprio dall'operatore $\hat{T}(t, s)$. In tale rappresentazione l'evoluzione dei *ket* è data da

$$|\psi(t)\rangle_K = \hat{T}(t, 0)^{-1}|\psi(t)\rangle \quad (1.4.10)$$

e l'equazione di Schrödinger (1.4.1) diventa

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle_K}{dt} = \hat{H}^{(K)}(t)|\psi(t)\rangle_K \quad (1.4.11)$$

con

$$\hat{H}^{(K)}(t) = \hat{T}(t, 0)^\dagger (\hat{H}(t) - \hat{K}(t)) \hat{T}(t, 0) \quad (1.4.12)$$

Un operatore generico in base alla (1.4.8) nella rappresentazione-K è dato da

$$\hat{A}_K(t) = \hat{T}(t, 0)^\dagger \hat{A}(t) \hat{T}(t, 0) \quad (1.4.13)$$

Concretizzando questo schema in casi particolari si ottengono le rappresentazioni note della meccanica quantistica. Quella di Schrödinger e quella di Heisenberg costituiscono le più importanti, ma esiste anche quella di Dirac che, tuttavia, nella presente trattazione sarà omessa per brevità. La rappresentazione di Schrödinger è tale che

$$\hat{K}(t) = 0 \quad (1.4.14)$$

e di conseguenza

$$\hat{T}(t, s) = \hat{1} \quad (1.4.15)$$

Dalla (1.4.12)

$$\hat{H}^{(S)}(t) = \hat{H}(t) \quad (1.4.16)$$

Mentre per i *ket* e gli operatori si ha dalle (1.4.10) e (1.4.13)

$$|\psi(t)\rangle_S = |\psi(t)\rangle \quad (1.4.17)$$

e

$$\hat{A}_S = \hat{A}(t) \quad (1.4.18)$$

Per quanto riguarda invece la rappresentazione di Heisenberg essa è definita dalla

$$\hat{K}(t) = \hat{H}(t) \quad (1.4.19)$$

e di conseguenza dall'analogia tra le (1.4.2a)-(1.4.2b) e le (1.4.9a)-(1.4.9b) si ha

$$\hat{T}(t, s) = \hat{U}(t, s) \quad (1.4.20)$$

Dalla (1.4.12)

$$\hat{H}^{(H)}(t) = 0 \quad (1.4.21)$$

e dalle (1.4.10) e (1.4.13) si ha

$$|\psi(t)\rangle_H = \hat{U}(t, 0)^{-1} |\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle \quad (1.4.22)$$

e

$$\hat{A}_H = \hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{A}(t) \hat{U}(t, 0) \quad (1.4.23)$$

Dal confronto delle relazioni ottenute per i *ket* e gli operatori nei due diversi casi si capisce la differenza concettuale tra le due rappresentazioni. In quella di Schrödinger l'evoluzione temporale si esprime tramite l'evoluzione dei *ket* ma non degli operatori i quali rimangono fissi mentre nella rappresentazione di Heisenberg si ha l'evoluzione degli operatori ma non degli stati.

Capitolo 2

L'oscillatore armonico quantistico

L'equazione di Schrödinger, pur essendo una delle equazioni più importanti della meccanica quantistica, non è in grado di trovare la soluzione di qualsiasi sistema fisico. In realtà, i sistemi per i quali esiste effettivamente una soluzione esatta sono pochissimi, tra cui, la particella confinata in una scatola, l'atomo di idrogeno e l'oscillatore armonico. Quest'ultimo è un sistema di fondamentale importanza, in quanto costituisce una buona approssimazione per molti sistemi più complicati. Inoltre, esso è noto anche per aver segnato l'inizio della meccanica matriciale, introdotta da Heisenberg nel 1925. Inizialmente, come già descritto nell'introduzione, la meccanica ondulatoria di Schrödinger e quella matriciale di Heisenberg sembravano non avere nulla in comune, né nei presupposti fisici, né nel formalismo matematico seguito. Ciononostante, i due metodi portavano a risultati identici e, più tardi, fu dimostrato che, anche se a prima vista sembrava incredibile, potevano essere dedotti l'uno dall'altro. Si può, infatti, analizzare l'oscillatore armonico in entrambi i casi e verificare la coincidenza degli esiti. Oggi vengono usati ambedue gli approcci a seconda della convenienza e, spesso, senza specificarlo.

2.1 Soluzione dell'equazione di Schrödinger: metodo analitico

L'energia potenziale di un oscillatore armonico unidimensionale di massa m e frequenza angolare ω è

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (2.1.1)$$

Applicando il Teorema di struttura spettrale, descritto nella sezione 1.1, si stabilisce che lo spettro energetico è totalmente discreto e non degenera in quanto

$$U(x) \rightarrow \infty \quad \text{per} \quad |x| \rightarrow \infty$$

quindi

$$U_+ = U_- = +\infty \quad \text{e} \quad U_* = 0$$

L'unica regione energetica prevista dunque è la

$$U_* < w < U_+ \quad \rightarrow \quad 0 < w$$

Inoltre ci si aspetta che gli autovalori siano positivi, poiché devono essere maggiori strettamente del minimo dell'energia potenziale. Infine, dato che $U(x) = U(-x)$, le autofunzioni si presumono con parità definita. L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo diventa

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(w - \frac{1}{2}m\omega^2x^2)\phi = 0 \quad (2.1.2)$$

A livello quantistico l'oscillatore armonico è caratterizzato da una scala di lunghezze

$$l = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \quad (2.1.3)$$

Per risolvere l'equazione è comodo esprimerla nei termini della variabile adimensionale

$$\xi = \frac{x}{l} \quad (2.1.4)$$

mentre il valore energetico w conviene esprimerlo in funzione del parametro n definito da

$$n = \frac{w}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (2.1.5)$$

Usando le (2.1.3), (2.1.4) e (2.1.5) la (2.1.2) diventa

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + (2n + 1 - \xi^2)\phi = 0 \quad (2.1.6)$$

Infatti

$$\begin{aligned} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(w - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \phi = 0 &\Rightarrow \frac{d^2\phi}{d\xi^2} \frac{1}{l^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(w - \frac{1}{2} m \omega^2 l^2 \xi^2 \right) \phi = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \frac{2ml^2}{\hbar^2} \left(w - \frac{1}{2} m \omega^2 l^2 \xi^2 \right) \phi = 0 &\Rightarrow \frac{d^2\phi}{d\xi^2} + (2n + 1 - \xi^2) \phi = 0 \end{aligned}$$

■

A questo punto si conduce un'ipotesi di lavoro basata sulla limitatezza della funzione d'onda quando x , e di conseguenza ξ , tendono all'infinito e si trova l'equazione asintotica per

$$|\xi| \gg 1 \rightarrow \xi^2 \gg 2n + 1$$

La (2.1.6) diventa

$$\frac{d^2\phi_{as}}{d\xi^2} - \xi^2 \phi_{as} = 0 \quad (2.1.7)$$

con la soluzione ovvia

$$\phi_{as}(\xi) = \exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right) \quad (2.1.8)$$

Per ottenere dalla (2.1.8) la soluzione esatta si aggiunge un termine correttivo

$$\phi(\xi) = \phi_{as}(\xi) H(\xi) = \exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right) H(\xi) \quad (2.1.9)$$

Introducendo quest'ultima nella (2.1.6) si ricava l'equazione per il termine correttivo $H(\xi)$.

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\xi^2} \left(e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi) \right) + (2n + 1 - \xi^2) e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi) = 0 &\Rightarrow \\ -e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi) (1 - \xi^2) - 2\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{dH(\xi)}{d\xi} + e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} + (2n + 1 - \xi^2) e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi) = 0 &\Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + 2nH(\xi) = 0 \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

Tale equazione è nota come *equazione di Hermite* e in generale ha delle soluzioni che divergono quando diverge ξ . Tuttavia, per valori di n interi e non negativi, la soluzione è unica e consiste nei *polinomi di Hermite di grado n* denotati con H_n . Con una scelta di normalizzazione convenzionale assumono la forma

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (2.1.11)$$

Applicando la condizione di normalizzazione (1.1.9) si trova la costante per la quale occorre moltiplicare i polinomi di Hermite per ottenere l'espressione finale della funzione d'onda.

Per $n > m$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n(\xi)\phi_m(\xi)d\xi &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)H_m(\xi)d\xi = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} (-1)^{n+m} \left(\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right) \cdot \left(e^{\xi^2} \frac{d^m}{d\xi^m} e^{-\xi^2} \right) d\xi = \\
&= (-1)^{n+m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right) \cdot \left(e^{\xi^2} \frac{d^m}{d\xi^m} e^{-\xi^2} \right) d\xi = \\
&= (-1)^{n+2m+1} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d^{n-m-1}}{d\xi^{n-m-1}} e^{-\xi^2} \right) \cdot \frac{d^{m+1}}{d\xi^{m+1}} \left(e^{\xi^2} \frac{d^m}{d\xi^m} e^{-\xi^2} \right) d\xi = \\
&= (-1)^{n+1} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d^{n-m-1}}{d\xi^{n-m-1}} e^{-\xi^2} \right) \cdot \frac{d^{m+1}}{d\xi^{m+1}} \left(e^{\xi^2} \frac{d^m}{d\xi^m} e^{-\xi^2} \right) d\xi = 0
\end{aligned}$$

dove si è fatto $(m + 1)$ volte per parti tenendo conto che

$$e^{-\xi^2} \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0$$

L'ultima espressione è uguale a zero poiché

$$\frac{d^{m+1}}{d\xi^{m+1}} \left(e^{\xi^2} \frac{d^m}{d\xi^m} e^{-\xi^2} \right) = 0$$

■

Quindi per $n > m$ vale che

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n(\xi)\phi_m(\xi)d\xi = 0$$

Per $n = m$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n(\xi)\phi_n(\xi)d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right) \cdot \left(e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right) d\xi$$

Integrando n volte per parti si ha

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n(\xi)\phi_n(\xi)d\xi &= (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left(e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right) d\xi = \\
&= (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} ((-2\xi)^n) d\xi = (-1)^n (-2)^n n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = 12^n n! \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

■

¹ Integrale di Gauss $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$

Si ottiene dunque la forma finale delle funzioni d'onda dell'oscillatore armonico la quale è

$$\phi_n(\xi) = (-1)^n \frac{1}{\pi^{1/4} (2^n n!)^{1/2}} \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right) \frac{d^n}{d\xi^n} (\exp(-\xi^2)) \quad (2.1.12)$$

Sostituendo ξ

$$\phi_n(x) = \frac{1}{l^{1/2}} \frac{1}{\pi^{1/4} (2^n n!)^{1/2}} \exp\left(\frac{-x^2}{2l^2}\right) H_n\left(\frac{x}{l}\right) \quad (2.1.13)$$

dove si è diviso per $l^{1/2}$ in quanto

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n(\xi) \phi_m(\xi) d\xi = \delta_{n,m} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n\left(\frac{x}{l}\right) \phi_m\left(\frac{x}{l}\right) \frac{dx}{l} = \delta_{n,m} \Rightarrow$$

$$\frac{1}{l} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n\left(\frac{x}{l}\right) \phi_m\left(\frac{x}{l}\right) dx = \delta_{n,m} \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n\left(\frac{x}{l}\right) \phi_m\left(\frac{x}{l}\right) dx = l \delta_{n,m}$$

■

Per i primi quattro stati quantici quindi si ha

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{l^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2l^2}\right) \quad (2.1.14a)$$

$$\phi_1(x) = \frac{2^{1/2}}{\pi^{1/4}} \frac{1}{l^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2l^2}\right) \frac{x}{l} \quad (2.1.14b)$$

$$\phi_2(x) = \frac{2^{1/2}}{\pi^{1/4}} \frac{1}{l^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2l^2}\right) \left[\left(\frac{x}{l}\right)^2 - \frac{1}{2}\right] \quad (2.1.14c)$$

$$\phi_3(x) = \frac{2}{3^{1/2} \pi^{1/4}} \frac{1}{l^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2l^2}\right) \left[\left(\frac{x}{l}\right)^3 - \frac{3x}{2l}\right] \quad (2.1.14d)$$

Infine, le funzioni d'onda hanno parità $(-1)^n$ in quanto

$$\phi_n(-x) = (-1)^n \phi_n(x) \quad (2.1.15)$$

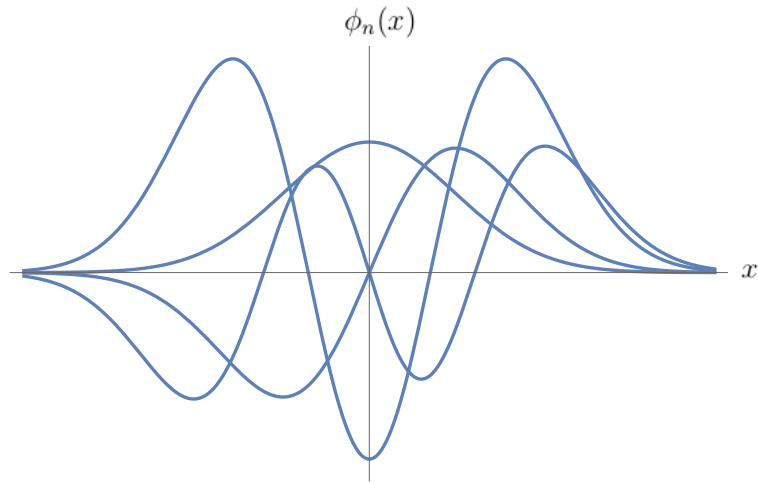


Figura 2.1.1: Autofunzioni dell'oscillatore armonico

Per quanto riguarda invece gli autovalori energetici si trovano dalla (2.1.5)

$$w_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.1.16)$$

$$w_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad w_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$w_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega \qquad w_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega$$

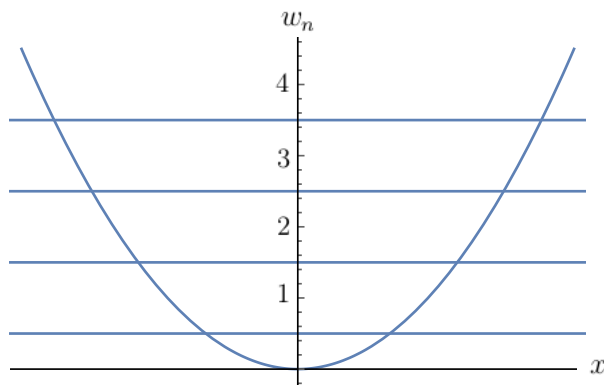


Figura 2.1.2: Autovalori dell'oscillatore armonico

Per concludere questa sezione, si può comparare l'oscillatore quantistico con il suo corrispettivo classico costituito da una particella di massa m soggetta ad una forza di richiamo elastica $-kx$, dove k è la costante elastica. La frequenza angolare dell'oscillazione è $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ e l'energia totale è $E_{total} = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 = \frac{kA^2}{2}$, dove A è l'ampiezza classica dell'oscillazione. Se eguagliamo tale energia all'energia dell'oscillatore quantistico si ha che

$$E_{total} = \frac{kA_n^2}{2} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

e quindi il punto dove avviene l'inversione è

$$A_n = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} (2n + 1)^{1/2}$$

Le funzioni d'onda dell'oscillatore armonico quantistico non sono identicamente nulle al di fuori di questa regione anche se si annullano rapidamente. Più precisamente, quando l'energia totale è maggiore di quella potenziale, l'energia cinetica è positiva e la quantità di moto reale, mentre, in caso contrario, la quantità di moto diventa immaginaria e la particella si trova in una regione classicamente non permessa. In altre parole, nel caso quantistico esiste una probabilità, anche se molto piccola, di trovare la particella al di fuori della regione permessa dall'energia potenziale. Questo fenomeno, come citato nel capitolo precedente, prende il nome di effetto tunnel e può avvenire attraverso il Principio di Indeterminazione secondo il quale per tempi infinitesimi si può avere una violazione della legge di conservazione dell'energia. Più precisamente,

$$A_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \quad A_1 = \sqrt{3} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \quad A_2 = \sqrt{5} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2}$$

oppure in termini della variabile ξ data dalla (2.1.4)

$$\xi_0 = 1 \quad \xi_1 = \sqrt{3} \quad \xi_2 = \sqrt{5} \quad \xi_n = (2n + 1)^{1/2}$$

Integrando al di fuori dei punti di inversione il modulo quadro della funzione d'onda si calcola la probabilità di trovare la particella nella regione non permessa. Per $n = 0$ si ha

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 > \frac{1}{2}\hbar\omega \quad \Rightarrow \quad |\xi| > 1$$

Dunque, la probabilità di trovare la particella nella regione classicamente proibita, per quanto riguarda lo stato fondamentale, è

$$\int_{|\xi|>1} |\phi^2(\xi)| d\xi = \frac{1}{\pi^{1/2}} \int_{|\xi|>1} e^{-\xi^2} d\xi = 0.157$$

dove l'ultimo integrale è stato calcolato con l'aiuto delle tabelle delle *error function*. Tale probabilità diventa sempre più piccola quanto più aumentiamo n , cioè quanto più grande è il valore del corrispondente livello energetico.

2.2 Soluzione dell'equazione di Schrödinger: metodo operatoriale

Per lo studio operatoriale dell'oscillatore armonico è necessario introdurre gli operatori di *creazione* e *annichilazione*. Essi formano una coppia di operatori indicati \hat{a} e \hat{a}^\dagger che soddisfano la relazione di commutazione

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1} \quad (2.2.1)$$

A tale coppia è associato l'operatore *numero*

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (2.2.2)$$

il quale è reale in quanto

$$\hat{N}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a}^{\dagger\dagger} = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{N}$$

Vengono soddisfatte le seguenti regole di commutazione

$$[\hat{N}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} + \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}] = -\hat{1} \hat{a} = -\hat{a} \quad (2.2.3)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] \hat{a} + \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \hat{1} = \hat{a}^\dagger \quad (2.2.4)$$

dove sono state usate le $[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}] = 0$ e $[a, bc] = [a, b]c + b[a, c]$.
Lo spettro dell'operatore \hat{N} consiste negli interi non negativi $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\sigma(\hat{N}) = \{0, 1, 2, \dots\} \quad (2.2.5)$$

Sia $|0\rangle$ l'*autoket* di \hat{N} appartenente all'autovalore 0

$$\hat{N}|0\rangle = |0\rangle 0 = 0 \quad (2.2.6)$$

Allora per ogni $n = 0, 1, 2, \dots$, il *ket*:

$$|n\rangle = \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle (n!)^{-1/2} = \frac{\hat{a}^{\dagger n} |0\rangle}{(n!)^{1/2}} \quad (2.2.7)$$

è un *autoket* di \hat{N} appartenente all'autovalore n , cioè

$$\hat{N}|n\rangle = |n\rangle n \quad (2.2.8)$$

Per dimostrare quanto detto sull'operatore numero si prova inizialmente che il suo spettro è costituito da autovalori non negativi. In seguito, si verifica che il più piccolo autovalore dello spettro è lo zero e infine che se $n = 0, 1, 2, \dots$, allora i corrispondenti *autoket* sono $|n\rangle = \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle (n!)^{-1/2}$. Inoltre, si dimostra per assurdo che non si possono avere autovalori negativi.

Sia n un autovalore di \hat{N} ed $|n\rangle$ il rispettivo *autoket*. Allora

$$\hat{N}|n\rangle = |n\rangle n \quad (2.2.9)$$

$$\langle n|n\rangle n = \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle \geq 0$$

e dato che $\langle n|n\rangle > 0$ si ha

$$n \geq 0 \quad (2.2.10)$$

Sia n_0 l'autovalore più piccolo costituente lo spettro dell'operatore \hat{N} e $|n_0\rangle$ il rispettivo *autoket*. Cioè

$$\hat{N}|n_0\rangle = |n_0\rangle n_0 \quad (2.2.11)$$

$$\hat{N}\hat{a}|n_0\rangle = {}^2 \left([\hat{N}, \hat{a}] + \hat{a}\hat{N} \right) |n_0\rangle = (-\hat{a} + \hat{a}\hat{N})|n_0\rangle =$$

$$\hat{a}(\hat{N} - \hat{1})|n_0\rangle = \hat{a}|n_0\rangle(n_0 - 1) \quad (2.2.12)$$

Se $\hat{a}|n_0\rangle \neq 0$ l'autovalore di \hat{N} sarebbe $(n_0 - 1) < n_0$ che contrasta l'ipotesi. Si stabilisce quindi che

$$\hat{a}|n_0\rangle = 0 \quad (2.2.13)$$

Dalle (2.2.13) e (2.2.2) si ottiene

$$\hat{N}|n_0\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}|n_0\rangle = 0 \quad (2.2.14)$$

Confrontando la (2.2.14) con la (2.2.11) si ha $n_0 = 0$. Si è dunque dimostrato che lo zero è l'autovalore più piccolo dello spettro di \hat{N} e che

$$\hat{N}|0\rangle = |0\rangle 0 = 0 \quad (2.2.15)$$

Siano $n = 0, 1, 2, \dots$, gli autovalori, si ha

$$\hat{N}\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle = \hat{N}\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle - \hat{a}^{\dagger n}\hat{N}|0\rangle = [\hat{N}, \hat{a}^{\dagger n}]|0\rangle$$

dove si è sottratto il termine nullo $\hat{a}^{\dagger n}\hat{N}|0\rangle = \hat{a}^{\dagger n}[\hat{N}|0\rangle] = 0$

$$[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger n}] = [\hat{N}, \hat{a}^\dagger\hat{a}^{\dagger(n-1)}] = {}^3[\hat{N}, \hat{a}^\dagger]\hat{a}^{\dagger(n-1)} + \hat{a}^\dagger[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger(n-1)}] =$$

² $[\hat{N}, \hat{a}] = \hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N} \Rightarrow \hat{N}\hat{a} = [\hat{N}, \hat{a}] + \hat{a}\hat{N}$

³ $[a, bc] = [a, b]c + b[a, c]$

$$\begin{aligned}
&= [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-1)} + \hat{a}^\dagger([\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-2)} + \hat{a}^\dagger[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger(n-2)}]) = \\
&= [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-1)} + \hat{a}^\dagger[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-2)} + \hat{a}^{\dagger 2}[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger(n-2)}] = \\
&= [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-1)} + \hat{a}^\dagger[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-2)} + \hat{a}^{\dagger 2}[\hat{N}, \hat{a}^\dagger \hat{a}^{\dagger(n-3)}] = \\
&= [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-1)} + \hat{a}^\dagger[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-2)} + \hat{a}^{\dagger 2}([\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-3)} + \\
&\quad + \hat{a}^\dagger[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger(n-3)}]) = \\
&= [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-1)} + \hat{a}^\dagger[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-2)} + \hat{a}^{\dagger 2}[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-3)} + \\
&\quad + \hat{a}^{\dagger 3}[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger(n-3)}] = \\
&= [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-1)} + \hat{a}^\dagger[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-2)} + \hat{a}^{\dagger 2}[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-3)} + \\
&\quad + \hat{a}^{\dagger 3}[\hat{N}, \hat{a}^\dagger \hat{a}^{\dagger(n-4)}] = \\
&= [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-1)} + \hat{a}^\dagger[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-2)} + \hat{a}^{\dagger 2}[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-3)} + \\
&\quad + \hat{a}^{\dagger 3}[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-4)} + \hat{a}^{\dagger 4}[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger(n-4)}] + \dots \\
&= \sum_{l=0}^{n-1} \hat{a}^{\dagger l} [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-l-1)} = \sum_{l=0}^{n-1} \hat{a}^{\dagger n} \tag{2.2.16}
\end{aligned}$$

dove nell'ultima uguaglianza si è usata la (2.2.4).

$$[\hat{N}, \hat{a}^{\dagger n}] |0\rangle = \sum_{l=0}^{n-1} \hat{a}^{\dagger l} |0\rangle = \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle_n \tag{2.2.17}$$

Dunque

$$\hat{N} \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle = \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle_n \tag{2.2.18}$$

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{1} + \hat{N} \tag{2.2.19}$$

$$\hat{a}^n \hat{a}^{\dagger n} = \hat{a}^{(n-1)} \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^{\dagger(n-1)} = \hat{a}^{(n-1)} (\hat{1} + \hat{N}) \hat{a}^{\dagger(n-1)} \tag{2.2.20}$$

dove nell'ultimo passaggio si è applicata la (2.2.19).

Dalla (2.2.18) si ha

$$(\hat{N} + \hat{1}) \hat{a}^{\dagger(n-1)} |0\rangle = \hat{a}^{\dagger(n-1)} |0\rangle_n \tag{2.2.21}$$

Quindi

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \hat{a}^n \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle &= \langle 0 | \hat{a}^{(n-1)} \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^{\dagger(n-1)} |0\rangle = \langle 0 | \hat{a}^{(n-1)} (\hat{N} + \hat{1}) \hat{a}^{\dagger(n-1)} |0\rangle = \\
&\langle 0 | \hat{a}^{(n-1)} \hat{a}^{\dagger(n-1)} |0\rangle_n \tag{2.2.22}
\end{aligned}$$

Iterando il procedimento si ottiene alla fine

$$\langle 0|\hat{a}^n\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle = \langle 0|0\rangle n! \quad (2.2.23)$$

Siccome $|0\rangle \neq 0$ si ha $\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle \neq 0$ quindi n è un autovalore di \hat{N} e l'*autoket* corrispondente ad esso dalla (2.2.23) risulta essere

$$|n\rangle = \hat{a}^{\dagger n}|0\rangle (n!)^{-1/2} \quad (2.2.24)$$

Infine, rimane solo da dimostrare per assurdo che se $n^* \neq 0, 1, 2, \dots$ allora esso non può essere un autovalore di \hat{N} . Sia n^* un elemento dello spettro di \hat{N} con *autoket* $|n^*\rangle$ cioè

$$\hat{N}|n^*\rangle = |n^*\rangle n^* \quad (2.2.25)$$

Per $n = 0, 1, 2, \dots$, si ha

$$\begin{aligned} \hat{N}\hat{a}^n|n^*\rangle &= (\hat{N}\hat{a}^n - \hat{a}^n\hat{N} + \hat{a}^n\hat{N})|n^*\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}^n] + \hat{a}^n\hat{N})|n^*\rangle = \\ &= \sum_{l=0}^{n-1} \hat{a}^l [\hat{N}, \hat{a}] \hat{a}^{(n-l-1)}|n^*\rangle + \hat{a}^n|n^*\rangle n^* = - \sum_{l=0}^{n-1} \hat{a}^l \hat{a} \hat{a}^{(n-l-1)}|n^*\rangle + \hat{a}^n|n^*\rangle n^* = \\ &= - \hat{a}^n|n^*\rangle n + \hat{a}^n|n^*\rangle n^* = \hat{a}^n|n^*\rangle (n^* - n) \end{aligned} \quad (2.2.26)$$

se n è l'intero più piccolo non negativo con $n > n^*$ allora $n^* - n < 0$ non può essere un autovalore di \hat{N} e si ha

$$\hat{a}^n|n^*\rangle = 0 \quad (2.2.27)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle n^*|\hat{a}^{\dagger n}\hat{a}^n|n^*\rangle = \langle n^*|\hat{a}^{\dagger(n-1)}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}^{(n-1)}|n^*\rangle = \\ &= \langle n^*|\hat{a}^{\dagger(n-1)}\hat{N}\hat{a}^{(n-1)}|n^*\rangle = \langle n^*|\hat{a}^{\dagger(n-1)}\hat{a}^{(n-1)}|n^*\rangle (n^* - n + 1) \end{aligned}$$

dalla (2.2.26). Analogamente a prima, iterando il procedimento si ottiene

$$0 = \langle n^*|\hat{a}^{\dagger n}\hat{a}^n|n^*\rangle = \langle n^*|n^*\rangle n^*(n^* - 1)(n^* - 2) \dots (n^* - n + 2)(n^* - n + 1)$$

Dato che $n^*(n^* - 1)(n^* - 2) \dots (n^* - n + 2)(n^* - n + 1) \neq 0$ si conclude che $\langle n^*|n^*\rangle = 0$ e quindi $|n^*\rangle = 0$. Di conseguenza n^* non è un autovalore di \hat{N} e quindi l'ipotesi si contraddice dimostrando che lo spettro di \hat{N} è costituito solo da interi non negativi e concludendo la dimostrazione. ■

Valgono le seguenti regole

$$\hat{a}|n\rangle = |n-1\rangle n^{1/2} \quad n > 0 \quad (2.2.28)$$

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (2.2.29)$$

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = |n+1\rangle (n+1)^{1/2} \quad (2.2.30)$$

Per dimostrare queste ultime affermazioni si procede nel seguente modo

$$0 = \langle 0 | \hat{N} | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{a}^\dagger \hat{a} | 0 \rangle \Rightarrow \hat{a} | 0 \rangle = 0 \quad (2.2.31)$$

Essendo $|n\rangle = \hat{a}^{\dagger n} | 0 \rangle (n!)^{-1/2}$

$$\hat{a} |n\rangle = \hat{a} (\hat{a}^{\dagger n} | 0 \rangle (n!)^{-1/2}) = \hat{a} \hat{a}^{\dagger n} | 0 \rangle (n!)^{-1/2} - \hat{a}^{\dagger n} \hat{a} | 0 \rangle (n!)^{-1/2} = [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger n}] | 0 \rangle (n!)^{-1/2}$$

dove nel secondo passaggio è stato semplicemente sottratto un termine nullo usando la (2.2.31). Analogamente alla (2.2.16) vale

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger n}] &= \sum_{l=0}^{n-1} \hat{a}^{\dagger l} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-l-1)} \Rightarrow \\ \hat{a} |n\rangle &= \sum_{l=0}^{n-1} \hat{a}^{\dagger l} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \hat{a}^{\dagger(n-l-1)} | 0 \rangle (n!)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{n-1} \hat{a}^{\dagger l} \hat{a}^{\dagger(n-l-1)} | 0 \rangle (n!)^{-1/2} = \\ &= \sum_{l=0}^{n-1} \hat{a}^{\dagger(n-1)} | 0 \rangle (n!)^{-1/2} = \hat{a}^{\dagger(n-1)} | 0 \rangle n (n!)^{-1/2} = \hat{a}^{\dagger(n-1)} | 0 \rangle n n^{-1/2} ((n-1)!)^{-1/2} \end{aligned}$$

poiché $n! = n(n-1)!$. Alla fine applicando di nuovo la (2.2.24) si conclude

$$\hat{a} |n\rangle = |n-1\rangle n^{1/2}$$

Per quanto riguarda la (2.2.30) si ha

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \hat{a}^\dagger (\hat{a}^{\dagger n} | 0 \rangle (n!)^{-1/2}) = \hat{a}^{\dagger(n+1)} | 0 \rangle (n!)^{-1/2} \quad (2.2.32)$$

$$|n+1\rangle = \hat{a}^{\dagger(n+1)} | 0 \rangle ((n+1)!)^{-1/2} = \hat{a}^{\dagger(n+1)} | 0 \rangle (n+1)^{-1/2} (n!)^{-1/2} \quad (2.2.33)$$

poiché $(n+1)! = (n+1)n!$. Confrontando le (2.2.32) e (2.2.33) si ha alla fine

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = |n+1\rangle (n+1)^{1/2}$$

concludendo la dimostrazione. ■

Se \hat{N} è autoaggiunto allora in base alla scelta di normalizzazione $\langle 0 | 0 \rangle = 1$ si ha per gli *autoket* $|n\rangle$

$$\langle n' | n \rangle = \delta_{n', n} \quad (2.2.34)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \hat{1} \quad (2.2.35)$$

Il passo successivo è collegare gli operatori di creazione e annichilazione analizzati in precedenza con gli operatori dell'oscillatore armonico.

A tale scopo si considera un oscillatore armonico unidimensionale di massa m e frequenza ω . Usando gli operatori posizione \hat{q} e impulso \hat{p} si costruisce l'operatore

$$\hat{a} = \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}}(\hat{p} - i\omega m\hat{q}) \quad (2.2.36)$$

e contestualmente

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}}(\hat{p} + i\omega m\hat{q}) \quad (2.2.37)$$

$$\hat{a} - \hat{a}^\dagger = \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}}(\hat{p} - i\omega m\hat{q} - \hat{p} - i\omega m\hat{q}) = \frac{-2i\omega m\hat{q}}{(2m\hbar\omega)^{1/2}} = -i\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\hat{q}$$

Quindi,

$$\hat{q} = -i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (2.2.38)$$

Si verifica la validità della (2.2.1)

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}}(\hat{p} - i\omega m\hat{q}), \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}}(\hat{p} + i\omega m\hat{q}) \right] = \\ &= \frac{1}{2m\hbar\omega}[\hat{p} - i\omega m\hat{q}, \hat{p} + i\omega m\hat{q}] = \frac{1}{2m\hbar\omega}([\hat{p}, \hat{p}] + [\hat{p}, i\omega m\hat{q}] + [-i\omega m\hat{q}, \hat{p}] + m^2\omega^2[\hat{q}, \hat{q}]) = \\ &= \frac{1}{2m\hbar\omega}(i\omega m[\hat{p}, \hat{q}] - i\omega m[\hat{q}, \hat{p}]) = 4\frac{-i\omega m}{2m\hbar\omega}(i\hbar\hat{1} + i\hbar\hat{1}) = \hat{1} \end{aligned}$$

■

Di conseguenza i due operatori definiti nelle (2.2.36) e (2.2.37) costituiscono una coppia di operatori di creazione e annichilazione. A tale coppia è associato il corrispondente operatore numero dato dalla (2.2.2).

$$\begin{aligned} \hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a} &= \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}}(\hat{p} + i\omega m\hat{q})\frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}}(\hat{p} - i\omega m\hat{q}) = \\ &= \frac{1}{2m\hbar\omega}(\hat{p} + i\omega m\hat{q})(\hat{p} - i\omega m\hat{q}) = \frac{1}{2m\hbar\omega}(\hat{p}^2 - i\omega m\hat{p}\hat{q} + i\omega m\hat{q}\hat{p} + m^2\omega^2\hat{q}^2) = \\ &= \frac{1}{2m\hbar\omega}(\hat{p}^2 - i\omega m(\hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p}) + m^2\omega^2\hat{q}^2) = 5\frac{1}{2m\hbar\omega}(\hat{p}^2 - m\omega\hbar\hat{1} + m^2\omega^2\hat{q}^2) \Rightarrow \\ \hat{N} &= \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{q}^2}{2} \right) - \frac{\hat{1}}{2} \end{aligned} \quad (2.2.39)$$

L'Hamiltoniana dell'oscillatore armonico quantistico considerando la (2.2.39) diventa

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{q}^2}{2} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{\hat{1}}{2} \right) \quad (2.2.40)$$

⁴Si è usata la regola di commutazione $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar\hat{1}$

⁵Si è usata la relazione $\hat{p}\hat{q} - \hat{q}\hat{p} = [\hat{p}, \hat{q}] = -i\hbar\hat{1}$

e di conseguenza se $\hat{H}|n\rangle = |n\rangle w_n$, l'autovalore w_n dell'Hamiltoniana considerando anche la (2.2.8) risulta

$$\begin{aligned}\hat{H}|n\rangle &= \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = |n\rangle \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow \\ w_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)\end{aligned}\quad (2.2.41)$$

Infine si ottiene la funzione d'onda dell'oscillatore

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{a} = \langle x| \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}} (\hat{p} - im\omega\hat{q}) &= \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}} (\langle x|\hat{p} - im\omega\langle x|\hat{q}) =^6 \\ \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}} \left((-i\hbar \frac{d}{dx})\langle x| - im\omega x\langle x| \right) &= \left(\frac{-i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} - \frac{i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \langle x|\end{aligned}$$

ponendo $l = (\frac{\hbar}{m\omega})^{1/2}$

$$\langle x|\hat{a} = \frac{-i}{\sqrt{2}} \left(l \frac{d}{dx} + \frac{1}{l} x \right) \langle x| \quad (2.2.42)$$

Dalla (2.2.29) ne consegue che $\langle x|\hat{a}|0\rangle = 0$. Quindi

$$\begin{aligned}\frac{-i}{\sqrt{2}} \left(l \frac{d}{dx} + \frac{1}{l} x \right) \langle x|0\rangle = 0 \Rightarrow \frac{-i}{\sqrt{2}} l \frac{d}{dx} \langle x|0\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} \frac{1}{l} x \langle x|0\rangle = 0 \Rightarrow \\ \phi(0) = \langle x|0\rangle = e^{-\frac{x^2}{2l^2}}\end{aligned}\quad (2.2.43)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(0)\phi(0)dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{l^2}} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} l d\xi = l\sqrt{\pi}$$

Per normalizzare la funzione d'onda è dunque necessario dividere per il termine $l^{1/2}\pi^{1/4}$. Usando la (2.2.24), si ottiene la $\phi_n(x)$

$$\begin{aligned}\phi_n(x) = \langle x|n\rangle = \langle x|\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle (n!)^{-1/2} &= \frac{(-1)^n i^n}{(2^n n!)^{1/2}} \left(l \frac{d}{dx} - \frac{1}{l} x \right)^n \langle x|0\rangle \Rightarrow \\ \phi_n(x) &= \frac{(-1)^n i^n}{(2^n n!)^{1/2}} \frac{1}{l^{1/2} \pi^{1/4}} H_n \left(\frac{x}{l} \right) \exp \left(-\frac{x^2}{2l^2} \right)\end{aligned}\quad (2.2.44)$$

Aggiungendo, infine, anche la dipendenza temporale si ha

$$\psi_n(t, x) = \phi_n(x) \exp \left(\frac{-i w_n t}{\hbar} \right) \quad (2.2.45)$$

⁶ $\langle x|\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \langle x|$ e $\langle x|\hat{q} = x\langle x|$

⁷Si fa il cambio di variabile $x = \xi l$ al fine di ottenere l'integrale gaussiano

dove w_n è dato dalla (2.2.41).

Siccome gli stati sono stazionari, la distribuzione di probabilità è indipendente dal tempo

$$|\psi_n(t, x)|^2 = |\phi_n(x)|^2 \quad (2.2.46)$$

La dipendenza dal tempo si trova nel caso in cui lo stato della particella è una sovrapposizione di autostati. In altre parole, la distribuzione di probabilità dipende dal tempo nel caso in cui la particella sta transitando da un autostato all'altro. In tal caso, infatti,

$$\psi(t, x) = \sum_n a_n \phi_n(x) \exp\left(\frac{-i w_n t}{\hbar}\right) \quad (2.2.47)$$

dove a_n è il peso con il quale contribuisce ϕ_n . Assumendo che la particella si trova in uno stato intermedio tra lo stato fondamentale e il primo stato eccitato si ha

$$\begin{aligned} \psi(t, x) &= a_0 \phi_0(x) \exp\left(\frac{-i w_0 t}{\hbar}\right) + a_1 \phi_1(x) \exp\left(\frac{-i w_1 t}{\hbar}\right) = \\ &= a_0 \phi_0(x) \exp\left(\frac{-i \omega t}{2}\right) + a_1 \phi_1(x) \exp\left(\frac{-3i \omega t}{2}\right) \end{aligned} \quad (2.2.48)$$

dove è stata usata la (2.2.41).

Quindi la distribuzione di probabilità risulta

$$|\psi(t, x)|^2 = a_0^2 |\phi_0|^2 + a_1^2 |\phi_1|^2 + 2a_0 a_1 \phi_0 \Im\{\phi_1\} \sin(\omega t) \quad (2.2.49)$$

in quanto

$$\begin{aligned} \psi(t, x) &= a_0 \phi_0 (\cos(\omega t/2) - i \sin(\omega t/2)) + \\ &\quad i a_1 \Im\{\phi_1\} (\cos(3\omega t/2) - i \sin(3\omega t/2)) \Rightarrow \\ |\psi(t, x)|^2 &= a_0^2 \phi_0^2 \cos^2(\omega t/2) + a_1^2 (\Im\phi_1)^2 \sin^2(3\omega t/2) + \\ &\quad 2a_0 a_1 \phi_0 (\Im\phi_1) \cos(\omega t/2) \sin(3\omega t/2) + a_0^2 \phi_0^2 \sin^2(\omega t/2) \\ &\quad + a_1^2 (\Im\phi_1)^2 \cos^2(3\omega t/2) - 2a_0 a_1 \phi_0 (\Im\phi_1) \cos(3\omega t/2) \sin(\omega t/2) = \\ &= a_0^2 |\phi_0|^2 + a_1^2 |\phi_1|^2 + 2a_0 a_1 \phi_0 \Im\{\phi_1\} \sin(\omega t) \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio si è usata la formula trigonometrica

$$\sin \alpha \cos \beta - \cos \alpha \sin \beta = \sin(\alpha - \beta) \quad (2.2.50)$$

Questo risultato è molto importante in quanto permette l'uso del sistema dell'oscillatore armonico ogni qual volta si abbia una distribuzione di probabilità oscillante. Infatti $|\psi(t, x)|^2$ oscilla tra i due stati con frequenza legata alla differenza di energia tra i due livelli energetici. Riassumendo, quando la particella oscillante si trova in un autostato non c'è la dipendenza dal tempo. A differenza, se essa sta transitando tra diversi autostati, ovvero la sua funzione d'onda si esprime come combinazione lineare delle autofunzioni di quest'ultimi, la distribuzione di probabilità acquisisce dipendenza dal tempo.

2.3 Rappresentazione di Heisenberg

La trattazione dell'oscillatore armonico si conclude determinando gli operatori di creazione e annichilazione nella rappresentazione di Heisenberg, dove, come è stato già illustrato nel precedente capitolo, non sono più gli stati a evolvere nel tempo ma gli operatori. Dall'equazione di Schrödinger

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \Rightarrow \psi(t) = \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right)\psi(0) \quad (2.3.1)$$

Sia \hat{A} un operatore indipendente dal tempo. Il suo valore di aspettazione calcolato su uno stato generico $\psi(t)$ è equivalente al valore di aspettazione di un altro operatore \tilde{A} calcolato sullo stato fondamentale con

$$\tilde{A} = \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right)\hat{A}\exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) \quad (2.3.2)$$

Infatti dalla (2.3.1)

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \hat{A} \exp\left(\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}\right) | \psi(0) \rangle = \\ &= \langle \psi(0) | \tilde{A} | \psi(0) \rangle \end{aligned}$$

Si calcola la derivata totale rispetto al tempo di tale operatore considerando che l'operatore \hat{A} è indipendente dal tempo

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{A}}{dt} &= \left(\frac{i\hat{H}}{\hbar}\right) e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}} + e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} e^{\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}} + e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}} \left(\frac{-i\hat{H}}{\hbar}\right) = \\ &= \left(\frac{i\hat{H}}{\hbar}\right) \tilde{A} + 0 + \tilde{A} \left(\frac{-i\hat{H}}{\hbar}\right) = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\tilde{A} - \tilde{A}\hat{H}) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \tilde{A}] \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

Allo stesso modo, anche per l'operatore di annichilazione vale

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{a}}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \tilde{a}] = \frac{i}{\hbar}[\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}), e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\hat{a}e^{\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}}] = \\ &= i\omega e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}([\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} + \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}])e^{\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}} = i\omega(-\hat{1})\tilde{a} = -i\omega\tilde{a} \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

dalla quale segue

$$\tilde{a} = e^{-i\omega t}\tilde{a}(0) = e^{-i\omega t}\hat{a} \quad (2.3.5)$$

Facendo il suo trasposto

$$\tilde{a}^\dagger = e^{i\omega t}\hat{a}^\dagger \quad (2.3.6)$$

Dalla (2.2.38)

$$\tilde{q} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}e^{-i\omega t} - \hat{a}^\dagger e^{i\omega t}) \quad (2.3.7)$$

2.4 L'importanza dell'oscillatore armonico

Dalle due trattazioni seguite è stata ottenuta la forma degli autovalori e delle autofunzioni dell'oscillatore armonico. Per quanto riguarda i valori energetici costituenti lo spettro dell'operatore Hamiltoniano, sono equidistanti e differiscono della grandezza $\hbar\omega$. Tale quantità di energia costituisce un quanto di eccitazione, cioè la quantità più piccola di energia sulla quale si costruisce tutto lo spettro. Gli operatori \hat{a} e \hat{a}^\dagger dai nomi autoesplicativi hanno la proprietà rispettivamente di distruggere e di creare tale quanto energetico. L'operatore \hat{N} conta il numero di quanti di uno stato generico $|n\rangle$. Vale la pena notare una fondamentale differenza dell'oscillatore armonico quantistico con il suo corrispettivo classico, oltre a quella riguardante l'effetto tunnel, vista nella sezione 2.1. In meccanica classica un oscillatore in quiete non ha nessuna energia. A differenza, l'energia di quello quantistico non si annulla mai, cioè lo stato $|0\rangle$ ha energia non nulla. Questo risultato è in perfetto accordo con le leggi generali della meccanica quantistica, in quanto, se l'energia si annullasse si violerebbe il Principio di Indeterminazione di Heisenberg secondo il quale i due operatori, quello della posizione e quello dell'impulso, non possono annullarsi contemporaneamente. L'energia minima che può avere il sistema viene chiamata *energia di punto zero* ed equivale a $\hbar\omega/2$.

Le autofunzioni, come previsto, si annullano all'infinito spaziale in quanto

$$e^{-\frac{x^2}{2l^2}} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$$

e hanno una parità definita, dunque sono *autoket* anche dell'operatore parità. Da quanto detto nel capitolo introduttivo questo implica che l'operatore parità e l'operatore dell'Hamiltoniana in questo caso commutano.

Il motivo per il quale l'oscillatore armonico costituisce uno dei sistemi più studiati della meccanica quantistica, oltre all'essere uno dei pochi sistemi totalmente risolvibile, è quello di poter approssimare un grande numero di sistemi più complicati. La caratteristica che gli conferisce tale privilegio si trova nella simmetria degli operatori di posizione e impulso, essendo questi ultimi elevati al quadrato nella formula dell'Hamiltoniana. Si può, per esempio, vedere il campo elettromagnetico della luce come un gas di oscillatori armonici. Più precisamente, considerando che durante la propagazione dell'onda i vettori dei due campi ruotano perpendicolarmente alla direzione di propagazione, si possono associare alla posizione e all'impulso del sistema oscillante. Un altro esempio importante dove si trova un'analogia con l'oscillatore è quello dei Bosoni, particelle di spin intero che obbediscono alla statistica di Bose-Einstein e che costituiscono insieme ai Fermioni una delle classi fondamentali con le quali si dividono le particelle. Un gas di Bosoni indistinguibili senza massa, ognuno dei quali trasporta un quanto di energia $\hbar\omega$, può essere visto proprio come un gas di oscillatori armonici. Più in generale si capisce l'importanza di tale modello evidenziando la frequenza con la quale si trovano in natura moti vibrazionali e periodici delle particelle costituenti la materia.

Capitolo 3

Teoria perturbativa indipendente dal tempo

La teoria perturbativa è stata sviluppata al fine di risolvere i problemi più complicati della meccanica quantistica in modo approssimativo. Come si è detto nel precedente capitolo, i mezzi matematici usati nella risoluzione di molti problemi quantistici portano ad equazioni le cui soluzioni non sono esprimibili in termini finiti. Questi problemi non possono essere risolti in maniera esatta. Il metodo perturbativo, che permette la loro risoluzione, consiste nella scissione dell'Hamiltoniana in due parti, di cui una deve avere soluzione nota, e l'altra deve essere rispettivamente piccola. Più precisamente, la prima parte può considerarsi l'Hamiltoniana di un sistema imperturbato, mentre la seconda apporterà alla sua soluzione delle piccole correzioni di natura perturbativa. Se la perturbazione è espressa in termini di una costante piccola λ , allora il risultato viene descritto da una serie di potenze, in λ . Tale serie, come si dimostrerà nel capitolo successivo è non convergente. Tuttavia, la teoria perturbativa continua a essere efficiente, entro certi limiti, in quanto troncando la serie in modo adatto si ottiene comunque una buona approssimazione della soluzione esatta. Per semplicità, la trattazione si focalizzerà soltanto al caso indipendente dal tempo.

3.1 Caso generale

Nella risoluzione dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo avviene spesso che l'Hamiltoniana, che in tal caso viene chiamata perturbata, si possa scrivere come somma di due termini

$$\hat{H} = \hat{H}_u + \hat{W} \quad (3.1.1)$$

dove \hat{H}_u è l'Hamiltoniana di un sistema con soluzione nota, chiamata imperturbata e \hat{W} una sua correzione. Tali operatori sono caratterizzati da scale di energia: \bar{H}_u fissa gli autovalori imperturbati, $\Delta\bar{H}_u$ la loro differenza e \bar{W} caratterizza il termine correttivo. Quando accade

$$\bar{W} \ll \bar{H}_u \quad e \quad \bar{W} \ll \Delta\bar{H}_u \quad (3.1.2)$$

si stabilisce che la correzione è una perturbazione e si può applicare l'algoritmo della teoria perturbativa, secondo il quale, gli autovalori e gli *autoket* perturbati si scrivono come somma dei rispettivi imperturbati più dei termini correttivi. Questi ultimi, sono determinati dalla correzione \hat{W} , denominata ora *energia di perturbazione* e, grazie alla piccolezza di \bar{W} , formano una serie asintotica.

Si suppone per semplicità che l'Hamiltoniana imperturbata abbia uno spettro totalmente discreto. Diagonalizzando un operatore autoaggiunto si ottiene un insieme completo di *autoket* linearmente indipendenti. Infatti, per \hat{H}_u si ottengono gli *autoket* e gli autovalori imperturbati

$$\hat{H}_u |a_u, u\rangle = |a_u, u\rangle h_u(a_u) \quad (3.1.3a)$$

$$\sum_{a_u} |a_u, u\rangle \langle a_u, u| = \hat{1} \quad (3.1.3b)$$

$$\langle a'_u, u | a_u, u \rangle = \delta_{a'_u, a_u} \quad (3.1.3c)$$

Analogamente, diagonalizzando l'Hamiltoniana totale \hat{H} si trovano gli *autoket* e gli autovalori perturbati

$$\hat{H} |a\rangle = |a\rangle h(a) \quad (3.1.4a)$$

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = \hat{1} \quad (3.1.4b)$$

$$\langle a' | a \rangle = \delta_{a', a} \quad (3.1.4c)$$

Il formalismo usato implica che i numeri quantici a_u etichettano gli *autoket* e gli autovalori imperturbati, mentre i numeri quantici a i corrispondenti perturbati. Di conseguenza, vengono denominati rispettivamente numeri quantici imperturbati e perturbati. Vale la pena notare che essi non sono conosciuti a priori. In linea di massima dipendono dalla scelta delle basi, dal processo di risoluzione del problema e, in parte, anche da convenzioni.

Se la perturbazione si spegne, gli *autoket* e gli autovalori dell'Hamiltoniana perturbata tendono ai rispettivi imperturbati. Cioè, per $\tilde{W} \rightarrow 0$

$$|a\rangle \rightarrow |a, u\rangle \quad (3.1.5)$$

$$h(a) \rightarrow h(a, u) \quad (3.1.6)$$

Se lo spegnimento avviene in modo regolare, i limiti degli *autoket* perturbati formano una base ortonormale per l'Hamiltoniana imperturbata. Si nota che tale base è generalmente diversa da quella vista all'inizio. Le due basi possono essere uguali nel caso particolare di non degenerazione. Si ha quindi

$$\hat{H}_u |a, u\rangle = |a, u\rangle h_u(a) \quad (3.1.7a)$$

$$\sum_a |a, u\rangle \langle a, u| = \hat{1} \quad (3.1.7b)$$

$$\langle a', u|a, u\rangle = \delta_{a,a'} \quad (3.1.7c)$$

Siano $h_{ui}, i = 1, 2, \dots$ gli autovalori distinti dell'Hamiltoniana imperturbata \hat{H}_u , allora l'insieme di tutti i numeri quantici imperturbati a_u viene suddiviso in insiemi disgiunti A_{ui} . Ognuno di essi contiene tutti e soltanto quei numeri quantici tali che $h_u(a_u) = h_{ui}$. Analogamente, l'insieme dei numeri quantici perturbati a viene suddiviso in insiemi disgiunti A_i . A sua volta A_i contiene tutti e solo quei numeri quantici tali che $h_u(a) = h_{ui}$. Gli *autoket* caratterizzati dai numeri quantici imperturbati $|a_u, u\rangle$ con a_u appartenente a A_{ui} e quelli caratterizzati dai numeri quantici perturbati $|a, u\rangle$ con a appartenente a A_i , sono entrambi basi dell'autospazio dell'autovalore h_{ui} . Di conseguenza, i due insiemi A_{ui} e A_i hanno il medesimo numero di elementi che è uguale al valore di degenerazione dell'autovalore.

Per quanto detto sinora ne segue che, se il numero quantico a appartiene all'insieme A_i , la degenerazione dell'autovalore perturbato $h(a)$ non può superare quella del rispettivo imperturbato h_{ui} . Infatti, il valore di degenerazione di un autovalore, essendo il numero di *autoket* linearmente indipendenti appartenenti ad esso, e quindi, un numero intero, non cambia sotto l'effetto di piccole variazioni dei valori caratterizzanti i parametri del sistema. Dato che, l'autovalore perturbato $h(a)$ tende a quello imperturbato $h_u(a) = h_{ui}$, nel limite nel quale la perturbazione si spegne lentamente, la degenerazione di $h(a)$ è al massimo il numero di elementi contenuti in A_i , cioè la degenerazione di h_{ui} . Spesso, la degenerazione dell'autovalore perturbato è minore di quella del rispettivo imperturbato. In tal caso, si dice che la perturbazione rimuove la degenerazione, completamente o parzialmente. Come risultato, un livello energetico singolo nel sistema imperturbato si divide in tanti livelli, adiacenti e vicini, in quello perturbato. Suddette collezioni di livelli energetici vengono chiamate nell'ambito della spettroscopia multiplatti e la loro presenza viene denominata struttura fine del singolo livello.

Come si è già accennato, l'apparato matematico di tale teoria permette di scrivere la soluzione totale come somma della rispettiva imperturbata più delle correzioni. Più precisamente, si ha

$$h(a) = h(a; 0) + h(a; 1) + h(a; 2) + \dots \quad (3.1.8)$$

$$|a\rangle = |a, 0\rangle + |a, 1\rangle + |a, 2\rangle + \dots \quad (3.1.9)$$

con $h(a; 0) = h_{ui}$, $|a, 0\rangle = |a, u\rangle$ e $h(a; n) = O(\bar{W}^n)$, $|a, n\rangle = O(\bar{W}^n)$

La teoria perturbativa fornisce un algoritmo del tutto generale per calcolare i termini delle espansioni. Per descrivere tale algoritmo conviene introdurre due operatori, il *proiettore* e il *risolvente* dell'autovalore h_{ui} che sono definiti, rispettivamente, dalle espressioni

$$\hat{P}_u(h_{ui}) = \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u)=h_{ui}}} |a_u, u\rangle \langle a_u, u| \quad (3.1.10)$$

e

$$\hat{D}_u(h_{ui}) = \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u)\neq h_{ui}}} |a_u, u\rangle \frac{1}{h_{ui} - h_u(a_u)} \langle a_u, u| \quad (3.1.11)$$

Nell'ordine perturbativo più basso $|a, 0\rangle$ e $h(a; 1)$ si calcolano risolvendo il problema agli autovalori

$$\hat{P}_u(h_{ui}) \hat{W} \hat{P}_u(h_{ui}) |a, 0\rangle = |a, 0\rangle h(a; 1) \quad (3.1.12)$$

Nel successivo ordine perturbativo, si calcolano $|a, 1\rangle$ e $h(a; 2)$ risolvendo

$$\begin{aligned} \hat{P}_u(h_{ui}) (\hat{W} + \hat{W} \hat{D}_u(h_{ui}) \hat{W}) \hat{P}_u(h_{ui}) (|a, 0\rangle + \hat{P}_u(h_{ui}) |a, 1\rangle) \\ = (|a, 0\rangle + \hat{P}_u(h_{ui}) |a, 1\rangle) (h(a; 1) + h(a; 2)) \end{aligned} \quad (3.1.13)$$

con

$$(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) |a, 1\rangle = \hat{D}_u(h_{ui}) \hat{W} |a, 0\rangle \quad (3.1.14)$$

In seguito, si dimostrano le precedenti affermazioni.

- Inizialmente si dimostra la

$$\hat{H}_u \hat{P}_u(h_{ui}) = \hat{P}_u(h_{ui}) \hat{H}_u = h_{ui} \hat{P}_u(h_{ui}) \quad (3.1.15)$$

Dalla (3.1.10) usando la (3.1.3a) si ha

$$\begin{aligned} \hat{H}_u \hat{P}_u(h_{ui}) &= \hat{H}_u \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u)=h_{ui}}} |a_u, u\rangle \langle a_u, u| \\ &= \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u)=h_{ui}}} \hat{H}_u |a_u, u\rangle \langle a_u, u| = \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u)=h_{ui}}} |a_u, u\rangle h_u(a_u) \langle a_u, u| \\ &= \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u)=h_{ui}}} |a_u, u\rangle h_{ui} \langle a_u, u| = h_{ui} \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u)=h_{ui}}} |a_u, u\rangle \langle a_u, u| = h_{ui} \hat{P}_u(h_{ui}) \end{aligned}$$

La seconda parte si dimostra in modo del tutto analogo.

- Successivamente si dimostrano le

$$\hat{D}_u(h_{ui})\hat{P}_u(h_{ui}) = \hat{P}_u(h_{ui})\hat{D}_u(h_{ui}) = 0 \quad (3.1.16)$$

$$(h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u)\hat{D}_u(h_{ui}) = \hat{D}_u(h_{ui})(h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u) = \hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}) \quad (3.1.17)$$

Infatti,

$$\begin{aligned} \hat{D}_u(h_{ui})\hat{P}_u(h_{ui}) &= \\ &= \left(\sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) \neq h_{ui}}} |a_u, u\rangle \frac{1}{h_{ui} - h_u(a_u)} \langle a_u, u| \right) \cdot \left(\sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) = h_{ui}}} |a_u, u\rangle \langle a_u, u| \right) \\ &= \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) \neq h_{ui}}} \sum_{\substack{a'_u \\ h_u(a'_u) = h_{ui}}} |a_u, u\rangle \frac{1}{h_{ui} - h_u(a_u)} \langle a_u, u|a'_u, u\rangle \langle a'_u, u| = 0 \end{aligned}$$

in quanto $\langle a_u, u|a'_u, u\rangle = \delta_{a_u, a'_u}$ è non nullo solo per $a_u = a'_u$ che è inconsistente con le $h_u(a_u) \neq h_{ui}$ e $h_u(a'_u) = h_{ui}$. Nello stesso modo si verifica anche la seconda parte della relazione.

$$\begin{aligned} (h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u)\hat{D}_u(h_{ui}) &= (h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u) \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) \neq h_{ui}}} |a_u, u\rangle \frac{1}{h_{ui} - h_u(a_u)} \langle a_u, u| \\ &= \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) \neq h_{ui}}} |a_u, u\rangle \frac{h_{ui}}{h_{ui} - h_u(a_u)} \langle a_u, u| - \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) \neq h_{ui}}} \hat{H}_u |a_u, u\rangle \frac{1}{h_{ui} - h_u(a_u)} \langle a_u, u| \\ &= \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) \neq h_{ui}}} |a_u, u\rangle \frac{h_{ui}}{h_{ui} - h_u(a_u)} \langle a_u, u| - \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) \neq h_{ui}}} |a_u, u\rangle \frac{h_u(a_u)}{h_{ui} - h_u(a_u)} \langle a_u, u| \\ &= \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) \neq h_{ui}}} |a_u, u\rangle \frac{h_{ui} - h_u(a_u)}{h_{ui} - h_u(a_u)} \langle a_u, u| = \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) \neq h_{ui}}} |a_u, u\rangle \langle a_u, u| \\ &= \sum_{a_u} |a_u, u\rangle \langle a_u, u| - \sum_{\substack{a_u \\ h_u(a_u) = h_{ui}}} |a_u, u\rangle \langle a_u, u| = \hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}) \end{aligned}$$

dove nell'ultima riga si è usata la relazione di completezza (3.1.3b). Si può verificare come le relazioni (3.1.15), (3.1.16) e (3.1.17) siano compatibili

$$\begin{aligned} \hat{P}_u(h_{ui})(h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u)\hat{D}_u(h_{ui}) &= \hat{P}_u(h_{ui})\hat{D}_u(h_{ui})(h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u) = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow (\hat{P}_u(h_{ui})h_{ui} - \hat{P}_u(h_{ui})\hat{H}_u)\hat{D}_u(h_{ui}) &= 0 \Rightarrow \hat{P}_u(h_{ui})h_{ui} = \hat{P}_u(h_{ui})\hat{H}_u \end{aligned}$$

- Dalla (3.1.4a) e (3.1.1) risulta

$$(\hat{H}_u + \hat{W})|a\rangle = |a\rangle h(a) \Rightarrow (\hat{H}_u + \hat{W} - h(a)\hat{1})|a\rangle = 0 \quad (3.1.18)$$

Da quest'ultima relazione ne consegue che

$$\hat{P}_u(h_{ui})(\hat{H}_u + \hat{W} - h(a)\hat{1})|a\rangle = 0 \Rightarrow \hat{P}_u(h_{ui})\hat{H}_u|a\rangle + \hat{P}_u(h_{ui})(\hat{W} - h(a)\hat{1})|a\rangle = 0$$

Usando la (3.1.15),

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle h_{ui} + \hat{P}_u(h_{ui})(\hat{W} - h(a)\hat{1})|a\rangle &= 0 \Rightarrow \\ \hat{P}_u(h_{ui})(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})|a\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Sottraendo e sommando il termine $\hat{P}_u(h_{ui})(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle$, si ha

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{P}_u(h_{ui})(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle \\ + \hat{P}_u(h_{ui})(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle &= 0 \Rightarrow \\ [\hat{P}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui}) - (h(a) - h_{ui})\hat{P}_u(h_{ui})]|a\rangle & \quad (3.1.19) \\ + \hat{P}_u(h_{ui})\hat{W}(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle &= 0 \end{aligned}$$

dove si è applicata la

$$\hat{P}_u(h_{ui})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) = \hat{P}_u(h_{ui}) - \hat{P}_u^2(h_{ui}) = \hat{P}_u(h_{ui}) - \hat{P}_u(h_{ui}) = 0 \quad (3.1.20)$$

dovuta al fatto che l'operatore è idempotente, cioè $\hat{P}_u(h_{ui}) = \hat{P}_u^2(h_{ui})$.

Analogamente, usando di nuovo la (3.1.18) si ha,

$$\begin{aligned} (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{H}_u + \hat{W} - h(a)\hat{1})|a\rangle &= 0 \Rightarrow \\ [(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))\hat{H}_u + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - h(a)\hat{1})]|a\rangle &= 0 \Rightarrow \\ [\hat{H}_u - \hat{P}_u(h_{ui})\hat{H}_u + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - h(a)\hat{1})]|a\rangle &= 0 \Rightarrow \\ [\hat{H}_u - h_{ui}\hat{1} + h_{ui}\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})h_{ui} + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - h(a)\hat{1})]|a\rangle &= 0 \quad (3.1.21) \end{aligned}$$

dove si è usata la (3.1.15) e si è sottratto e sommato il termine $h_{ui}\hat{1}$.

Si nota che vale la

$$(\hat{H}_u - h_{ui}\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) = \hat{H}_u - \hat{H}_u\hat{P}_u(h_{ui}) - h_{ui}\hat{1} + h_{ui}\hat{P}_u(h_{ui}) = \hat{H}_u - h_{ui}\hat{1}$$

Sostituendo quest'ultima relazione nella (3.1.21) si ottiene

$$\begin{aligned} [(\hat{H}_u - h_{ui}\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) + h_{ui}\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})h_{ui} + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - h(a)\hat{1})]|a\rangle &= 0 \\ [(\hat{H}_u - h_{ui}\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))h_{ui} + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - h(a)\hat{1})]|a\rangle &= 0 \\ [(\hat{H}_u - h_{ui}\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})]|a\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Riapplicando di nuovo l'identità

$$\begin{aligned}
& [(\hat{H}_u - h_{ui}\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})\hat{P}_u(h_{ui}) \\
& \quad + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))]|a\rangle = 0 \Rightarrow \\
& [(h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u)(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) - (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui}) \\
& \quad + (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(h(a) - h_{ui})\hat{P}_u(h_{ui}) \\
& \quad - (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))]|a\rangle = 0
\end{aligned}$$

il terzo termine si annulla dalla (3.1.20) e si ottiene

$$\begin{aligned}
& [(h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u)(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) - (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui}) \\
& \quad - (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))]|a\rangle = 0
\end{aligned}$$

Applicando, infine, l'operatore $\hat{D}_u(h_{ui})$ si ha

$$\begin{aligned}
& \hat{D}_u(h_{ui})(h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u)(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle - \hat{D}_u(h_{ui})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle \\
& - \hat{D}_u(h_{ui})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle = 0 \quad (3.1.22)
\end{aligned}$$

1. Il primo termine diventa

$$\hat{D}_u(h_{ui})(h_{ui}\hat{1} - \hat{H}_u)(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) = \hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}) \quad (3.1.23)$$

dove si sono applicate la (3.1.17) e la

$$(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) = \hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}) \quad (3.1.24)$$

2. Per il secondo termine, dalla (3.1.16)

$$\hat{D}_u(h_{ui})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) = \hat{D}_u(h_{ui}) - \hat{D}_u(h_{ui})\hat{P}_u(h_{ui}) = \hat{D}_u(h_{ui}) \quad (3.1.25)$$

Quindi,

$$\hat{D}_u(h_{ui})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui}) = \hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui}) \quad (3.1.26)$$

3. Infine per il terzo termine

$$\begin{aligned}
& \hat{D}_u(h_{ui})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui})) \quad (3.1.27) \\
& = \hat{D}_u(h_{ui})(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))
\end{aligned}$$

dove si è riapplicata la (3.1.25)

Sostituendo nella (3.1.22) le (3.1.23), (3.1.26), e (3.1.27) si ha

$$\begin{aligned}
& (\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle - \hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle \quad (3.1.28) \\
& - \hat{D}_u(h_{ui})(\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle = 0
\end{aligned}$$

Dalle (3.1.28) e (3.1.19) si ottiene

$$\begin{aligned}
& \hat{P}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle - (h(a) - h_{ui})\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle + \hat{P}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle \\
& + \hat{P}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle \\
& \quad - \hat{P}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{D}_u(h_{ui})(h(a) - h_{ui})(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle = 0 \\
& \hat{P}_u(h_{ui})[\hat{W} + \hat{W}\hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}]\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle - (h(a) - h_{ui})\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle \quad (3.1.29) \\
& + \hat{P}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{D}_u(h_{ui})[\hat{W} - (h(a) - h_{ui})\hat{1}](\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle = 0
\end{aligned}$$

- Per concludere la dimostrazione si studiano le relazioni (3.1.28) e (3.1.29) ottenute in precedenza.

Considerando che \hat{W} e $(h(a) - h_{ui})$ sono entrambi dell'ordine $O(\bar{W})$ la (3.1.28) si può approssimare come

$$(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a\rangle - \hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle = O(\bar{W}^2) \quad (3.1.30)$$

mentre la (3.1.29) considerando anche la (3.1.30)

$$\hat{P}_u(h_{ui})[\hat{W} + \hat{W}\hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}]\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle - (h(a) - h_{ui})\hat{P}_u(h_{ui})|a\rangle = O(\bar{W}^3) \quad (3.1.31)$$

Usando le (3.1.8) e (3.1.9) esse diventano rispettivamente

$$(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(|a, 0\rangle + |a, 1\rangle) - \hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui})(|a, 0\rangle + |a, 1\rangle) = O(\bar{W}^2) \quad (3.1.32)$$

$$\begin{aligned}
& \hat{P}_u(h_{ui})[\hat{W} + \hat{W}\hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}]\hat{P}_u(h_{ui})(|a, 0\rangle + |a, 1\rangle) - \\
& \quad - (h(a; 1) + h(a; 2))\hat{P}_u(h_{ui})(|a, 0\rangle + |a, 1\rangle) = O(\bar{W}^3)
\end{aligned} \quad (3.1.33)$$

Dalla (3.1.32), eguagliando gli ordini perturbativi, risulta

$$(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a, 0\rangle = 0 \quad (3.1.34)$$

$$(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a, 1\rangle - \hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui})|a, 0\rangle = 0 \quad (3.1.35)$$

Combinando le (3.1.34) e (3.1.35) si ottiene la (3.1.12). Dalla (3.1.33), invece, usando ancora una volta la (3.1.34) ed eguagliando gli ordini perturbativi si ha

$$\begin{aligned}
& [\hat{P}_u(h_{ui})\hat{W}\hat{P}_u(h_{ui}) - h(a; 1)\hat{P}_u(h_{ui})]|a, 0\rangle = 0 \\
& \hat{P}_u(h_{ui})[\hat{W} + \hat{W}\hat{D}_u(h_{ui})\hat{W}]\hat{P}_u(h_{ui})(|a, 0\rangle + \hat{P}_u(h_{ui})|a, 1\rangle) \\
& \quad = (|a, 0\rangle + \hat{P}_u(h_{ui})|a, 1\rangle)(h(a; 1) - h(a; 2))
\end{aligned}$$

concludendo così la dimostrazione. ■

I problemi agli autovalori (3.1.12) e (3.1.13) hanno dimensionalità pari alla degenerazione dell'autovalore h_{ui} . Le soluzioni devono soddisfare le condizioni di ortonormalità.

$$\langle a', 0 | a, 0 \rangle = \delta_{a', a} \quad (3.1.36)$$

$$(\langle a', 0 | + \langle a', 1 | \hat{P}_u(h_{ui}))(|a, 0 \rangle + \hat{P}_u(h_{ui})|a, 1 \rangle) = \delta_{a', a} \quad (3.1.37)$$

Quest'ultima si dimostra dalla

$$(\langle a', 0 | + \langle a', 1 |)(|a, 0 \rangle + |a, 1 \rangle) = \delta_{a', a} \quad (3.1.38)$$

facendo l'identità

$$\begin{aligned} & (\langle a', 0 | + \langle a', 1 |) \hat{P}_u(h_{ui})(|a, 0 \rangle + |a, 1 \rangle) + \\ & (\langle a', 0 | + \langle a', 1 |)(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))(|a, 0 \rangle + |a, 1 \rangle) = \delta_{a', a} \end{aligned}$$

e considerando che

$$\hat{P}_u(h_{ui})|a, 0 \rangle = |a, 0 \rangle \quad (3.1.39)$$

Siccome $(\hat{1} - \hat{P}_u(h_{ui}))|a, 1 \rangle = O(\bar{W})$ il secondo termine si annulla essendo dell'ordine di $O(\bar{W}^2)$.

■

I risultati ottenuti si generalizzano direttamente al caso in cui l'operatore \hat{H}_u ha anche uno spettro continuo. A tale scopo, occorre solamente aggiungere alle somme sullo spettro discreto gli integrali corrispondenti allo spettro continuo.

3.2 Caso non degenere

Nel caso di non degenerazione dell'autovalore h_{ui} , le equazioni della teoria perturbativa si semplificano sensibilmente. In questo caso particolare conviene esprimere la correzione alla Hamiltoniana imperturbata come prodotto di un operatore perturbativo adatto e una costante λ da considerare piccola. L'Hamiltoniana totale, in tal caso, viene espressa dalla

$$\hat{H} = \hat{H}_u + \lambda \hat{W} \quad (3.2.1)$$

e di conseguenza le serie di potenze che danno la correzione rispettivamente degli *autoket* e degli autovalori imperturbati diventano

$$|a\rangle = |a; 0\rangle + |a; 1\rangle\lambda + |a; 2\rangle\lambda^2 + |a; 3\rangle\lambda^3 + \dots \quad (3.2.2)$$

$$\begin{aligned} h(a) &= h(a; 0) + h(a; 1) + h(a; 2) + h(a; 3) + \dots \\ &= E_a^{(0)} + \lambda E_a^{(1)} + \lambda^2 E_a^{(2)} + \lambda^3 E_a^{(3)} + \dots \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

con $h(a; 0) = h_{ui}$ e $|a; 0\rangle = |a_u, u\rangle = |a, u\rangle$ in quanto non c'è degenerazione.

Nelle due formule precedenti è stata semplicemente esplicitata la dipendenza dalla costante senza variare il significato fisico delle serie. Gli autovalori sono stati rinominati, al fine di ottenere maggior chiarezza e un formalismo più familiare. Sostituendo nella (3.1.4a) le (3.2.1), (3.2.2) e (3.2.3) si ha

$$\begin{aligned} &(\hat{H}_u + \lambda \hat{W})(|a; 0\rangle + |a; 1\rangle\lambda + |a; 2\rangle\lambda^2 + |a; 3\rangle\lambda^3 + \dots) \\ &= (|a; 0\rangle + |a; 1\rangle\lambda + |a; 2\rangle\lambda^2 + |a; 3\rangle\lambda^3 + \dots) \times \\ &\quad \times (E_a^{(0)} + \lambda E_a^{(1)} + \lambda^2 E_a^{(2)} + \lambda^3 E_a^{(3)} + \dots) \Rightarrow \\ &\hat{H}_u|a; 0\rangle + \hat{H}_u|a; 1\rangle\lambda + \hat{H}_u|a; 2\rangle\lambda^2 + \hat{H}_u|a; 3\rangle\lambda^3 + \dots + \hat{W}|a; 0\rangle\lambda \\ &\quad + \hat{W}|a; 1\rangle\lambda^2 + \hat{W}|a; 2\rangle\lambda^3 + \hat{W}|a; 3\rangle\lambda^4 + \dots = \\ &|a; 0\rangle E_a^{(0)} + |a; 0\rangle E_a^{(1)}\lambda + |a; 0\rangle E_a^{(2)}\lambda^2 + |a; 0\rangle E_a^{(3)}\lambda^3 + \dots \\ &+ |a; 1\rangle E_a^{(0)}\lambda + |a; 1\rangle E_a^{(1)}\lambda^2 + |a; 1\rangle E_a^{(2)}\lambda^3 + |a; 1\rangle E_a^{(3)}\lambda^4 + \dots \\ &+ |a; 2\rangle E_a^{(0)}\lambda^2 + |a; 2\rangle E_a^{(1)}\lambda^3 + |a; 2\rangle E_a^{(2)}\lambda^4 + |a; 2\rangle E_a^{(3)}\lambda^5 + \dots \\ &+ |a; 3\rangle E_a^{(0)}\lambda^3 + |a; 3\rangle E_a^{(1)}\lambda^4 + |a; 3\rangle E_a^{(2)}\lambda^5 + |a; 3\rangle E_a^{(3)}\lambda^6 + \dots \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\hat{H}_u|a; 0\rangle = |a; 0\rangle E_a^{(0)} \quad (3.2.4a)$$

$$\hat{H}_u|a; 1\rangle + \hat{W}|a; 0\rangle = |a; 0\rangle E_a^{(1)} + |a; 1\rangle E_a^{(0)} \quad (3.2.4b)$$

$$\hat{H}_u|a; 2\rangle + \hat{W}|a; 1\rangle = |a; 0\rangle E_a^{(2)} + |a; 1\rangle E_a^{(1)} + |a; 2\rangle E_a^{(0)} \quad (3.2.4c)$$

$$\hat{H}_u|a;3\rangle + \hat{W}|a;2\rangle = |a;0\rangle E_a^{(3)} + |a;1\rangle E_a^{(2)}|a;2\rangle E_a^{(1)} + |a;3\rangle E_a^{(0)} \quad (3.2.4d)$$

Al fine di trovare le formule per i primi termini delle espansioni (3.2.2) e (3.2.3) si inizia moltiplicando la (3.2.4b) per $\langle a;0|$ in modo da isolare l'autovalore $E_a^{(1)}$

$$\begin{aligned} \langle a;0|\hat{H}_u|a;1\rangle + \langle a;0|\hat{W}|a;0\rangle &= \langle a;0|a;0\rangle E_a^{(1)} + \langle a;0|a;1\rangle E_a^{(0)} \Rightarrow \\ E_a^{(0)}\langle a;0|a;1\rangle + \langle a;0|\hat{W}|a;0\rangle &= E_a^{(1)} + \langle a;0|a;1\rangle E_a^{(0)} \end{aligned}$$

dove si è applicata la condizione di ortonormalità (3.1.7c). Quindi,

$$E_a^{(1)} = \langle a;0|\hat{W}|a;0\rangle \quad (3.2.5)$$

Questa equazione, da un punto di vista pratico, può essere considerata una delle più importanti della meccanica quantistica. Essa afferma che la correzione al primo ordine dell'energia è il valore di aspettazione della perturbazione nello stato imperturbato.

Usando ancora una volta la (3.2.4b) si trova la formula per l'*autoket* $|a;1\rangle$. Più precisamente

$$(\hat{H}_u - E_a^{(0)}\hat{1})|a;1\rangle = -(\hat{W} - E_a^{(1)}\hat{1})|a;0\rangle \quad (3.2.6)$$

Il membro di destra è una funzione nota, per cui la relazione rappresenta un'equazione differenziale non omogenea per $|a;1\rangle$. Gli *autoket* imperturbati $|a;0\rangle$ formano un insieme completo, di conseguenza $|a;1\rangle$ si può esprimere come una loro combinazione lineare

$$|a;1\rangle = \sum_{a' \neq a} |a';0\rangle c_{a'} \quad (3.2.7)$$

dove si è ommesso il termine $a' = a$ in quanto se $|a;1\rangle$ soddisfa la (3.2.6) anche la $|a;1\rangle + \alpha|a;0\rangle$ la soddisfa. Sostituendo nella (3.2.6) la (3.2.7) si ha

$$(\hat{H}_u - E_a^{(0)}\hat{1}) \sum_{a' \neq a} |a';0\rangle c_{a'} = -(\hat{W} - E_a^{(1)}\hat{1})|a;0\rangle \Rightarrow$$

$$\sum_{a' \neq a} |a';0\rangle c_{a'} (E_{a'}^{(0)} - E_a^{(0)}) = -(\hat{W} - E_a^{(1)}\hat{1})|a;0\rangle$$

Moltiplicando entrambi i termini per $\langle a'';0|$ si ha

$$\sum_{a' \neq a} \langle a'';0|a';0\rangle c_{a'} (E_{a'}^{(0)} - E_a^{(0)}) = -\langle a'';0|\hat{W}|a;0\rangle + E_a^{(1)}\langle a'';0|a;0\rangle$$

Se $a'' = a$ il termine di sinistra si annulla e si riottiene ancora una volta la (3.2.5). In alternativa, se $a'' \neq a$ si ha

$$c_{a''} (E_{a''}^{(0)} - E_a^{(0)}) = -\langle a'';0|\hat{W}|a;0\rangle \Rightarrow$$

$$c_{a''} = \frac{\langle a''; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{E_a^{(0)} - E_{a''}^{(0)}} \quad (3.2.8)$$

Sostituendo la (3.2.8) nella (3.2.7) si trova l'*autoket* al primo ordine perturbativo

$$|a; 1\rangle = \sum_{a' \neq a} |a'; 0\rangle \frac{\langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)}} \quad (3.2.9)$$

Dalla (3.2.4c) moltiplicando entrambi i termini per $\langle a; 0 |$ si ha

$$\langle a; 0 | \hat{H}_u | a; 2 \rangle + \langle a; 0 | \hat{W} | a; 1 \rangle = \langle a; 0 | a; 0 \rangle E_a^{(2)} + \langle a; 0 | a; 1 \rangle E_a^{(1)} + \langle a; 0 | a; 2 \rangle E_a^{(0)} \Rightarrow$$

$$E_a^{(0)} \langle a; 0 | a; 2 \rangle + \langle a; 0 | \hat{W} | a; 1 \rangle = E_a^{(2)} + \langle a; 0 | a; 1 \rangle E_a^{(1)} + \langle a; 0 | a; 2 \rangle E_a^{(0)} \Rightarrow$$

$$E_a^{(2)} = \langle a; 0 | \hat{W} | a; 1 \rangle \quad (3.2.10)$$

dove il termine $\langle a; 0 | a; 1 \rangle$ è nullo poiché

$$\langle a; 0 | a; 1 \rangle = \langle a; 0 | \sum_{a' \neq a} |a'; 0\rangle c_{a'} = \sum_{a' \neq a} \langle a; 0 | a'; 0 \rangle c_{a'} = 0 \quad (3.2.11)$$

Sostituendo nella (3.2.10) la (3.2.9) si trova la correzione dell'energia al secondo ordine perturbativo

$$E_a^{(2)} = \langle a; 0 | \hat{W} \sum_{a' \neq a} |a'; 0\rangle \frac{\langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)}} \Rightarrow$$

$$E_a^{(2)} = \sum_{a' \neq a} \frac{|\langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle|^2}{E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)}} \quad (3.2.12)$$

Per trovare la correzione al terzo ordine perturbativo dell'energia è necessario prima trovare $|a; 2\rangle$ in quanto dalla (3.2.4d) moltiplicandola per $\langle a; 0 |$ risulta

$$\langle a; 0 | \hat{H}_u | a; 3 \rangle + \langle a; 0 | \hat{W} | a; 2 \rangle = \langle a; 0 | a; 0 \rangle E_a^{(3)} + \langle a; 0 | a; 1 \rangle E_a^{(2)} \\ + \langle a; 0 | a; 2 \rangle E_a^{(1)} + \langle a; 0 | a; 3 \rangle E_a^{(0)} \Rightarrow$$

$$E_a^{(0)} \langle a; 0 | a; 3 \rangle + \langle a; 0 | \hat{W} | a; 2 \rangle = E_a^{(3)} + \langle a; 0 | a; 2 \rangle E_a^{(1)} + \langle a; 0 | a; 3 \rangle E_a^{(0)}$$

dove è stata applicata di nuovo la (3.2.11). Quindi

$$E_a^{(3)} = \langle a; 0 | \hat{W} | a; 2 \rangle - \langle a; 0 | a; 2 \rangle E_a^{(1)} \quad (3.2.13)$$

Dalla (3.2.4c) risulta

$$(\hat{H}_u - E_a^{(0)} \hat{1}) |a; 2\rangle = -(\hat{W} - E_a^{(1)} \hat{1}) |a; 1\rangle + |a; 0\rangle E_a^{(2)} \quad (3.2.14)$$

Analogamente a prima, si esprimono gli *autoket* perturbati come combinazione lineare degli *autoket* imperturbati. Per quanto riguarda $|a; 1\rangle$ la combinazione lineare è data dalla (3.2.9), mentre per gli $|a; 2\rangle$ è data da

$$|a; 2\rangle = \sum_{a'' \neq a} |a''; 0\rangle c_{a''} \quad (3.2.15)$$

Sostituendo le combinazioni lineari all'interno della (3.2.14) si ha

$$\begin{aligned} & \sum_{a'' \neq a} |a''; 0\rangle (E_{a''}^{(0)} - E_a^{(0)}) c_{a''} \\ &= -(\hat{W} - E_a^{(1)} \hat{1}) \sum_{a' \neq a} |a'; 0\rangle \frac{\langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)}} + |a; 0\rangle E_a^{(2)} \Rightarrow \\ & \sum_{a'' \neq a} |a''; 0\rangle (E_{a''}^{(0)} - E_a^{(0)}) c_{a''} = - \sum_{a' \neq a} \hat{W} |a'; 0\rangle \frac{\langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)}} \\ & \quad + \sum_{a' \neq a} |a'; 0\rangle E_a^{(1)} \frac{\langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)}} + |a; 0\rangle E_a^{(2)} \end{aligned}$$

Moltiplichiamo entrambi i termini per $\langle a'''; 0 |$

$$\begin{aligned} & \sum_{a'' \neq a} \langle a'''; 0 | a''; 0 \rangle (E_{a''}^{(0)} - E_a^{(0)}) c_{a''} = \quad (3.2.16) \\ & \quad - \sum_{a' \neq a} \langle a'''; 0 | \hat{W} | a'; 0 \rangle \frac{\langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)}} \\ & \quad + \sum_{a' \neq a} \langle a'''; 0 | a'; 0 \rangle E_a^{(1)} \frac{\langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)}} + \langle a'''; 0 | a; 0 \rangle E_a^{(2)} \end{aligned}$$

Per $a''' = a$ il primo e il terzo termine si annullano e si ottiene di nuovo la (3.2.12). Altrimenti

$$c_{a'''} = \sum_{a' \neq a} \frac{\langle a'''; 0 | \hat{W} | a'; 0 \rangle \langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{(E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)})(E_a^{(0)} - E_{a'''}^{(0)})} - E_a^{(1)} \frac{\langle a'''; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{(E_a^{(0)} - E_{a'''}^{(0)})^2} \quad (3.2.17)$$

Sostituendo quest'ultima nella (3.2.15) si ottiene alla fine

$$\begin{aligned}
|a; 2\rangle = \sum_{a'' \neq a} \sum_{a' \neq a} |a''; 0\rangle \frac{\langle a''; 0 | \hat{W} | a'; 0 \rangle \langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{(E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)})(E_a^{(0)} - E_{a''}^{(0)})} \\
- \sum_{a'' \neq a} |a''; 0\rangle E_a^{(1)} \frac{\langle a''; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{(E_a^{(0)} - E_{a''}^{(0)})^2}
\end{aligned} \tag{3.2.18}$$

Infine sostituendo la (3.2.18) nella (3.2.13) si ottiene la formula per la correzione al terzo ordine dell'energia. Si nota che il termine $\langle a; 0 | a; 2 \rangle E_a^{(1)}$ nella (3.2.13) si annulla a causa della (3.2.15).

$$\begin{aligned}
E_a^{(3)} &= \sum_{a'' \neq a} \sum_{a' \neq a} \langle a; 0 | \hat{W} | a''; 0 \rangle \frac{\langle a''; 0 | \hat{W} | a'; 0 \rangle \langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{(E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)})(E_a^{(0)} - E_{a''}^{(0)})} \\
&\quad - \sum_{a'' \neq a} \langle a; 0 | \hat{W} | a''; 0 \rangle E_a^{(1)} \frac{\langle a''; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{(E_a^{(0)} - E_{a''}^{(0)})^2} \\
E_a^{(3)} &= \sum_{a'' \neq a} \sum_{a' \neq a} \frac{\langle a; 0 | \hat{W} | a''; 0 \rangle \langle a''; 0 | \hat{W} | a'; 0 \rangle \langle a'; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle}{(E_a^{(0)} - E_{a'}^{(0)})(E_a^{(0)} - E_{a''}^{(0)})} \\
&\quad - E_a^{(1)} \sum_{a'' \neq a} \frac{|\langle a''; 0 | \hat{W} | a; 0 \rangle|^2}{(E_a^{(0)} - E_{a''}^{(0)})^2}
\end{aligned} \tag{3.2.19}$$

■

Analogamente, si può procedere nel calcolo degli ordini perturbativi più alti, ma, nella pratica, questo livello fornisce già una buona approssimazione del risultato. Inoltre, come si dimostrerà nel capitolo successivo, le serie sono asintotiche e di conseguenza, dopo un certo ordine perturbativo, i termini dell'espansione cessano di approssimare in misura sempre maggiore la soluzione esatta e iniziano a divergere.

Capitolo 4

Studio perturbativo dell'oscillatore anarmonico

Al fine di determinare i primi quattro livelli energetici di un potenziale anarmonico è stata applicata la Teoria perturbativa indipendente dal tempo sull'Hamiltoniana imperturbata dell'oscillatore armonico soggetta ad una piccola perturbazione quartica. Dopo aver trovato i risultati con il metodo analitico, li si è confrontati con quelli esatti trovati numericamente per determinare l'efficacia dell'approssimazione perturbativa. I risultati numerici sono, in realtà, a loro volta il risultato di un'approssimazione dato che sono stati ottenuti diagonalizzando tramite il programma *Wolfram Mathematica* la matrice $\langle \phi_n | \hat{H} | \phi_m \rangle$ dove \hat{H} è l'Hamiltoniana perturbata e $|\phi_n\rangle$ gli autostati imperturbati. Tuttavia, la precisione dei risultati è ottima in quanto aumenta con l'aumentare del rango fino ad avere delle soluzioni esatte nel caso ipotetico di una matrice di rango infinito. Dal confronto dei risultati emerge che l'algoritmo della teoria perturbativa è tanto più efficace quanto più piccoli sono il numero dello stato quantico n e il coefficiente moltiplicativo ϵ del termine perturbativo. Infatti, aumentando questi due parametri aumenta anche la discrepanza tra i valori ottenuti con i due metodi.

4.1 Approssimazione perturbativa

Per calcolare numericamente gli autovalori energetici dell'Hamiltoniana perturbata

$$\hat{H} = \hat{H}_u + \epsilon \hat{V} \quad (4.1.1)$$

dove \hat{H}_u è l'Hamiltoniana imperturbata dell'oscillatore armonico e \hat{V} una perturbazione quartica

$$\hat{H}_u = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2} \quad (4.1.2)$$

$$\hat{V} = \hat{q}^4 \quad (4.1.3)$$

$$\epsilon \ll 1 \quad (4.1.4)$$

sono state utilizzate le formule (3.2.5), (3.2.12) e (3.2.19)

$$h(n; 1) = \langle n; u | \epsilon \hat{V} | n; u \rangle = \epsilon \langle n; u | \hat{V} | n; u \rangle \quad (4.1.5)$$

$$h(n; 2) = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | \epsilon \hat{V} | n; u \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} = \epsilon^2 \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | \hat{V} | n; u \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \quad (4.1.6)$$

$$\begin{aligned} h(n; 3) &= \sum_{n' \neq n} \sum_{n'' \neq n} \frac{\langle n; u | \epsilon \hat{V} | n'; u \rangle \langle n'; u | \epsilon \hat{V} | n''; u \rangle \langle n''; u | \epsilon \hat{V} | n; u \rangle}{(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)})(E_n^{(0)} - E_{n''}^{(0)})} \\ &\quad - \langle n; u | \epsilon \hat{V} | n; u \rangle \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | \epsilon \hat{V} | n; u \rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)})^2} = \\ &= \epsilon^3 \left(\sum_{n' \neq n} \sum_{n'' \neq n} \frac{\langle n; u | \hat{V} | n'; u \rangle \langle n'; u | \hat{V} | n''; u \rangle \langle n''; u | \hat{V} | n; u \rangle}{(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)})(E_n^{(0)} - E_{n''}^{(0)})} \right. \\ &\quad \left. - \langle n; u | \hat{V} | n; u \rangle \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | \hat{V} | n; u \rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)})^2} \right) \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

dove $|n; u\rangle$ è l'autoket imperturbato. In questo modo è stato ottenuto

$$E_n = E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + \epsilon^3 E_n^{(3)} + \dots \quad (4.1.8)$$

con $E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$

Al fine di effettuare i calcoli dettati dall'algoritmo della teoria perturbativa descritto sopra è stato necessario usare gli operatori di creazione e annichilazione. Per un oscillatore armonico unidimensionale di massa m e frequenza ω le relazioni che legano gli operatori di creazione e annichilazione con gli operatori di posizione e impulso sono date dalle (2.2.36), (2.2.37) e (2.2.38), di seguito riportate

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}}(\hat{p} - im\omega\hat{q}) \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{(2m\hbar\omega)^{1/2}}(\hat{p} + im\omega\hat{q}) \\ \hat{q} &= -i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})\end{aligned}$$

Ponendo $l = \sqrt{\hbar/m\omega}$ si ottiene

$$\hat{q} = \frac{-il}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (4.1.9)$$

Una volta che l'operatore posizione risulta espresso in funzione degli operatori di creazione e annichilazione cambia anche la forma del potenziale perturbativo

$$\hat{V} = \hat{q}^4 = \frac{l^4}{4}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 \quad (4.1.10)$$

A questo punto sono state applicate le formule (4.1.5)-(4.1.7) per avere le correzioni ai diversi ordini perturbativi degli autovalori energetici dell'Hamiltoniana imperturbata.

Correzione al primo ordine perturbativo

$$\begin{aligned}E_n^{(1)} &= \langle n; u | \hat{V} | n; u \rangle = \langle n; u | \frac{l^4}{4} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle = \\ &= \frac{l^4}{4} \langle n; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 | n; u \rangle = \\ &= \frac{l^4}{4} [\langle n; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 | n; u \rangle] \\ &= \frac{l^4}{4} [\langle n; u | (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{N} - \hat{1}) | n; u \rangle] = \\ &= \frac{l^4}{4} [(n(n-1))^{1/2} \langle n-2; u | + ((n+1)(n+2))^{1/2} \langle n+2; u | - (2n+1) \langle n; u |] \times \\ &\quad \times [|n+2; u \rangle ((n+1)(n+2))^{1/2} + |n-2; u \rangle (n(n-1))^{1/2} - |n; u \rangle (2n+1)] = \\ &= \frac{l^4}{4} [n(n-1) + (n+1)(n+2) + (2n+1)^2] = \\ &= \frac{l^4}{4} (n^2 - n + n^2 + 3n + 2 + 4n^2 + 4n + 1) = \frac{l^4}{4} (6n^2 + 6n + 3)\end{aligned}$$

Quindi

$$E_n^{(1)} = \frac{l^4}{4}(6n^2 + 6n + 3) \quad (4.1.11)$$

Correzione al secondo ordine perturbativo

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | \hat{V} | n; u \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} = \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | \frac{l^4}{4}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} = \\ &= \frac{l^8}{16\hbar\omega} \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle|^2}{n - n'} \end{aligned} \quad (4.1.12)$$

$$\begin{aligned} \langle n'; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle &= [\langle n'; u | (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{N} - \hat{1}) | (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{N} - \hat{1}) | n; u \rangle] \\ &= [(n'(n' - 1))^{1/2} \langle n' - 2; u | + ((n' + 1)(n' + 2))^{1/2} \langle n' + 2; u | - \\ &\quad - (2n' + 1) \langle n'; u |] \times \\ &\quad \times [|n + 2; u \rangle ((n + 1)(n + 2))^{1/2} + |n - 2; u \rangle (n(n - 1))^{1/2} - |n; u \rangle (2n + 1)] \\ &= (n'(n' - 1)(n + 1)(n + 2))^{1/2} \delta_{n', n+4} + (n'(n' - 1)(n - 1)n)^{1/2} \delta_{n', n} - \\ &\quad - (n'(n' - 1))^{1/2} (2n + 1) \delta_{n', n+2} + ((n' + 1)(n' + 2)(n + 1)(n + 2)) \delta_{n', n} + \\ &\quad + ((n' + 1)(n' + 2)n(n - 1))^{1/2} \delta_{n', n-4} - \\ &\quad - ((n' + 1)(n' + 2))^{1/2} (2n + 1) \delta_{n', n-2} - \\ &\quad - (2n' + 1)((n + 1)(n + 2))^{1/2} \delta_{n', n+2} - (2n' + 1)(n(n - 1))^{1/2} \delta_{n', n-2} + \\ &\quad + (2n' + 1)(2n + 1) \delta_{n', n} \\ &= ((n + 1)(n + 2)(n + 3)(n + 4))^{1/2} \delta_{n', n+4} - \\ &\quad - ((n + 1)(n + 2))^{1/2} (4n + 6) \delta_{n', n+2} - \\ &\quad - (n(n - 1))^{1/2} (4n - 2) \delta_{n', n-2} + (n(n - 1)(n - 2)(n - 3))^{1/2} \delta_{n', n-4} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle|^2}{n - n'} = \\ &= \sum_{n' \neq n} \frac{1}{n - n'} [((n + 1)(n + 2)(n + 3)(n + 4))^{1/2} \delta_{n', n+4} - \\ &\quad - ((n + 1)(n + 2))^{1/2} (4n + 6) \delta_{n', n+2} - \\ &\quad - (n(n - 1))^{1/2} (4n - 2) \delta_{n', n-2} + \\ &\quad + (n(n - 1)(n - 2)(n - 3))^{1/2} \delta_{n', n-4}]^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{4}(n+1)(n+2)(n+3)(n+4) - \frac{1}{2}(n+1)(n+2)(4n+6)^2 + \\
&\quad + \frac{1}{2}n(n-1)(4n-2)^2 + \frac{1}{4}n(n-1)(n-2)(n-3) \\
&= -\frac{n^4 + 10n^3 + 35n^2 + 50n + 24}{4} - \frac{16n^4 + 96n^3 + 212n^2 + 204n + 72}{2} + \\
&\quad + \frac{16n^4 - 32n^3 + 20n^2 - 4n}{2} + \frac{n^4 - 6n^3 + 11n^2 - 6n}{4} \\
&= -68n^3 - 102n^2 - 118n - 42
\end{aligned}$$

Alla fine

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \frac{l^8}{16\hbar\omega}(-68n^2 - 102n^2 - 118n - 42) = \\
&= \frac{l^8}{\hbar\omega}\left(-\frac{17}{4}n^3 - \frac{51}{8}n^2 - \frac{59}{8}n - \frac{21}{8}\right) \tag{4.1.13}
\end{aligned}$$

Correzione al terzo ordine perturbativo

$$\begin{aligned}
E_n^{(3)} &= \sum_{n' \neq n} \sum_{n'' \neq n} \frac{\langle n; u | \hat{V} | n'; u \rangle \langle n'; u | \hat{V} | n''; u \rangle \langle n''; u | \hat{V} | n; u \rangle}{(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)})(E_n^{(0)} - E_{n''}^{(0)})} \\
&\quad - \langle n; u | \hat{V} | n; u \rangle \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | \hat{V} | n; u \rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)})^2} \\
&= \sum_{n' \neq n} \sum_{n'' \neq n} \frac{\langle n; u | \frac{l^4}{4}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n'; u \rangle \langle n'; u | \frac{l^4}{4}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n''; u \rangle \langle n''; u | \frac{l^4}{4}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle}{(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)})(E_n^{(0)} - E_{n''}^{(0)})} \\
&\quad - \frac{l^4}{4}(6n^2 + 6n + 3) \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | \frac{l^4}{4}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)})^2} \\
&= \left(\frac{l^4}{4}\right)^3 \frac{1}{\hbar^2\omega^2} \left[\sum_{n' \neq n} \sum_{n'' \neq n} \frac{\langle n; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n'; u \rangle \langle n'; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n''; u \rangle \langle n''; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle}{(n - n')(n - n'')} \right. \\
&\quad \left. - (6n^2 + 6n + 3) \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle|^2}{(n - n')^2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n'; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle|^2}{(n - n')^2} = \\
& = \frac{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4) + n(n-1)(n-2)(n-3)}{16} + \\
& \quad + \frac{(n+1)(n+2)(4n+6)^2 + n(n-1)(4n-2)^2}{4} \\
& = \frac{130n^4 + 260n^3 + 974n^2 + 844n + 312}{16} \\
& = \frac{65}{8}n^4 + \frac{65}{4}n^3 + \frac{487}{8}n^2 + \frac{211}{4}n + \frac{39}{2}
\end{aligned}$$

Moltiplicando l'ultima espressione per $(6n^2 + 6n + 3)$ diventa

$$\frac{195}{4}n^6 + \frac{585}{4}n^5 + \frac{3897}{8}n^4 + \frac{1461}{2}n^3 + \frac{4929}{8}n^2 + \frac{1101}{4}n + \frac{117}{2}$$

Per quanto riguarda il primo termine, come già visto in precedenza, si ha

$$\begin{aligned}
\langle n; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n'; u \rangle & = [\langle n; u | (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{N} - \hat{1}) | (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{N} - \hat{1}) | n'; u \rangle] \\
& = ((n+1)(n+2)(n+3)(n+4))^{1/2} \delta_{n', n+4} - \\
& \quad - ((n+1)(n+2))^{1/2} (4n+6) \delta_{n', n+2} - \\
& \quad - (n(n-1))^{1/2} (4n-2) \delta_{n', n-2} + (n(n-1)(n-2)(n-3))^{1/2} \delta_{n', n-4}
\end{aligned}$$

Analogamente,

$$\begin{aligned}
\langle n''; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n; u \rangle & = [\langle n''; u | (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{N} - \hat{1}) | (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{N} - \hat{1}) | n; u \rangle] \\
& = ((n+1)(n+2)(n+3)(n+4))^{1/2} \delta_{n'', n+4} - \\
& \quad - ((n+1)(n+2))^{1/2} (4n+6) \delta_{n'', n+2} - \\
& \quad - (n(n-1))^{1/2} (4n-2) \delta_{n'', n-2} + (n(n-1)(n-2)(n-3))^{1/2} \delta_{n'', n-4}
\end{aligned}$$

L'ultimo termine è diverso dagli altri poiché non c'è la restrizione $n' \neq n''$.

Infatti

$$\begin{aligned}
\langle n'; u | (\hat{a}^\dagger - \hat{a})^4 | n''; u \rangle & = \\
& = [\langle n'; u | (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{N} - \hat{1}) | (\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - 2\hat{N} - \hat{1}) | n''; u \rangle] \\
& = [(n'(n'-1))^{1/2} \langle n'-2; u | + ((n'+1)(n'+2))^{1/2} \langle n'+2; u | - \\
& \quad - (2n'+1) \langle n'; u |] \times [|n''+2; u \rangle ((n''+1)(n''+2))^{1/2} + \\
& \quad + |n''-2; u \rangle (n''(n''-1))^{1/2} - |n''; u \rangle (2n''+1)]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (n'(n' - 1)(n'' + 1)(n'' + 2))^{1/2} \delta_{n', n''+4} + \\
&\quad + (n'(n' - 1)(n'' - 1)n'')^{1/2} \delta_{n', n''} - \\
&\quad - (n'(n' - 1))^{1/2} (2n'' + 1) \delta_{n', n''+2} + \\
&\quad + ((n' + 1)(n' + 2)(n'' + 1)(n'' + 2))^{1/2} \delta_{n', n''} + \\
&\quad + ((n' + 1)(n' + 2)n''(n'' - 1))^{1/2} \delta_{n', n''-4} - \\
&\quad - ((n' + 1)(n' + 2))^{1/2} (2n'' + 1) \delta_{n', n''-2} - \\
&\quad - (2n' + 1)((n'' + 1)(n'' + 2))^{1/2} \delta_{n', n''+2} - \\
&\quad - (2n' + 1)(n''(n'' - 1))^{1/2} \delta_{n', n''-2} + \\
&\quad + (2n' + 1)(2n'' + 1) \delta_{n', n''} \\
&= ((n'' + 1)(n'' + 2)(n'' + 3)(n'' + 4))^{1/2} \delta_{n', n''+4} - \\
&\quad - ((n'' + 1)(n'' + 2))^{1/2} (4n'' + 6) \delta_{n', n''+2} - \\
&\quad - (n''(n'' - 1))^{1/2} (4n'' - 2) \delta_{n', n''-2} + \\
&\quad + (n''(n'' - 1)(n'' - 2)(n'' - 3))^{1/2} \delta_{n', n''-4} + \\
&\quad + [n''(n'' - 1) + (n'' + 1)(n'' + 2) + (2n'' + 1)^2] \delta_{n', n''} \\
&= ((n'' + 1)(n'' + 2)(n'' + 3)(n'' + 4))^{1/2} \delta_{n', n''+4} - \\
&\quad - ((n'' + 1)(n'' + 2))^{1/2} (4n'' + 6) \delta_{n', n''+2} - \\
&\quad - (n''(n'' - 1))^{1/2} (4n'' - 2) \delta_{n', n''-2} + \\
&\quad + (n''(n'' - 1)(n'' - 2)(n'' - 3))^{1/2} \delta_{n', n''-4} + \\
&\quad + (6n''^2 + 6n'' + 3) \delta_{n', n''}
\end{aligned}$$

Moltiplicando le tre espressioni si ottiene

$$\begin{aligned}
& [n(n-1)(n-2)(n-3)\delta_{n'',n-4}\delta_{n',n''} - \\
& -(4n-2)n(n-1)((n-2)(n-3))^{1/2}\delta_{n'',n-2}\delta_{n',n''-2} - \\
& -(4n+6)(n(n-1)(n-2)(n-3)(n+1)(n+2))^{1/2}\delta_{n'',n+2}\delta_{n',n''-6} + \\
& +(n(n-1)(n-2)(n-3)(n+1)(n+2)(n+3)(n+4))^{1/2}\delta_{n'',n+4}\delta_{n',n''-8} - \\
& -(4n-2)n(n-1)((n-2)(n-3))^{1/2}\delta_{n'',n-4}\delta_{n',n''+2} + \\
& +(4n-2)^2n(n-1)\delta_{n'',n-2}\delta_{n',n''} + \\
& +(4n-2)(4n+6)(n(n-1)(n+1)(n+2))^{1/2}\delta_{n'',n+2}\delta_{n',n''-4} - \\
& -(4n-2)(n(n-1)(n+1)(n+2)(n+3)(n+4))^{1/2}\delta_{n'',n+4}\delta_{n',n''-6} - \\
& -(4n+6)(n(n-1)(n-2)(n-3)(n+1)(n+2))^{1/2}\delta_{n'',n-4}\delta_{n',n''+6} + \\
& +(4n+6)(4n-2)(n(n-1)(n+1)(n+2))^{1/2}\delta_{n'',n-2}\delta_{n',n''+4} + \\
& +(4n+6)^2(n+1)(n+2)\delta_{n'',n+2}\delta_{n',n''} - \\
& -(4n+6)(n+1)(n+2)((n+3)(n+4))^{1/2}\delta_{n'',n+4}\delta_{n',n''-2} + \\
& +(n(n-1)(n-2)(n-3)(n+1)(n+2)(n+3)(n+4))^{1/2}\delta_{n'',n-4}\delta_{n',n''+8} - \\
& -(4n-2)(n(n-1)(n+1)(n+2)(n+3)(n+4))^{1/2}\delta_{n'',n-2}\delta_{n',n''+6} - \\
& -(4n+6)(n+1)(n+2)((n+3)(n+4))^{1/2}\delta_{n'',n+2}\delta_{n',n''+2} + \\
& +(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)\delta_{n'',n+4}\delta_{n',n''}] \times \\
& \times [((n''+1)(n''+2)(n''+3)(n''+4))^{1/2}\delta_{n',n''+4} - \\
& -((n''+1)(n''+2))^{1/2}(4n''+6)\delta_{n',n''+2} - \\
& -(n''(n''-1))^{1/2}(4n''-2)\delta_{n',n''-2} + \\
& +(n''(n''-1)(n''-2)(n''-3))^{1/2}\delta_{n',n''-4} + \\
& +(6n''^2+6n''+3)\delta_{n',n''}] = \\
& = n(n-1)(n-2)(n-3)(6n''^2+6n''+3)\delta_{n'',n-4}\delta_{n',n''} + \\
& +(4n-2)n(n-1)((n-2)(n-3))^{1/2}(4n''-2) \times \\
& \quad \times (n''(n''-1))^{1/2}\delta_{n'',n-2}\delta_{n',n''-2} + \\
& +(4n-2)n(n-1)((n-2)(n-3))^{1/2} \times \\
& \quad \times (4n''+6)((n''+1)(n''+2))^{1/2}\delta_{n'',n-4}\delta_{n',n''+2} + \\
& +(4n-2)^2n(n-1)(6n''^2+6n''+3)\delta_{n'',n-2}\delta_{n',n''} + \\
& +(4n-2)(4n+6)(n(n-1)(n+1)(n+2))^{1/2} \times \\
& \quad \times (n''(n''-1)(n''-2)(n''-3))^{1/2}\delta_{n'',n+2}\delta_{n',n''-4} + \\
& (4n-2)(4n+6)(n(n-1)(n+1)(n+2))^{1/2} \times \\
& \quad \times ((n''+1)(n''+2)(n''+3)(n''+4))^{1/2}\delta_{n'',n-2}\delta_{n',n''+4} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +(4n+6)^2(n+1)(n+2)(6n''^2+6n''+3)\delta_{n'',n+2}\delta_{n',n''} + \\
& (4n+6)(n+1)(n+2)((n+3)(n+4))^{1/2} \times \\
& \quad \times (4n''-2)(n''(n''-1))^{1/2}\delta_{n'',n+4}\delta_{n',n''-2} + \\
& (4n+6)(n+1)(n+2)((n+3)(n+4))^{1/2} \times \\
& \quad \times (4n''+6)((n''+1)(n''+2))^{1/2}\delta_{n'',n+2}\delta_{n',n''+2} + \\
& +(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)(6n''^2+6n''+3)\delta_{n'',n+4}\delta_{n',n''}
\end{aligned}$$

Facendo le dovute sostituzioni, dettate dai δ , sia nelle espressioni del nominatore che in quelle del denominatore della sommatoria si ottiene

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{16}n(n-1)(n-2)(n-3)[6(n-4)^2+6(n-4)+3] + \\
& +\frac{1}{4}(4n-2)n(n-1)(n-2)(n-3)(4n-10) + \\
& +\frac{1}{4}(4n-2)^2n(n-1)[6(n-2)^2+6(n-2)+3] - \\
& -\frac{1}{2}(4n-2)(4n+6)n(n-1)(n+1)(n+2) + \\
& +\frac{1}{4}(4n+6)^2(n+1)(n+2)[6(n+2)^2+6(n+2)+3] + \\
& +\frac{1}{4}(4n+6)(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)(4n+14) + \\
& +\frac{1}{16}(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)[6(n+4)^2+6(n+4)+3] = \\
& =\frac{1}{16}(6n^6-78n^5+393n^4-948n^3+1077n^2-450n) + \\
& +\frac{1}{4}(16n^6-144n^5+484n^4-744n^3+508n^2-120n) + \\
& +\frac{1}{4}(96n^6-480n^5+936n^4-864n^3+372n^2-60n) - \\
& -\frac{1}{2}(16n^6+48n^5+4n^4-72n^3-20n^2+24n) + \\
& +\frac{1}{4}(96n^6+1056n^5+4776n^4+11328n^3+14820n^2+10116n+2808) + \\
& +\frac{1}{4}(16n^6+240n^5+1444n^4+4440n^3+7324n^2+6120n+2016) + \\
& +\frac{1}{16}(6n^6+114n^5+873n^4+3420n^3+7149n^2+7446n+2952) = \\
& \frac{1}{16}(780n^6+2340n^5+31794n^4+59688n^3+100482n^2+71028n+22248)
\end{aligned}$$

Dividendo tale espressione per 4^3 e applicando la formula (4.1.7) infine si conclude

$$\begin{aligned}
E_n^{(3)} &= \frac{l^{12}}{\hbar^2 \omega^2} \left(\frac{195}{256} n^6 + \frac{585}{256} n^5 + \frac{15897}{512} n^4 + \frac{7461}{128} n^3 + \frac{50241}{512} n^2 + \frac{17757}{256} n + \frac{2781}{128} \right) \\
&\quad - \frac{l^{12}}{\hbar^2 \omega^2} \left(\frac{195}{256} n^6 + \frac{585}{256} n^5 + \frac{3897}{512} n^4 + \frac{1461}{128} n^3 + \frac{4929}{512} n^2 + \frac{1101}{256} n + \frac{117}{128} \right) = \\
&\quad \frac{l^{12}}{\hbar^2 \omega^2} \left(\frac{375}{16} n^4 + \frac{375}{8} n^3 + \frac{177}{2} n^2 + \frac{1041}{16} n + \frac{333}{16} \right) \tag{4.1.14}
\end{aligned}$$

Risultato finale

Ponendo $\hbar = \omega = m = 1$

$$\begin{aligned}
h(n) &= n + \frac{1}{2} + \epsilon \left(\frac{3n^2}{2} + \frac{3n}{2} + \frac{3}{4} \right) + \epsilon^2 \left(-\frac{17n^3}{4} - \frac{51n^2}{8} - \frac{59n}{8} - \frac{21}{8} \right) + \\
&\quad + \epsilon^3 \left(\frac{375n^4}{16} + \frac{375n^3}{8} + \frac{177n^2}{2} + \frac{1041n}{16} + \frac{333}{16} \right) + o(\epsilon^4) \tag{4.1.15}
\end{aligned}$$

Più precisamente

$$h(0) = \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\epsilon - \frac{21}{8}\epsilon^2 + \frac{333}{16}\epsilon^3 + o(\epsilon^4) \tag{4.1.16}$$

$$h(1) = \frac{3}{2} + \frac{15}{4}\epsilon - \frac{165}{8}\epsilon^2 + \frac{3915}{16}\epsilon^3 + o(\epsilon^4) \tag{4.1.17}$$

$$h(2) = \frac{5}{2} + \frac{39}{4}\epsilon - \frac{615}{8}\epsilon^2 + \frac{20079}{16}\epsilon^3 + o(\epsilon^4) \tag{4.1.18}$$

$$h(3) = \frac{7}{2} + \frac{75}{4}\epsilon - \frac{1575}{8}\epsilon^2 + \frac{66825}{16}\epsilon^3 + o(\epsilon^4) \tag{4.1.19}$$

4.2 Confronto con la soluzione esatta

Al fine di ottenere i valori esatti degli autovalori perturbati, in primo luogo, è stata riscritta l'equazione di Schrödinger

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\phi + \epsilon x^4\phi = E\phi$$

come

$$-\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \xi^2\phi + \gamma\xi^4\phi = w\phi \quad (4.2.1)$$

dopo aver fatto il cambio di variabile

$$\xi = \frac{x}{l} \quad (4.2.2)$$

e dopo aver posto

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (4.2.3)$$

$$\gamma = \frac{2\epsilon\hbar}{m^2\omega^3} \quad (4.2.4)$$

$$w = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (4.2.5)$$

Infatti

$$\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\phi + \epsilon x^4\phi = E\phi &\Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2ml^2} \frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \frac{m\omega^2\xi^2 l^2}{2}\phi + \epsilon\xi^4 l^4\phi = E\phi \Rightarrow \\ -\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \xi^2\phi + \gamma\xi^4\phi &= w\phi \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

È stato dunque ottenuto l'operatore Hamiltoniano perturbato in una forma più semplificata. In seguito, attraverso il programma *Wolfram Mathematica*, sono stati calcolati gli elementi di matrice di tale operatore in ogni stato imperturbato

$$\langle\phi_n| -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 + \gamma\xi^4|\phi_m\rangle \quad (4.2.7)$$

dove

$$\phi_n(\xi) = \frac{1}{\pi^{1/4}(2^n n!)^{1/2}} e^{\xi^2/2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (4.2.8)$$

In tal modo è stata trovata la matrice i cui autovalori formano lo spettro energetico dell'oscillatore perturbato.

Data la forma dell'energia potenziale dell'oscillatore armonico le autofunzioni si annullano

nell'infinito spaziale e possiamo usare un intervallo di integrazione finito. L'integrale calcolato di conseguenza è stato

$$\int_{-100}^{100} \phi_n(\xi) \left(-\frac{d^2 \phi_m}{d\xi^2} + \xi^2 \phi_m + \gamma \xi^4 \phi_m \right) d\xi \quad (4.2.9)$$

tranne pochissimi casi nei quali è stato necessario restringere il dominio per ottimizzare il risultato. Per avere la soluzione esatta sarebbe indispensabile una matrice di rango infinito. Tuttavia, i risultati sono molto precisi già per matrici di dimensione ridotta. Più dettagliatamente, per quanto riguarda i primi tre livelli perturbati che sono quelli che interessano la presente trattazione, i valori energetici restano praticamente uguali al di sopra delle matrici di rango trenta. È stato pertanto ritenuto opportuno considerare esatti i risultati numerici ricavati dalla matrice di rango cinquanta.

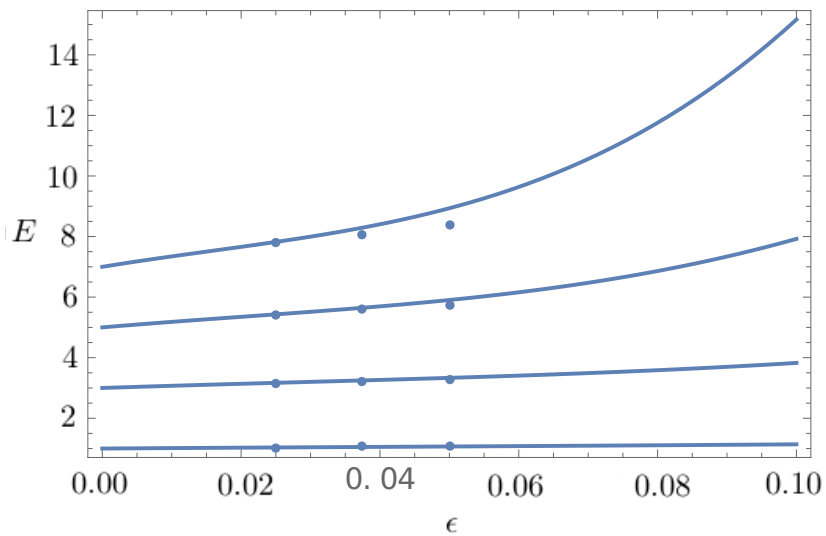


Figura 4.2.1: Autovalori dell'oscillatore armonico perturbato

I valori ottenuti con i due diversi metodi si possono riassumere nella seguente tabella:

Stato	γ	Analitico	Numerico	Differenza
n=0	0.05	1.03487	1.03473	1.4×10^{-4}
	0.075	1.05106	1.05043	6.3×10^{-4}
	0.1	1.06708	1.06529	1.8×10^{-3}
n=1	0.05	3.16937	3.16723	2.1×10^{-3}
	0.075	3.24905	3.23967	9.4×10^{-3}
	0.1	3.33305	3.30687	2.6×10^{-2}
n=2	0.05	5.43062	5.41726	1.3×10^{-2}
	0.075	5.6474	5.59031	5.7×10^{-2}
	0.1	5.90436	5.74796	1.6×10^{-1}
n=3	0.05	7.82192	7.77027	5.2×10^{-2}
	0.075	8.29304	8.07718	2.2×10^{-1}
	0.1	8.93477	8.35268	5.8×10^{-1}

Tabella 4.2.1: Risultati analitici e numerici

La trattazione seguita ha permesso di fare delle riflessioni di carattere conclusivo. Come si vede dalla tabella 4.2.1 i risultati ottenuti applicando l'algoritmo della teoria perturbativa sono consistenti con quelli trovati numericamente per piccoli valori del parametro ϵ e per gli stati quantici più bassi. Nel momento in cui la perturbazione inizia a diventare più intensa i due risultati iniziano a deviare. Tale risultato si può vedere più in dettaglio in figura 4.2.1 dove è graficata l'energia in funzione di ϵ . Le curve continue rappresentano i grafici del risultato analitico mentre i punti sono i valori trovati numericamente.

4.3 Interpretazione fisica

L'analisi seguita nella sezione precedente ha dimostrato che la teoria perturbativa ha delle limitazioni nel momento in cui aumentiamo l'intensità della perturbazione e il livello energetico perturbato. Per capire meglio il motivo di tale inadeguatezza è stato opportuno determinare la serie fino a valori alti dell'ordine perturbativo. A tal fine è stata ricavata una relazione per ottenere ricorsivamente i coefficienti della serie, cioè i livelli energetici nei vari ordini. Una volta trovati è stato possibile concludere che la serie asintoticamente si comporta come la serie del fattoriale e di conseguenza è divergente. In altre parole, il valore esatto viene approssimato sempre meglio fino ad un certo ordine, dopodiché la serie inizia a divergere e la teoria perturbativa non è più efficace.

La funzione d'onda dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico imperturbato, semplificando le costanti e ponendo $l = 1$, è

$$\phi_0(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (4.3.1)$$

Le funzioni d'onda relative allo stato $|n\rangle$ imperturbato possono essere espresse mediante la funzione d'onda dello stato fondamentale moltiplicata per un polinomio B di grado uguale a quello del corrispondente stato

$$\phi(x) = B(x)\phi_0(x) \quad (4.3.2)$$

Sostituendo nella

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2\phi + \epsilon x^4\phi = E\phi \quad (4.3.3)$$

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \left(\frac{d^2B}{dx^2} - 2x \frac{dB}{dx} - B + x^2B \right) + \frac{x^2B}{2} + \epsilon x^4B &= EB \\ \Rightarrow \frac{d^2B}{dx^2} - 2x \frac{dB}{dx} - B - 2\epsilon x^4B + 2EB &= 0 \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

Ad ogni ordine perturbativo gli elementi di matrice della perturbazione possono soltanto mescolare tra loro stati che differiscono di quattro per ogni stato quantico n . Di conseguenza, si possono considerare

$$B(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon^k B_k(x) \quad (4.3.5)$$

$$B_k(x) = \sum_{j=0}^{2k} A_{k,j} x^{2j} \quad (4.3.6)$$

con

$$A_{k,0} = 1 \quad (4.3.7)$$

$$2E = \sum_{k=0}^{\infty} w_k \epsilon^k \quad (4.3.8)$$

con

$$w_0 = 1 \quad (4.3.9)$$

Le funzioni d'onda sono state normalizzate scegliendo $B_k(0) = 1$.
Sostituendo nella (4.3.4) si è ottenuto

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{2k} A_{k,j} \epsilon^k 2j(2j-1)x^{(2j-2)} - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{2k} 4j A_{k,j} \epsilon^k x^{2j} - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{2k} A_{k,j} \epsilon^k x^{2j} \\ & - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{2k} 2A_{k,j} \epsilon^{(k+1)} x^{(2j+4)} + \sum_{k=0}^{\infty} w_k \epsilon^k \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{2k} A_{k,j} x^{2j} \epsilon^k = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{2k-1} A_{k,j+1} \epsilon^k (2j+1)(2j+2)x^{2j} - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{2k} 4j A_{k,j} \epsilon^k x^{2j} - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{2k} A_{k,j} \epsilon^k x^{2j} \\ & - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=2}^{2k+2} 2A_{k,j-2} \epsilon^{(k+1)} x^{2j} + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\sum_{s=0}^k \sum_{j=0}^{2k-2s} w_s A_{k-s,j} \epsilon^k x^{2j} \right) = 0 \end{aligned}$$

dove sono stati fatti dei cambi di variabili per eguagliare in tutti i termini le potenze di x , mentre, per quanto riguarda l'ultimo termine, è stata applicata la formula di *Cauchy*¹. Uguagliando anche le potenze di ϵ si ha

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{2k-1} A_{k,j+1} \epsilon^k (2j+1)(2j+2)x^{2j} - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{2k} 4j A_{k,j} \epsilon^k x^{2j} - \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{2k} A_{k,j} \epsilon^k x^{2j} \\ & - \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{j=2}^{2k} 2A_{k-1,j-2} \epsilon^k x^{2j} + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\sum_{s=0}^k \sum_{j=0}^{2k-2s} w_s A_{k-s,j} \epsilon^k x^{2j} \right) = 0 \end{aligned}$$

Quindi, uguagliando a zero ordine per ordine le varie potenze di x^{2j} si ottiene

$$(2j+1)(2j+2)A_{k,j+1} - 4jA_{k,j} - A_{k,j} - 2A_{k-1,j-2} + \sum_{s=0}^k w_s A_{k-s,j} = 0 \quad (4.3.10)$$

Nella sommatoria il termine con $s=0$ usando la (4.3.9) semplifica il termine $-A_{k,j}$. Alla fine

$$(2j+1)(2j+2)A_{k,j+1} - 4jA_{k,j} - 2A_{k-1,j-2} + \sum_{s=1}^k w_s A_{k-s,j} = 0 \quad (4.3.11)$$

¹Date $\sum_{n=0}^{\infty} a_n$ e $\sum_{n=0}^{\infty} b_n$ il loro prodotto di Cauchy è $\sum_{n=0}^{\infty} c_n$ con $c_n = \sum_{k=0}^n a_k b_{n-k}$

Ponendo $j = 0$ e considerando che $A_{0,j}$ è non nullo solo per $j = 0$ e in quel caso vale uno si ha

$$2A_{k,1} - 0 - 0 + \sum_{s=1}^{k-1} w_s + w_k = 0$$

e si ottiene dunque una relazione per ricavarsi ricorsivamente w_k una volta noto $A_{k,1}$

$$w_k = -2A_{k,1} - \sum_{s=1}^{k-1} w_s \quad (4.3.12)$$

Se $j \neq 0$ $A_{0,j} = 0$ di conseguenza il termine w_k sparisce. La relazione per calcolare $A_{k,1}$ a questo punto è

$$(2j+1)(2j+2)A_{k,j+1} - 4jA_{k,j} - 2A_{k-1,j-2} + \sum_{s=1}^{k-1} w_s A_{k-s,j} = 0$$

$$A_{k,j} = \frac{1}{4j} \left((2j+1)(2j+2)A_{k,j+1} - 2A_{k-1,j-2} - \sum_{s=1}^{k-1} w_s A_{k-s,j} \right) \quad (4.3.13)$$

Usando il programma *Wolfram Mathematica* sono stati calcolati i coefficienti della serie perturbativa per lo stato fondamentale. Di seguito vengono riportati i primi dodici valori:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{3}{4} = 0.75 & E_2 &= -\frac{21}{8} = -2.62 \\ E_3 &= \frac{333}{16} = 20.81 & E_4 &= -\frac{30885}{128} = -241.29 \\ E_5 &= \frac{916731}{256} = 3580.98 & E_6 &= -\frac{65518401}{1024} = -6.40 \cdot 10^4 \\ E_7 &= \frac{2723294673}{2048} = 1.33 \cdot 10^6 & E_8 &= -\frac{1030495099053}{32768} = -3.14 \cdot 10^7 \\ E_9 &= \frac{54626982511455}{65536} = 8.34 \cdot 10^8 & E_{10} &= -\frac{6417007431590595}{262144} = -2.45 \cdot 10^{10} \\ E_{11} &= \frac{413837985580636167}{524288} = 7.83 \cdot 10^{11} & E_{12} &= -\frac{116344863173284543665}{4194304} = -2.77 \cdot 10^{13} \end{aligned}$$

Dallo studio di tali coefficienti risulta che l'andamento della serie perturbativa è quello del fattoriale

$$E_0^{(n)} \sim n! \quad (4.3.14)$$

e di conseguenza essa è divergente. Tuttavia, la serie

$$\sum_{n=0}^{\infty} E_0^{(n)} \epsilon^n$$

è una serie asintotica, e quindi approssima E_0 molto bene all'interno di un opportuno dominio se troncata ad un certo ordine perturbativo. Più precisamente una serie è detta asintotica se

$$|E_0(\epsilon) - \sum_{n=0}^N \epsilon^n E_0^{(n)}| \sim o(\epsilon^{N+1}) \quad \forall N \text{ variando } \epsilon$$

Se si opera però ad ϵ fissato come negli ordinari casi fisici, dopo un certo ordine perturbativo le approssimazioni iniziano a peggiorare e la teoria perturbativa cessa di essere valida anche se $\epsilon \ll 1$. Successivamente, è stato stimato l'ordine n per il quale si ha la miglior approssimazione del valore esatto dell'energia da parte della serie perturbativa minimizzando la quantità

$$\Delta(n) = E_0^{(n)} \epsilon^n = n! \epsilon^n \quad (4.3.15)$$

Per comodità è stato minimizzato il suo logaritmo

$$[\ln(n! \epsilon^n)]' = 0 \quad (4.3.16)$$

$$\begin{aligned} [\ln(n!) + \ln(\epsilon^n)]' = 0 &\Rightarrow {}^2 [n \ln(n) - n + n \ln(\epsilon)]' = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \ln(n) + n \frac{1}{n} - 1 + \ln(\epsilon) = 0 \Rightarrow \ln(n\epsilon) = 0 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$n_* = \frac{1}{\epsilon} \quad (4.3.17)$$

il quale è un minimo in quanto la derivata seconda è positiva.

Dalla (4.3.17) risulta chiaro che l'affidabilità della teoria perturbativa si determina dall'inverso del parametro che specifica l'intensità della perturbazione. Questa è un'ulteriore conferma dell'esito ottenuto nella sezione 4.2, cioè, che le due trattazioni conseguite sono tanto più in accordo quanto più piccolo è ϵ . Sostituendo n_* in $\Delta(n)$ si trova

$$\Delta(n_*) \sim e^{-1/\epsilon}$$

che è una stima dell'ordine di grandezza della distanza minima dell'approssimazione perturbativa dalla soluzione esatta. Soltanto effetti intrinsecamente non perturbativi possono colmare questo gap.

In conclusione, applicando l'algoritmo della teoria perturbativa si ottiene una serie divergente. Tuttavia, se troncata in maniera adatta, fornisce una buona approssimazione della soluzione esatta. Come emerge dal confronto dei risultati ottenuti in sezione 4.2, l'approssimazione è tanto migliore quanto più basso è il livello energetico e quanto più piccola è l'energia di perturbazione. Nel caso particolare dell'oscillatore armonico sottoposto ad una perturbazione quartica, come si è dimostrato, la serie perturbativa ha un comportamento asintotico di tipo fattoriale. La non-analicità della serie attorno ad $\epsilon = 0$ è spiegata dall'*argomento di Dyson* ed è dovuta alla mancanza di stati stabili nel caso in cui l'energia di perturbazione abbia un coefficiente negativo. Più precisamente, se la serie fosse analitica dovrebbe esistere un raggio di convergenza R tale che, per

$$|\epsilon| < R \quad (4.3.18)$$

²Dalla formula di Stirling $\ln(n!) = n \ln(n) - n$ per $n \gg 1$

la serie sarebbe in grado di approssimare il valore esatto dell'energia. Come si vede in figura 4.3.1, quando il coefficiente dell'energia ϵ è positivo l'energia potenziale perturbata ha effettivamente un minimo, dando origine a stati legati i quali possono essere approssimati dalla serie. Tuttavia la (4.3.18) prevede valori di ϵ anche negativi. In tal caso, come si vede in figura 4.3.2, l'energia potenziale non è inferiormente limitata e non dà origine a stati stabili. Non c'è dunque la convergenza desiderata in quanto gli stati diventano metastabili e la serie non può convergere a soluzioni instabili originate tramite l'effetto tunnel. Queste soluzioni sono generate da effetti non perturbativi dell'ordine $e^{-1/\epsilon}$ che non possono essere descritti da una semplice deformazione continua dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico imperturbato. Per l'oscillatore anarmonico con una perturbazione di tipo quartica, un metodo per superare queste limitazioni ed ottenere risultati esatti è quello delle somme di Borel. Queste ultime si usano nei casi in cui si presentano delle serie asintotiche con divergenza di tipo fattoriale. Facendo la trasformata di Borel³ tutti i termini risultano divisi per $n!$, si annulla la divergenza e si ottiene una funzione analitica come risultato. La somma di Borel dunque converge al risultato esatto.

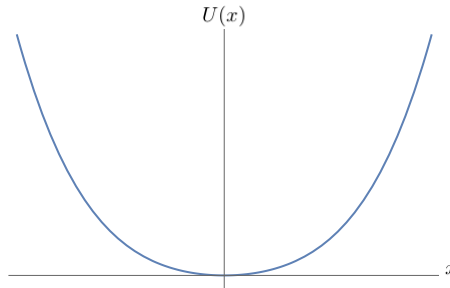


Figura 4.3.1: Energia potenziale perturbata per ϵ positivo

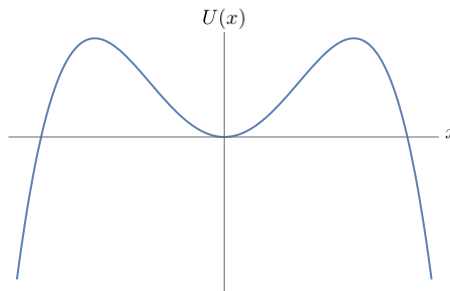


Figura 4.3.2: Energia potenziale perturbata per ϵ negativo

³Se si ha $A(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ la sua trasformata di Borel si definisce $\mathfrak{B}A(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k z^k}{k!}$.

Bibliografia

- Bellone Enrico, *Storia della fisica moderna e contemporanea*, UTET, 1998;
- Bergmann Peter Gabriel, *Basic Theories of Physics*, Dover Publications, 1951;
- Dirac Paul A. M., *I principi della meccanica quantistica*, Paolo Boringhieri, 1959;
- Galindo Alberto, Pascual Pedro, *Quantum Mechanics I*, Springer-Verlag, 1990;
- Gamow George, *Trent'anni che sconvolsero la fisica*, Zanichelli, 1966;
- Griffiths David J., *Introduzione alla Meccanica Quantistica*, Casa Editrice Ambrosiana, 2005;
- Kaku Michio, *Il cosmo di Einstein*, Codice Edizioni, 2016;
- Kramers Hendrik A., *Quantum Mechanics*, Dover Publications, 1964;
- Landau Lev D., Lifšits Evgenij M., *Meccanica Quantistica*, Editori Riuniti, 1976;
- Levi A.F.J., *Applied Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 2003;
- Motz Lloyd, Weaver Jefferson Hane, *The Story of Physics*, Plenum Press, 1989;
- Temmer Georges M., *Fundamentals of Quantum Mechanics*, Prentice-Hall, 1950;
- Weinberg Steven, *Lectures on Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, 2013;
- Zucchini Roberto, *Quantum Mechanics*, Università degli Studi di Bologna, Corso di laurea in Fisica, 2016;