Teoria delle Perturbazioni

26 Maggio 2017

Questa breve dispensa discute gli aspetti più elementari della *teoria delle perturbazioni* in Meccanica Quantistica.

Supponiamo di conoscere lo spettro $\{\lambda_n\}$ e le autofunzioni ψ_n per una Hamiltoniana $H_0(p,q)$. Vorremmo ora avere delle informazioni equivalenti anche se approssimate per la Hamiltoniana

$$H_0 \ + \ \varepsilon \ H_1$$

in cui il nuovo termine è in qualche modo "piccolo" rispetto al termine imperturbato (se gli spettri dei due operatori sono limitati la nozione di "piccolo" è evidente; nel caso più generale la richiesta sarà quella che tutti i passaggi che faremo siano legittimi).

In particolare, vorremmo conoscere almeno lo spettro del problema perturbato.

Per far questo, procediamo a cercare le soluzioni del problema di Schroedinger

$$(H_0 + \varepsilon H_1) \ \phi_n \ = \ \mu_n \ \phi_n \tag{1}$$

come una perturbazione delle soluzioni del problema imperturbato. Scriviamo dunque

$$\mu_n \ = \ \lambda_n \ + \ \sum_{k=1}^{\infty} \mu_n^{(k)} \ \varepsilon^k \ , \tag{2}$$

$$\phi_n \ = \ \psi_n \ + \ \sum_{k=1}^{\infty} \phi_n^{(k)} \ \varepsilon^k \ . \tag{3}$$

Supponiamo inoltre per semplicità che H_0 sia *non degenere.*

Introducendo queste scritture nella (1) otteniamo una equazioni tra due serie, che devono quindi essere uguali termine a termine.

Il termine di grado ε^0 naturalmente non è altri che

$$H_0 \, \psi_n \ = \ \lambda_n \, \psi_n \ , \tag{4}$$

che è verificata per ipotesi.

Passiamo ora a considerare i termini di grado ε (che in effetti sono gli unici che considereremo[1]). Abbiamo ora

$$H_0 \, \phi_n^{(1)} \ + \ H_1 \, \psi_n \ = \ \lambda_n \, \phi_n^{(1)} \ + \ \mu_n^{(1)} \, \psi_n \ . \tag{5}$$

Ora però ricordiamo che H_0 è una osservabile; dunque le ψ_n forniscono una base completa nello spazio di Hilbert $\mathcal{H}$, e possiamo scrivere

$$\phi_n^{(1)} \ = \ c_{nk}^{(1)} \, \psi_k \ .$$

Allora la (5) diventa

$$H_0 \sum_k c_{nk}^{(1)} \psi_k \ + \ H_1 \, \psi_n \ = \ \lambda_n \sum_k c_{nk}^{(1)} \psi_k \ + \ \mu_n^{(1)} \, \psi_n \ ; \tag{6}$$

ricordando inoltre che le ψ_k soddisfano la (4), questa diviene

$$\sum_k c_{nk}^{(1)} \lambda_k \psi_k \ + \ H_1 \, \psi_n \ = \ \lambda_n \sum_k c_{nk}^{(1)} \psi_k \ + \ \mu_n^{(1)} \, \psi_n \ . \tag{7}$$

Consideriamo ora il prodotto scalare di ψ_m con i due membri dell'equazione. Grazie a $\langle m, k \rangle = \delta_{mk}$ otteniamo

$$c_{nm}^{(1)} \lambda_m \ + \ (\psi_m, H_1 \, \psi_n) \ = \ \lambda_n \, c_{nm}^{(1)} \ + \ \mu_n^{(1)} \, \delta_{mn} \ . \tag{8}$$

Per proseguire è essenziale notare che nella (3) dobbiamo sempre scegliere $\phi_n^{(k)}$ ortogonale a ψ_n. Infatti $\psi_n = \phi_n^{(0)}$ è sempre definita a meno della moltiplicazione per una costante (essendo soluzione di una equazione lineare[2] – e non solo perché ψ ed $\alpha\psi$ rappresentano lo stesso stato) e quindi qualsiasi termine che aggiungessimo nella espansione perturbativa nella direzione ψ_n potrebbe essere inglobato nella definizione di ψ_n stesso.

In particolare, questo significa che $(\psi_n, \phi_n^{(1)}) = 0$, e quindi

$$c_{nn}^{(1)} \ = \ 0 \ .$$

Con questa condizione, l'equazione (8) per $m = n$ diviene

$$\mu_n^{(1)} \ = \ (\psi_n, H_1 \, \psi_n) \ . \tag{9}$$

Abbiamo così determinato il contributo del primo ordine agli autovalori:

$$\mu_n \ = \ \lambda_n \ + \ \varepsilon \ \langle n | H_1 | n \rangle \ + \ O(\varepsilon^2) \ . \tag{10}$$

Notiamo che questo rappresenta il *valore medio della perturbazione* εH_1 *sui corrispondenti autostati imperturbati.*

[1] Lo studente che volesse informazioni sulla teoria delle perturbazioni ad ordini superiori è indirizzato, come al solito, al testo di Landau e Lifshits.

[2] In effetti quello che stiamo ricordando non è altro che la *alternativa di Fredholm.*

Avendo determinato $\mu_n^{(1)}$, possiamo considerare le altre ($m \neq n$) equazioni (8), ottenendo

$$c_{nm}^{(1)} \lambda_m \ + \ (\psi_m, H_1 \, \psi_n) \ = \ \lambda_n \, c_{nm}^{(1)} \ ,$$

che si riscrive immediatamente come

$$c_{nm}^{(1)} \, [\lambda_m \ - \ \lambda_n] \ = \ - \ (\psi_m, H_1 \, \psi_n) \ ,$$

o ancora come

$$c_{nm}^{(1)} \ = \ \frac{(\psi_m, H_1 \, \psi_n)}{\lambda_n \ - \ \lambda_m} \ = \ \frac{\langle m | H_1 | n \rangle}{\lambda_n - \lambda_m} \ . \tag{11}$$

Notiamo che qui abbiamo usato l 'ipotesi di non degenerazione, cioè $\lambda_m \neq \lambda_n$ per $m \neq n$.

In questo modo abbiamo determinato anche la correzione (al primo ordine) per le funzioni d'onda,

$$\phi_n \ = \ \psi_n \ + \ \varepsilon \ \frac{(\psi_m, H_1 \, \psi_n)}{\lambda_n \ - \ \lambda_m} \ \psi_m \ + \ O(\varepsilon^2) \ . \tag{12}$$

In questo caso la correzione è associata ai cosiddetti *elementi di matrice* della perturbazione εH_1 tra gli autostati del problema imperturbato.

Una volta ottenuti questi risultati, è anche chiara la condizione di validità dell'approccio che abbiamo seguito: è necessario che la correzione ai coefficienti sia piccola, cioè che risulti

$$\varepsilon \ \frac{(\psi_m, H_1 \, \psi_n)}{\lambda_n \ - \ \lambda_m} \ \ll \ 1 \ ; \tag{13}$$

allo stesso modo, per quanto riguarda gli autovalori, è necessario che la correzione risulti piccola rispetto alla separazione dagli autovalori vicini,

$$\varepsilon \ \langle \psi_n | H_1 | \psi_n \rangle \ \ll \ |\lambda_n - \lambda_{n \pm 1}| \ . \tag{14}$$

Come già sottolineato, questo approccio è valido nel caso di osservabili non degeneri; per una osservabile degenere (e più specificamente per le perturbazioni ai livelli degeneri) si avrebbe uno zero al denominatore. In questo caso è necessario procedere in modo simile ma non identico; non faremo questa discussione.

Osserviamo anche che la presenza di livelli quasi-degeneri (cioè con $|\lambda_n - \lambda_m|$ molto piccolo) porta comunque alla presenza di *piccoli denominatori*, come in meccanica classica, e ad un range molto ridotto di ε per cui le condizioni (13), (14) discusse poco sopra (per assicurare la validità dell'approccio perturbativo) sono verificate.