

Teoria delle Perturbazioni (seconda parte)

Corso MMMQ – UNIMI (G. Gaeta, a.a. 2020/21)

9 Novembre 2020

In una precedente dispensa abbiamo discusso gli aspetti più elementari della *teoria delle perturbazioni* in Meccanica Quantistica, considerando solo i calcoli *al primo ordine* e nel caso in cui l'operatore imperturbato è *non degenere*. In questa dispensa rimuoviamo ambedue queste limitazioni; inoltre trattiamo il caso in cui la separazione tra (alcuni) livelli non è nettamente più grande dei termini perturbativi, ed il caso di perturbazioni *dipendenti dal tempo*.

In questa dispensa i calcoli saranno effettuati con meno dettaglio, sia rispetto alla precedente dispensa che rispetto a quanto visto a lezione e forse anche risopetto a quanto desiderabile; d'altra parte il materiale è presente, sia pure con notazioni diverse, in tutti i testi di MQ. Quindi la dispensa va intesa come una collezione di linee guida rispetto a queste questioni.¹

1 Perturbazioni al secondo ordine

Nella precedente dispensa abbiamo effettuato unicamente calcoli al primo ordine, ottenendo peraltro dei risultati assai semplici. Naturalmente i calcoli possono essere sviluppati a qualsiasi ordine (il fatto che abbiano senso, ossia che le correzioni siano effettivamente via via più piccole e la serie converga, è un'altra questione), anche se ci aspettiamo che le formule divengano sempre meno semplici con l'aumentare dell'ordine.

Qui vediamo come effettuare i calcoli al *secondo* ordine. Lo studente desideroso di andare ad ordini successivi può consultare uno dei testi "standard" di MQ, o procedere per suo conto lungo le stesse linee.

Scriviamo

$$\tilde{H} = H_0 + \varepsilon H_1$$

e corrispondentemente

$$\tilde{\psi} = \psi^{(0)} + \varepsilon \psi^{(1)} + \varepsilon^2 \psi^{(2)} ; \quad \tilde{\lambda} = \lambda^{(0)} + \varepsilon \lambda^{(1)} + \varepsilon^2 \lambda^{(2)} .$$

¹In linea di principio, prima o poi la dispensa sarà resa più completa, ma il "prima o poi" si riferisce ad un orizzonte temporale probabilmente ben al di là della data degli esami – e non dico di quale anno accademico.

Inserendo queste nell'equazione di Schroedinger stazionaria

$$\tilde{H} \tilde{\psi} = \tilde{\lambda} \tilde{\psi} ,$$

abbiamo ai vari ordini (fino ad ordine 2)

$$\begin{aligned} \varepsilon^0 & : H_0 \psi^{(0)} = \lambda^{(0)} \psi^{(0)} , \\ \varepsilon^1 & : H_0 \psi^{(1)} + H_1 \psi^{(0)} = \lambda^{(0)} \psi^{(1)} + \lambda^{(1)} \psi^{(0)} , \\ \varepsilon^2 & : H_0 \psi^{(2)} + H_1 \psi^{(1)} = \lambda^{(0)} \psi^{(2)} + \lambda^{(1)} \psi^{(1)} + \lambda^{(2)} \psi^{(0)} . \end{aligned}$$

La prima equazione ci dice che dobbiamo scegliere $\lambda^{(0)} = \lambda_n$ e corrispondentemente $\psi^{(0)} = \psi_n$, dove λ_n e ψ_n sono gli autovalori e le corrispondenti autofunzioni per l'Hamiltoniana imperturbata H_0 . Andremo quindi a calcolare le perturbazioni a queste; in altre parole d'ora in poi scriveremo

$$\tilde{\psi}_n = \psi_n + \varepsilon \psi_n^{(1)} + \varepsilon^2 \psi_n^{(2)} ; \quad \tilde{\lambda}_n = \lambda_n + \varepsilon \lambda_n^{(1)} + \varepsilon^2 \lambda_n^{(2)} .$$

Supponiamo anche qui che H_0 sia una osservabile *non degenera*. Scriveremo quindi qualsiasi funzione in termini della base completa di autofunzioni $\psi_k = |k\rangle$ di H_0 . In particolare questo ci dice che possiamo sempre scrivere

$$\psi_n^{(\ell)} = \sum_m c_{nm}^{(\ell)} \psi_m \quad \ell = 1, 2 .$$

I coefficienti “diagonali” possono – come discusso nella dispensa precedente – sempre essere scelti come

$$c_{nn}^{(\ell)} = 0 \quad (\ell > 0) .$$

Ad ordine uno otteniamo, come visto nella dispensa precedente,

$$\lambda_n^{(1)} = \langle n | H_1 | n \rangle , \tag{1}$$

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{\langle m | H_1 | n \rangle}{\lambda_n - \lambda_m} = \frac{\langle n | H_1 | m \rangle^*}{\lambda_n - \lambda_m} ; \tag{2}$$

l'ipotesi di non degenerazione ci assicura che i denominatori che appaiono nell'ultima formula non si annullano mai.

1.1 Correzione agli autovalori

Veniamo ora al calcolo delle correzioni al secondo ordine. L'equazione da soddisfare è ora

$$H_0 \psi^{(2)} + H_1 \psi^{(1)} = \lambda^{(0)} \psi^{(2)} + \lambda^{(1)} \psi^{(1)} + \lambda^{(2)} \psi^{(0)} ;$$

questa si riscrive, per quanto detto sopra, come

$$H_0 \sum_m c_{nm}^{(2)} \psi_m + H_1 \sum_m c_{nm}^{(1)} \psi_m = \lambda_n \sum_m c_{nm}^{(2)} \psi_m + \lambda_n^{(1)} \sum_m c_{nm}^{(1)} \psi_m + \lambda_n^{(2)} \psi_n ;$$

ricordando che H_0 ed H_1 sono operatori *lineari*, e le proprietà di ψ_m , questa si riscrive come

$$\sum_m c_{nm}^{(2)} \lambda_m \psi_m + \sum_m c_{nm}^{(1)} H_1 \psi_m = \lambda_n \sum_m c_{nm}^{(2)} \psi_m + \lambda_n^{(1)} \sum_m c_{nm}^{(1)} \psi_m + \lambda_n^{(2)} \psi_n .$$

Se ora facciamo il prodotto scalare dei due membri dell'equazione con l'autostato ψ_s , dove s è nuovamente arbitrario ma fissato, otteniamo

$$c_{ns}^{(2)} \lambda_s + \sum_m c_{nm}^{(1)} \langle s|H_1|m \rangle = \lambda_n c_{ns}^{(2)} + \lambda_n^{(1)} c_{ns}^{(1)} + \lambda_n^{(2)} \delta_{sn} . \quad (3)$$

Se consideriamo $s = n$, questa equazione si riduce a

$$c_{nn}^{(2)} \lambda_n + \sum_m c_{nm}^{(1)} \langle n|H_1|m \rangle = \lambda_n c_{nn}^{(2)} + \lambda_n^{(1)} c_{nn}^{(1)} + \lambda_n^{(2)} .$$

Ricordando che, come discusso nella dispensa precedente (“alternativa di Fredholm”) $c_{nn}^{(1)} = 0$, eliminando i termini ($c_{nn}^{(2)} \lambda_n$) eguali nei due membri – e che del resto sono nulli in quanto $c_{nn}^{(k)} = 0$ per ogni $k \geq 1$, come visto ancora nella dispensa precedente – e ricordando l'espressione (2) di $c_{nm}^{(1)}$, otteniamo semplicemente

$$\lambda_n^{(2)} = \sum_m c_{nm}^{(1)} \langle n|H_1|m \rangle = \sum_m \frac{\langle m|H_1|n \rangle \langle n|H_1|m \rangle}{\lambda_n - \lambda_m} = \sum_m \frac{|\langle n|H_1|m \rangle|^2}{\lambda_n - \lambda_m} . \quad (4)$$

Notiamo che per lo stato fondamentale la correzione (del secondo ordine) all'autovalore è sempre negativa; questo significa che fermandoci al primo ordine abbiamo sempre una stima del valore di λ_0 *superiore* a quella che si otterrebbe arrivando al secondo ordine.

Notiamo anche che mentre per calcolare la correzione del primo ordine a λ_k è sufficiente calcolare *un solo* integrale (il valor medio della perturbazione sullo stato ψ_k), per calcolare le correzioni al secondo ordine è necessario calcolare (almeno in linea di principio: il denominatore riduce l'importanza degli elementi di matrice tra stati con autovalori molto diversi) *tutti* gli elementi di matrice di H_1 . E' quindi evidente come passare dal primo ordine al secondo implichi un notevole aumento della complessità dei calcoli richiesti.

1.2 Correzione agli autostati

Come già ricordato, l'autostato n avrà correzioni solo lungo le direzioni $s \neq n$.

Consideriamo ora il caso in cui $s \neq n$ in (3). Allora l'equazione fornisce

$$c_{ns}^{(2)} \lambda_s + \sum_m c_{nm}^{(1)} \langle s|H_1|m \rangle = \lambda_n c_{ns}^{(2)} + \lambda_n^{(1)} c_{ns}^{(1)} ,$$

e dobbiamo usarla per determinare le incognite $c_{ns}^{(2)}$. Ricordando ancora l'espressione per i coefficienti $c_{ij}^{(1)}$, questa si riscrive come

$$\begin{aligned} c_{ns}^{(2)} (\lambda_n - \lambda_s) &= \sum_m c_{nm}^{(1)} \langle s|H_1|m\rangle - \lambda_n^{(1)} c_{ns}^{(1)} \\ &= \sum_m \frac{\langle s|H_1|m\rangle \langle m|H_1|n\rangle}{\lambda_n - \lambda_m} - \langle n|H_1|n\rangle \frac{\langle s|H_1|n\rangle}{\lambda_n - \lambda_s}, \end{aligned}$$

o ancora

$$c_{ns}^{(2)} = \sum_m \frac{\langle s|H_1|m\rangle \langle m|H_1|n\rangle}{(\lambda_n - \lambda_m)(\lambda_n - \lambda_s)} - \frac{\langle n|H_1|n\rangle \langle s|H_1|n\rangle}{(\lambda_n - \lambda_s)^2}. \quad (5)$$

2 Perturbazioni in presenza di spettro continuo

Abbiamo fin qui (inclusa la dispensa precedente) supposto che H_0 abbia spettro *puramente discreto*. Sappiamo però che in molti casi di interesse fisico – ad esempio per l'atomo di Idrogeno, o per il potenziale di Morse – siamo in presenza di Hamiltoniane con una parte di spettro discreto ed una parte di spettro continuo.

Ha senso – ed è fisicamente necessario – chiedersi cosa succede allo spettro discreto, ed alle relative autofunzioni, quando si perturba il problema, e l'Hamiltoniana imperturbata ha anche uno spettro continuo². In questo caso, le (combinazioni lineari delle) autofunzioni ψ_k corrispondenti allo spettro discreto *non* esauriscono lo spazio di Hilbert \mathcal{H} in cui si lavora, e nello sviluppo di funzioni arbitrarie su una base di \mathcal{H} è necessario includere, oltre alle funzioni $\{\psi_0, \psi_1, \dots\}$, che sono le autofunzioni relative ai livelli $\{\lambda_0, \lambda_1, \dots\}$ dello spettro discreto, anche le autofunzioni corrispondenti allo spettro continuo.

In particolare, limitandoci ai calcoli al *primo* ordine (visti nella precedente dispensa), è ragionevole pensare³ che la presenza di spettro continuo non cambi nulla nel calcolo della correzione $\lambda_k^{(1)}$ agli autovalori discreti, dato che questa si ottiene come valor medio della perturbazione sullo stato imperturbato,

$$\lambda_k^{(1)} = \langle k|H_1|k\rangle.$$

La situazione è ben diversa quando consideriamo la correzione alle autofunzioni (corrispondenti allo spettro discreto), che come abbiamo visto ha – almeno in linea di principio – invece componenti lungo *tutte* le direzioni dello spazio di Hilbert \mathcal{H} .

Ricordiamo⁴ che l'equazione corrispondente ai termini del primo ordine in ϵ per l'equazione di Schroedinger (stazionaria) per $\tilde{\psi}_n$ e $\tilde{\lambda}_n$ era

$$H_1 \psi_n + H_0 \psi_n^{(1)} = \lambda_n^{(1)} \psi_n + \lambda_n \psi_n^{(1)}. \quad (6)$$

²Non ci chiederemo, invece, cosa succede alle autofunzioni corrispondenti allo spettro continuo in questo caso

³Nel seguito controlleremo che sia proprio così.

⁴Lo studente è invitato a compulsare la dispensa precedente per controllare queste affermazioni.

A questo punto si sviluppava la funzione incognita $\psi_n^{(1)}$ su una base di \mathcal{H} . Se ora siamo in presenza di spettro continuo, tale base sarà costituita da un insieme numerabile (finito od infinito) $\{\psi_0, \psi_1, \dots\}$ ed inoltre da un insieme continuo che indicheremo con $\{\psi_\beta\}$, dove β appartiene ad uno o più sottoinsiemi continui di \mathbf{R} , che indicheremo con B . Allora dobbiamo scrivere

$$\psi_n^{(1)} = \sum_k c_{nk}^{(1)} \psi_k + \int_B b_{n\beta}^{(1)} \psi_\beta d\beta . \quad (7)$$

Inserendo ora questa nella (6), otteniamo

$$\begin{aligned} H_1 \psi_n + H_0 \sum_k c_{nk}^{(1)} \psi_k + H_0 \int_B b_{n\beta}^{(1)} \psi_\beta d\beta &= \\ &= \lambda_n^{(1)} \psi_n + \lambda_n \sum_k c_{nk}^{(1)} \psi_k + \lambda_n \int_B b_{n\beta}^{(1)} \psi_\beta d\beta ; \end{aligned}$$

ricordando che ψ_k e ψ_β sono autofunzioni di H_0 , questa fornisce

$$\begin{aligned} H_1 \psi_n + \sum_k c_{nk}^{(1)} \lambda_k \psi_k + \int_B b_{n\beta}^{(1)} \lambda_\beta \psi_\beta d\beta &= \\ &= \lambda_n^{(1)} \psi_n + \lambda_n \sum_k c_{nk}^{(1)} \psi_k + \lambda_n \int_B b_{n\beta}^{(1)} \psi_\beta d\beta . \end{aligned} \quad (8)$$

Prendendo il prodotto scalare di questa con ψ_n – e ricordando ancora una volta che $c_{nn}^{(1)} = 0$, ed inoltre che $\langle n|\beta\rangle = 0$ – abbiamo nuovamente

$$\lambda_n^{(1)} = \langle n|H_1|n\rangle ; \quad (9)$$

questo conferma che, come era da attendersi, la presenza dello spettro continuo *non* influisce sulla correzione al primo ordine degli autovalori discreti.

Consideriamo ora il prodotto scalare della (8) con ψ_m , $m \neq n$. Otteniamo

$$\langle m|H_1|n\rangle + c_{nm}^{(1)} \lambda_m = \lambda_n c_{nm}^{(1)} \psi_m , \quad (10)$$

e quindi ancora (come nella dispensa precedente, ossia come nel caso in cui lo spettro continuo non è presente)

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

Ma ora questi coefficienti *non* sono sufficienti a ricostruire $\psi_n^{(1)}$: dobbiamo infatti determinare anche i coefficienti $b_{n\beta}^{(1)}$. Per far ciò, consideriamo il prodotto scalare con ψ_γ , ricordando che $\langle \gamma|\beta\rangle = \delta(\beta - \gamma)$. In questo modo otteniamo

$$\langle \gamma|H_1|n\rangle + b_{n\gamma}^{(1)} \lambda_\gamma = \lambda_n b_{n\gamma}^{(1)} , \quad (12)$$

vale a dire

$$b_{n\gamma}^{(1)} = \frac{\langle \gamma|H_1|n\rangle}{\lambda_n - \lambda_\gamma} . \quad (13)$$

Abbiamo quindi ottenuto che

$$\psi_n^{(1)} = \sum_k \left(\frac{\langle k|H_1\rangle}{\lambda_n - \lambda_k} \right) \psi_k + \int_B \left(\frac{\langle \beta|H_1|n\rangle}{\lambda_n - \lambda_\beta} \right) \psi_\beta d\beta . \quad (14)$$

Nel seguito di questa dispensa, a meno di esplicito avviso contrario, supporremo sempre di avere un H_0 con spettro puramente discreto. Lo studente è naturalmente libero di ricavare per suo conto l'estensione delle formule e dei risultati ottenuti nel seguito al caso in cui H_0 abbia anche spettro continuo.

3 Caso degenere

Molte delle formule ottenute nella dispensa precedente (e nella sezione 1) presentano dei denominatori della forma $\lambda_n - \lambda_m$; nel caso di autovalori *degeneri*⁵ questi danno luogo a singolarità. Questo non è grave: infatti quelle formule sono state ricavate sotto l'ipotesi di non-degenerazione, e per il caso degenere sarà necessario modificare la discussione.

Sottolineamo che nel caso la perturbazione *non* rimuova la degenerazione, gli argomenti visti nel caso non-degenere per giustificare la scelta

$$c_{nn}^{(k)} = 0$$

si estendono immediatamente ai coefficienti che legano diversi autostati nello stesso autospatio degenere; questo fa sì che la discussione nel caso non degenere si estenda al caso con “degenerazione stabile”, ad esempio quella causata da una simmetria presente anche nel sistema perturbato (naturalmente a questo punto lo studente è invitato a verificare autonomamente questa affermazione, anche per vedere se si tratta di una estensione automatica o se è necessaria qualche modifica).

Il caso “interessante” è quindi quello in cui la perturbazione *rimuove* (in tutto o in parte) *la degenerazione*.

Supponiamo di avere – per l'Hamiltoniana imperturbata H_0 – un autospatio degenere⁶ V , corrispondente ad un autovalore λ , di dimensione d ; possiamo quindi scegliere in modo arbitrario una base ortonormale (che lasciamo per ora indeterminata) in V

$$\{\phi_1, \dots, \phi_d\} ;$$

ogni matrice unitaria M individua un'altra base ortonormale $\{\psi_i\}$ in V tramite

$$\psi_i = M_{ij} \phi_j ,$$

⁵E' appena il caso di ricordare che il teorema di non-degenerazione ci assicura che questo non puo' succedere in una dimensione; quindi questa sezione si riferisce a situazioni in più dimensioni spaziali.

⁶Tutte le nostre considerazioni e calcoli saranno “interne” a questo autospatio; resta inteso che per quanto riguarda gli altri stati ed autovalori, si procede come al solito.

ed ogni tale ψ (così come ogni ϕ) soddisfa l'equazione di Schroedinger, con come autovalore proprio il nostro λ ad ordine zero:

$$H_0 \psi = \lambda \psi .$$

Consideriamo ora l'equazione di Schroedinger ad ordine uno, ossia

$$H_0 \psi^{(1)} + H_1 \psi^{(0)} = \lambda \psi^{(1)} + \lambda^{(1)} \psi^{(0)} . \quad (15)$$

Scrivendo

$$\psi^{(i)} = \sum_{k=1}^d a_k^{(i)} \phi_k ,$$

otteniamo dalla (15) con successive evidenti trasformazioni

$$\begin{aligned} \sum_k \left[a_k^{(1)} H_0 \phi_k + a_k^{(0)} H_1 \phi_k - \left(a_k^{(1)} \lambda \phi_k + a_k^{(0)} \lambda^{(1)} \phi_k \right) \right] &= 0 \\ \sum_k \left[a_k^{(1)} \lambda \phi_k + a_k^{(0)} H_1 \phi_k - \left(a_k^{(1)} \lambda \phi_k + a_k^{(0)} \lambda^{(1)} \phi_k \right) \right] &= 0 \\ \sum_k \left[a_k^{(0)} H_1 \phi_k - a_k^{(0)} \lambda^{(1)} \phi_k \right] &= 0 . \end{aligned}$$

Considerando ora il prodotto scalare con ϕ_m , questa equazione fornisce

$$\sum_k \left[a_k^{(0)} \langle m | H_1 | k \rangle - a_k^{(0)} \lambda^{(1)} \langle m | k \rangle \right] = 0 ;$$

ovvero, ricordando che $\langle m | k \rangle = \delta_{mk}$,

$$\sum_k \left(\langle m | H_1 | k \rangle - \lambda^{(1)} \delta_{mk} \right) a_k^{(0)} = 0 .$$

In altre parole, definendo la matrice Q ed il vettore \mathbf{a} come

$$Q = V - \lambda^{(1)} I , \quad V_{mk} = \langle m | H_1 | k \rangle , \quad \mathbf{a} = \left(a_1^{(1)}, \dots, a_d^{(1)} \right) ,$$

abbiamo una equazione del tipo

$$Q \mathbf{a} = 0 , \quad (16)$$

che ammette soluzione se e solo se il determinante di Q si annulla.

Dunque $\lambda^{(1)}$ deve essere uno degli autovalori di V , ed \mathbf{a} il corrispondente autovettore (ricordiamo che, essendo $V^+ = V$, autovettori corrispondenti ad autovalori distinti sono ortogonali). Naturalmente \mathbf{a} identifica a sua volta una funzione

$$\psi^{(0)} = \sum_k a_k^{(0)} \phi_k .$$

Abbiamo quindi così ottenuto d soluzioni (in generale diverse tra loro) per $\lambda^{(1)}$, e quindi per

$$\tilde{\lambda}_i = \lambda + \varepsilon \lambda_i^{(1)},$$

ed in corrispondenza con queste d autofunzioni

$$\psi_i^{(0)} = \sum_k \left(a_k^{(0)} \right)_i \phi_k$$

appartenenti all'autospazio degenere V . Lo studente è invitato a discutere la loro ortogonalità.

Se ora cambiamo la nostra scelta iniziale per la base, o meglio per i vettori della base che appartengono allo spazio V , e passiamo alla base costituita dalle $\psi_i^{(0)}$, evitiamo ogni problema di piccoli denominatori. Infatti, le $\psi_i^{(0)}$ così determinate sono *già* autofunzioni di \tilde{H} , almeno ad ordine ε .

Problema. Discutere la situazione corrispondente (Hamiltoniana imperturbata degenere, perturbazione che rimuove la degenerazione) in Meccanica Classica. Se non si desidera condurre una discussione astratta, ci si può concentrare su un caso concreto; ad esempio,

$$H_0 = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} + \frac{k}{2}(q_1^2 + q_2^2); \quad H_1 = \frac{q_1^4}{4}.$$

[Suggerimento: considerare i “modi normali nonlineari”]

4 Livelli quasi-degeneri

Oltre al caso in cui dei livelli di H_0 sono degeneri, può verificarsi quello in cui si hanno livelli *quasi-degeneri*, ossia molto vicini tra di loro. In questo caso la teoria delle perturbazioni che abbiamo fin qui considerato non è applicabile: infatti una delle condizioni per la sua validità è che la correzione⁷ $\lambda_n^{(1)}$ sia piccola non solo rispetto al valore imperturbato $\lambda_n = \lambda_n^{(0)}$, ma anche rispetto alla separazione di λ_n dai livelli vicini.

E' però ugualmente possibile sviluppare calcoli perturbativi, procedendo in maniera simile a quanto fatto per i livelli esattamente degeneri.

Consideriamo il caso in cui ci siano degli autovalori (di H_0) $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ a distanza ε tra di loro; indicando con λ_0 il “baricentro” di questi, scriviamo

$$\lambda_i = \lambda_0 + \varepsilon \mu_i.$$

Ora i livelli *non* sono degeneri⁸, e ad ognuno dei livelli λ_i è associato un autostato

⁷Limitiamo la nostra discussione alla teoria delle perturbazioni al primo ordine, come anche del resto nella sezione precedente; delle considerazioni analoghe possono essere estese ad ordini superiori.

⁸Si tratta di una assunzione per semplicità. Naturalmente è anche possibile che vi siano alcuni livelli degeneri, così come che vi siano diversi gruppi di livelli degeneri, quasi-degeneri tra di loro (cioè a piccola distanza uno dall'altro), come in effetti avviene in certi problemi di Fisica dell'atomo. Si tratta però di complicazioni, non di una situazione che richiede degli strumenti concettuali nuovi oltre a quelli sviluppati in questa sezione ed in quella precedente.

ψ_i soluzione di

$$H \psi_i = \lambda_i \psi_i .$$

Ciò non toglie che sia possibile cambiare base; in particolare possiamo al posto delle $\{\psi_1, \dots, \psi_n\}$ considerare delle loro combinazioni lineari

$$\phi = \sum_k a_k \psi_k ; \quad (17)$$

sottolineiamo che queste in generale (contrariamente a quanto avvenuto nel caso propriamente degenere) *non* sono autofunzioni di H_0 .

Cerchiamo ora autovalori ed autofunzioni di $\tilde{H} = H_0 + \varepsilon H_1$ in questo sottospazio. Questo significa cercare soluzioni di

$$\tilde{H} \phi = E \phi .$$

Inserendo la (17) abbiamo

$$(H_0 + \varepsilon H_1) \sum_k a_k \psi_k = E \sum_k a_k \psi_k ,$$

e quindi

$$\sum_k a_k \lambda_k \psi_k + \varepsilon \sum_k a_k H_1 \psi_k = E \sum_k a_k \psi_k .$$

Scriviamo ora

$$\lambda_k = \lambda_0 + \varepsilon \mu_k , \quad E = \lambda_0 + \varepsilon \eta ;$$

ovviamente qui le μ_k sono note, mentre η è incognito. In questo modo abbiamo

$$\lambda_0 \sum_k a_k \psi_k + \varepsilon \sum_k a_k \mu_k \psi_k + \varepsilon \sum_k a_k H_1 \psi_k = \lambda_0 \sum_k a_k \psi_k + \varepsilon \eta \sum_k a_k \psi_k .$$

Eliminando i termini uguali (quelli di ordine zero) nei due membri, e portando tutto a primo membro – e naturalmente dividendo per ε – otteniamo

$$\sum_k [\mu_k \psi_k + H_1 \psi_k - \eta \psi_k] a_k = 0 . \quad (18)$$

Procediamo ora, come di consueto, a fare il prodotto scalare di questa espressione con ψ_m ; otteniamo

$$\sum_k [\mu_k \langle m|k \rangle + \langle m|H_1|k \rangle - \eta \langle m|k \rangle] a_k = 0 ;$$

infine, ricordando che $\langle m|k \rangle = \delta_{mk}$ (questo è garantito dal fatto che ψ_i corrispondono ad autovalori diversi; nel caso degenere si può comunque scegliere la base in modo appropriato), abbiamo

$$\sum_k [\langle m|H_1|k \rangle + (\mu_k - \eta) \delta_{mk}] a_k = 0 . \quad (19)$$

Come in precedenza, possiamo scrivere questa in forma matriciale definendo matrici V e W con elementi

$$V_{mk} = \langle m|H_1|k \rangle, \quad W_{mk} = V_{mk} + \mu_k \delta_{mk},$$

ed inoltre

$$M = W - \eta I; \quad \mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n).$$

Ora la (19) si scrive come

$$M \mathbf{a} = 0,$$

e naturalmente ammette soluzione se e solo se M ha determinante nullo ossia se e solo se η è uno degli autovalori di W .

Ad ognuno di questi n autovalori η_i corrisponde un autovettore $\mathbf{a}^{(i)}$ e quindi una funzione

$$\phi_i = \sum_k \mathbf{a}_k^{(i)} \psi_k.$$

In questo modo abbiamo già calcolato autovettori ed autofunzioni al primo ordine.

Osservazione. Sottolineamo la differenza rispetto al caso completamente degenere: in quello la matrice rilevante è V , ossia la matrice che racchiude gli elementi di matrice della perturbazione tra gli stati (degeneri) della base, in questo caso si tratta della matrice W , in cui oltre agli elementi di matrice della perturbazione tra gli stati (quasi-degeneri) della base, entrano anche le differenze $\varepsilon \mu_i$ degli autovalori λ_i rispetto al “baricentro” λ_0 .

Osservazione. Questo approccio ha naturalmente una controparte in Meccanica Classica, nota anche come “metodo del detuning” (e con altri nomi; ad esempio nell’edizione italiana del testo di Arnold – appendice 7 – si parla di “disaccordo di frequenza”). L’idea è sempre quella di considerare un problema imperturbato completamente degenere, ed i termini che rompono la degenerazione (nel problema imperturbato) come facenti parte della perturbazione. Questo metodo trova uso anche nella teoria delle *forme normali* (ben familiari a chi ha seguito o sta seguendo i corsi di Sistemi Dinamici 1, di Meccanica Hamiltoniana o di Meccanica Celeste); lo studente interessato può consultare al riguardo i lavori di F. Verhulst.

5 Perturbazioni dipendenti dal tempo

Consideriamo ora il caso in cui la perturbazione dipenda *esplicitamente* dal tempo,

$$\tilde{H} = H_0 + \varepsilon H_1(t).$$

In questo caso la Hamiltoniana \tilde{H} non è invariante sotto traslazioni nel tempo, e quindi l’energia non è conservata. Non ha quindi nessun senso porre il problema agli autovalori.

Possiamo però ancora porre il problema dell'evoluzione temporale di uno stato a partire da un qualche dato iniziale $\psi(x, 0)$. Questa come sappiamo è governata dall'equazione di Schroedinger dipendente dal tempo

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \tilde{H} \psi . \quad (20)$$

È naturale considerare il caso in cui $\psi(x, 0) = \psi_n(x)$ per qualche n ; inoltre in virtù della linearità dell'equazione di Schroedinger (20), e del fatto che ogni dato iniziale si può scrivere come

$$\psi(x, 0) = \sum_k c_k \psi_k ,$$

una volta risolto questo problema (cioè quello con dato iniziale ψ_n) sapremo risolvere il problema con un qualsiasi dato iniziale.

Scriviamo ora

$$\Phi_n(x, t) = e^{-(i/\hbar)\lambda_n t} \Psi_n(x) \quad (21)$$

per l'evoluto della autofunzione $\psi_n(x)$ del problema stazionario per H_0 , corrispondente all'autovalore λ_n .

Cercheremo la soluzione di (20) nella forma

$$\psi(x, t) = \sum_k a_k(t) \Phi_k(x, t) , \quad (22)$$

con

$$a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + \varepsilon a_k^{(1)}(t) + \dots . \quad (23)$$

Inserendo queste formule nella (20), otteniamo

$$i \hbar \sum_k a_k (\partial_t \Phi_k) + i \hbar \sum_k (\partial_t a_k) \Phi_k = \sum_k a_k H_0 \Phi_k + \varepsilon \sum_k a_k H_1 \Phi_k ;$$

ricordando che per definizione

$$i \hbar \frac{\partial \Phi_k}{\partial t} = H_0 \Phi_k ,$$

i primi termini di ambo i membri si elidono, e restiamo con

$$i \hbar \sum_k (\partial_t a_k) \Phi_k = \varepsilon \sum_k a_k H_1 \Phi_k . \quad (24)$$

Se ora consideriamo anche lo sviluppo in serie per a_k , otteniamo

$$\begin{aligned} (i \hbar) \sum_k \left(\partial_t a_k^{(0)} \right) \Phi_k &= 0 , \\ (i \hbar) \sum_k \left(\partial_t a_k^{(1)} \right) \Phi_k &= \sum_k a_k^{(0)} H_1 \Phi_k , \\ &\vdots \\ (i \hbar) \sum_k \left(\partial_t a_k^{(r+1)} \right) \Phi_k &= \sum_k a_k^{(r)} H_1 \Phi_k . \end{aligned}$$

Quindi segue dalla prima equazione (cioè dai termini di ordine ε^0) che le $a_k^{(0)}$ sono costanti; se scegliamo

$$a_k^{(0)} = \delta_{kn}$$

stiamo in effetti considerando la perturbazione di Φ_n , cioè appunto (come ci eravamo ripromessi) della soluzione con dato iniziale $\psi(x, 0) = \psi_n(x)$.

Per sottolineare questo fatto, scriveremo d'ora in poi

$$a_k^{(r)} = A_{nk}^{(r)} ;$$

il primo indice ricorda che stiamo considerando appunto la perturbazione di Φ_n .

Veniamo ora alla seconda equazione, cioè ai termini di ordine ε . Con la nostra nuova notazione, questa si riscrive come

$$(i \hbar) \sum_k \left(\partial_t A_{nk}^{(1)} \right) \Phi_k = \sum_k A_{nk}^{(0)} H_1 \Phi_k ;$$

ovvero, ricordando che $A_{nk}^{(0)} = \delta_{nk}$,

$$(i \hbar) \sum_k \left(\partial_t A_{nk}^{(1)} \right) \Phi_k = H_1 \Phi_n .$$

Considerando ora il prodotto scalare di ambo i membri con Φ_m , otteniamo

$$(i \hbar) \sum_k \left(\partial_t A_{nk}^{(1)} \right) (\Phi_m, \Phi_k) = (\Phi_m, H_1 \Phi_n) ; \quad (25)$$

infine, ricordiamo la definizione di Φ_k e notiamo che

$$\begin{aligned} (\Phi_m, \Phi_k) &= \left(e^{-(i/\hbar)\lambda_m t} \psi_m, e^{-(i/\hbar)\lambda_k t} \psi_k \right) \\ &= e^{-(i/\hbar)(\lambda_k - \lambda_m)t} \langle m | k \rangle = \delta_{mk} . \end{aligned}$$

Con questa, la (25) diventa

$$\begin{aligned} (i \hbar) \left(\partial_t A_{nm}^{(1)} \right) &= (\Phi_m, H_1 \Phi_n) \\ &= e^{-(i/\hbar)(\lambda_n - \lambda_m)t} \langle m | H_1 | n \rangle \\ &:= e^{-(i/\hbar)\omega_{nm} t} \langle m | H_1 | n \rangle . \end{aligned}$$

Naturalmente questa si può anche scrivere come

$$\frac{d A_{nm}^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \exp[-(i/\hbar)\omega_{nm} t] \langle m | H_1 | n \rangle . \quad (26)$$

A questa equazione va poi aggiunto il dato iniziale

$$A_{nm}^{(1)}(0) = 0 .$$

La soluzione della (26) con questo dato iniziale è naturalmente

$$A_{nm}^{(1)}(t) = - \int \left[\frac{i}{\hbar} e^{-(i/\hbar)\omega_{nm}\tau} \langle m|H_1|n \rangle \right] d\tau . \quad (27)$$

Sottolineiamo che (per ipotesi) H_1 dipende dal tempo, $H_1 = H_1(t)$; quindi gli elementi di matrice

$$V_{mn} := \langle m|H_1|n \rangle$$

che appaiono nella soluzione (27) sono anch'essi una funzione del tempo,

$$V_{mn} = V_{mn}(t) ;$$

inoltre la dipendenza dal tempo dei V_{mn} deriva unicamente da quella di H_1 , ed è quindi dello stesso tipo. In particolare, se $H_1(t)$ è (multi) periodica nel tempo, così saranno anche gli elementi di matrice $V_{mn}(t)$.

6 Perturbazioni periodiche

Vogliamo ora affrontare il problema accennato al termine della sezione precedente, cioè quello di perturbazioni dipendenti dal tempo non in modo arbitrario ma più specificamente *periodiche*. Tratteremo il caso di una periodicità semplice; in altre parole, ricordando anche che H_1 deve essere Hermitiano (autoaggiunto)

$$H_1(t) = P e^{-i\omega_0 t} + P^+ e^{i\omega_0 t} ,$$

con P un operatore indipendente dal tempo. Escludiamo il caso banale supponendo $\omega_0 \neq 0$.

In questo caso, con la notazione introdotta poco sopra, e usando nell'ultimo passaggio il fatto che $\langle m|P^+|n \rangle = (\langle n|P|m \rangle)^*$, abbiamo

$$\begin{aligned} V_{mn}(t) &= e^{-i\omega_0 t} \langle m|P|n \rangle + e^{i\omega_0 t} \langle m|P^+|n \rangle \\ &= e^{-i\omega_0 t} P_{mn} + e^{i\omega_0 t} P_{mn}^+ \\ &= e^{-i\omega_0 t} P_{mn} + e^{i\omega_0 t} (P_{nm})^* . \end{aligned}$$

L'equazione (26) diventa allora

$$\frac{dA_{nm}^{(1)}}{dt} = - \frac{i}{\hbar} e^{-(i/\hbar)\omega_{nm}t} [e^{-i\omega_0 t} P_{mn} + e^{i\omega_0 t} (P_{nm})^*] . \quad (28)$$

E' evidente che abbiamo situazioni diverse a seconda delle relazioni tra le frequenze naturali

$$\omega_{mn} = (i/\hbar)(\lambda_n - \lambda_m)$$

e la frequenza ω_0 della perturbazione.

In particolare, se *non* si hanno *risonanze*⁹, ossia se per ogni scelta di m, n

$$\omega_{mn} \neq \pm\omega_0 , \quad (29)$$

⁹Lo studente familiare con la teoria delle *forme normali* noterà che in quel contesto le risonanze corrispondono a relazioni razionali tra le frequenze; in quel linguaggio stiamo qui considerando – o meglio, escludendo – solo le risonanze 1 : 1.

allora risulta

$$A_{mk}^{(1)} = \frac{1}{\hbar} \left[\left(\frac{\exp[i(\omega_{mk} - \omega_0)t]}{\omega_0 - \omega_{mk}} \right) P_{mk} - \left(\frac{\exp[i(\omega_{mk} + \omega_0)t]}{\omega_0 + \omega_{mk}} \right) P_{km}^* \right]. \quad (30)$$

E' importante notare che nel caso in cui la (29) sia soddisfatta, ma si abbiano comunque dei *piccoli denominatori* (cioè sia $\omega_{mn} \simeq \pm\omega_0$ per qualche scelta di m, n), la soluzione della (28) è ancora fornita dalla (30), ma questa viola le condizioni per l'applicazione della teoria delle perturbazioni, in quanto si hanno "correzioni" $A_{mk}^{(1)} \simeq 1/\varepsilon$, che non sono piccole rispetto alla soluzione imperturbata. In altre parole, la serie in ε risulta non bene ordinata.¹⁰

7 Perturbazioni agenti per un tempo finito; transizioni causate da una perturbazione

Un altro caso di evidente interesse fisico è quello in cui il sistema è inizialmente nello stato ψ_n , e ad esso viene applicata (diciamo a partire dal tempo $t = 0$) una perturbazione per un tempo finito T . Ci si chiede allora quale sarà la probabilità $\mathcal{P}(k)$ di trovarlo, ad un tempo $t > T$, in un altro stato ψ_k (o nello stesso stato ψ_n).

La risposta a questo quesito è in realtà già stata data. Infatti, la (27) ci dice che, per ogni tempo $t > T$, avremo

$$A_{nm}^{(1)}(t) = - \int_0^T \left[\frac{i}{\hbar} e^{-(i/\hbar)\omega_{nm}t} \langle m|H_1|n\rangle \right] dt. \quad (31)$$

Dato che (al primo ordine in perturbazioni)

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \Phi_n(x, t) + \sum_k A_{nk}^{(1)}(t) \Phi_k(x, t) \\ &= e^{-(i/\hbar)\lambda_n t} \psi_n(x) + \sum_k A_{nk}^{(1)}(t) e^{-(i/\hbar)\lambda_k t} \psi_k(x), \end{aligned}$$

evidentemente

$$(\psi_k, \psi(x, t)) = \begin{cases} A_{nk}^{(1)}(t) e^{-(i/\hbar)\lambda_k t} & \text{per } k \neq n \\ e^{-(i/\hbar)\lambda_n t} (1 + A_{nn}^{(1)}(t)) & \text{per } k = n \end{cases}$$

Quindi, in conclusione,

$$\mathcal{P}(k) = (\psi_k, \psi) = \begin{cases} Z_n^{-1} |A_{nk}^{(1)}(T)|^2 & \text{per } k \neq n \\ Z_n^{-1} |(1 + A_{nn}^{(1)}(T))|^2 & \text{per } k = n \end{cases} \quad (32)$$

¹⁰Notiamo anche che in presenza di spettro continuo (ma sempre considerando il problema della perturbazione nel settore corrispondente allo spettro discreto, v. sezione 2), sarebbe necessario chiedere anche che ω_0 sia diversa (e sufficientemente lontana, per evitare i piccoli denominatori) dalle frequenze dello spettro continuo.

dove il fattore di normalizzazione \mathcal{Z}_n è definito da

$$\mathcal{Z}_n = \left| 1 + A_{nn}^{(1)}(T) \right|^2 + \sum_{k \neq n} |A_{nk}^{(1)}(T)|^2 .$$

8 Transizione tra due diversi potenziali come perturbazione

Allo stesso modo possiamo considerare una situazione in cui il sistema è soggetto ad un potenziale $V_0(x)$ per $t < 0$, e ad un potenziale $V_1(x)$ per $t > T$; mentre nell'intervallo $0 \leq t \leq T$ il potenziale varia continuamente tra V_0 e V_∞ , ad esempio secondo la

$$V(t) = V_0 + (V_\infty - V_0) \frac{t}{T}$$

(quindi interpolando tra i due potenziali). Evidentemente, se conosciamo lo stato del sistema ad un tempo $t < 0$ (o al tempo $t = 0$), dunque se sappiamo che si trova in uno degli autostati *corrispondenti al potenziale* V_0 , il problema è quello di conoscere le probabilità di trovare il sistema in uno degli autostati *corrispondenti al potenziale* V_∞ al tempo T .¹¹

Dovremo quindi:

- (a) calcolare le probabilità di transizione tra autostati di H_0 ;
- (b) proiettare gli autostati di H_0 sugli autostati di $H_\infty = p^2/(2m) + V_\infty$.

Una realizzazione particolare di questo problema si ha quando V_∞ e V_0 sono dello stesso tipo ma differiscono per i valori dei parametri che appaiono in essi: ad esempio, un oscillatore armonico con costante elastica $k(t)$ e quindi frequenza variabile nel tempo $\omega(t)$, o una buca di potenziale di lunghezza $L(t)$ variabile nel tempo.

Problema. Si consideri una buca di potenziale infinita di larghezza $L = L(t)$ con

$$L(t) = \begin{cases} \pi & \text{per } t \leq 0 \\ (1 + \varepsilon t/T)\pi & \text{per } 0 < t < T \\ (1 + \varepsilon)\pi & \text{per } t \geq T. \end{cases}$$

Si determinino perturbativamente l'energia e lo stato fondamentale al tempo $t \geq T$, confrontando questo risultato con quello ottenuto in modo esatto.

Problema. Si consideri una potenziale a delta $V(x) = -A\delta(x)$ (dove A è un numero reale positivo) di profondità $A = A(t)$ con

$$A(t) = \begin{cases} 1 & \text{per } t \leq 0 \\ (1 + \varepsilon t/T) & \text{per } 0 < t < T \\ (1 + \varepsilon) & \text{per } t \geq T. \end{cases}$$

Si determinino perturbativamente l'energia e lo stato fondamentale al tempo $t \geq T$, confrontando questo risultato con quello ottenuto in modo esatto.

¹¹Nel caso poi in cui V_∞ coincida con V_0 (ma $V(t) \neq V_0$ per $0 < t < T$) si torna al problema considerato nella sezione precedente.

9 Perturbazioni adiabatiche

Un caso particolare di queste situazioni è quello in cui la perturbazione dipende dal tempo ma varia in modo estremamente lento (o, come si dice in Fisica, *adiabaticamente*).

In questo caso nella (27), che riscriviamo ora come

$$A_{nm}^{(1)}(t) = - \int_0^t \left[\frac{i}{\hbar} e^{-(i/\hbar)\omega_{nm}\tau} V_{mn}(\tau) \right] d\tau, \quad (33)$$

la funzione $V_{mn}(t)$ varia molto lentamente, e si può considerare come quasi costante su intervalli di tempo di lunghezza

$$\delta t = \frac{2\pi\hbar}{\omega_{mn}}$$

pari al periodo del termine oscillante $\exp[(i/\hbar)\omega_{mn}]$. Ci aspettiamo quindi che nel limite di “lentezza infinita”, cioè nel limite adiabatico, questi integrali vadano a zero, e con essi i coefficienti $A_{nm}^{(1)}$. In altre parole, ci aspettiamo che se la perturbazione agisce molto lentamente, il sistema resti nello stato iniziale.¹²

Va però osservato che nel limite di “infinita lentezza” il tempo su cui effettua l’integrazione – e quindi anche il numero di periodi del termine oscillante $\exp[(i/\hbar)\omega_{mn}]$, su ognuno dei quali il contributo diviene infinitesimo, va all’infinito. Quindi – sebbene quanto visto in Meccanica Classica ci suggerisca che l’integrale totale andrà a zero – la questione non può essere risolta in modo qualitativo ed abbisogna di una discussione quantitativa.

Vediamo allora di rendere più quantitativa la nostra discussione; consideriamo un caso concreto in cui la perturbazione agisce per un tempo finito T , naturalmente nel limite $T \rightarrow \infty$.

Consideriamo una perturbazione

$$H_1(t) = V_1 \Phi(t)$$

con V_1 costante; inoltre per poter effettuare calcoli espliciti, consideriamo una dipendenza temporale semplice,

$$\Phi(t) = \begin{cases} 0 & \text{per } t < 0 \\ \sin(\Omega t) & \text{per } 0 \leq t \leq T \\ 0 & \text{per } t > T \end{cases}, \quad T = \frac{\pi}{\Omega}.$$

Evidentemente quello che ci interessa sono i valori di

$$A_{nm}^{(1)}(T) = - \int_0^T \left[\frac{i}{\hbar} e^{-(i/\hbar)\omega_{nm}\tau} P_{mn}(\tau) \right] d\tau, \quad (34)$$

dove P_{mn} sono gli elementi di matrice di H_1 . Con la nostra ipotesi per H_1 ,

$$A_{nm}^{(1)}(T) = - \frac{i}{\hbar} V_{mn} \int_0^T \left[e^{-(i/\hbar)\omega_{nm}\tau} \Phi(\tau) \right] d\tau := - \frac{i}{\hbar} V_{mn} I_{mn}(T), \quad (35)$$

¹²Questa aspettativa è naturalmente rafforzata dagli analoghi risultati che valgono in Meccanica Classica, e che sono stati visti nei corsi relativi.

con ora V_{mn} gli elementi di matrice (indipendenti dal tempo per ipotesi) di V_1 .

D'ora in poi, per comodità di notazione, supponiamo che m, n siano fissati, e scriviamo A per A_{mn} , ω per ω_{mn} , I per I_{mn} . Scriveremo inoltre $\nu = \omega/\hbar$, e valuteremo gli integrali ricordando che $T = \pi/\Omega$.

Dobbiamo quindi calcolare

$$\begin{aligned}
I(T) &= \int_0^T \left[e^{-(i/\hbar)\omega\tau} \Phi(\tau) \right] d\tau \\
&= \int_0^T \left[e^{-(i/\hbar)\omega_{nm}\tau} \sin(\Omega\tau) \right] d\tau \\
&= \int_0^T \left[\cos((\omega/\hbar)\tau) - i \sin((\omega/\hbar)\tau) \right] \sin(\Omega\tau) d\tau \\
&= \int_0^T \cos(\nu\tau) \sin(\Omega\tau) d\tau - i \int_0^T \sin(\nu\tau) \sin(\Omega\tau) d\tau \\
&= \left(\frac{\Omega}{\Omega^2 - \nu^2} \right) \left[\left(1 + \cos\left(\frac{\nu\pi}{\Omega}\right) \right) - i \sin\left(\frac{\nu\pi}{\Omega}\right) \right] ;
\end{aligned}$$

siamo dunque sicuri che

$$|I| \leq 3 \left(\frac{\Omega}{|\Omega^2 - \nu^2|} \right) = 3 \frac{\Omega}{\nu^2} \frac{1}{|1 - \Omega^2/\nu^2|}, \quad (36)$$

ed è chiaro (ricordando che $\nu = \omega/\hbar$ è una costante che non è toccata dal limite adiabatico) che per $T \rightarrow \infty$, quindi $\Omega \rightarrow 0$, $|I| \rightarrow 0$.

Naturalmente qui abbiamo usato la dipendenza esplicita (e semplice) della perturbazione dal tempo per effettuare dei calcoli espliciti (e semplici); una discussione (semplice ma non del tutto rigorosa) del caso con dipendenza dal tempo arbitraria purchè “lenta” può essere svolta decomponendo $\Phi(t)$, o più in generale $H_1(t)$ nelle sue componenti di Fourier, ed applicando ad ognuna di queste la discussione precedente.

Va ricordato che l'ipotesi di “dipendenza lenta” dal tempo significa in questo contesto, che solo componenti di Fourier con periodo $\theta \gg 2\pi\hbar/\omega_{mn}$ (per tutte le scelte di m, n) saranno presenti.

Notiamo infine che l'approssimazione adiabatica si può usare anche nel caso in cui si ha una transizione tra un potenziale e l'altro lungo un tempo T ; in questo caso sarebbe però necessario anche proiettare le soluzioni sulla base di autostati della Hamiltoniana “finale”.

A Esempio di calcolo perturbativo per il caso degenere

Consideriamo il caso in cui il sistema imperturbato è un oscillatore armonico isotropo in due gradi di libertà; indicheremo le coordinate spaziali con (x, y) e gli impulsi coniugati a queste con (p_x, p_y) . La Hamiltoniana è dunque

$$H_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2) . \quad (37)$$

Si tratta naturalmente di una Hamiltoniana separabile, e sappiamo dalla discussione dell'oscillatore armonico che le autofunzioni saranno

$$|m, n\rangle = \chi_{mn}(x, y) = \psi_m(x) \psi_n(y) ,$$

dove ψ_k sono le autofunzioni dell'oscillatore armonico uni-dimensionale (con m ed ω dati). I livelli energetici corrispondenti sono

$$\mathcal{E}_{m,n} = \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) + \left(m + \frac{1}{2} \right) \right] \hbar\omega = (m + n + 1) \hbar\omega .$$

E' evidente che l'energia dipende solo da $N = m + n$, e che siamo in presenza di uno spettro degenere. In particolare gli autovalori ed i corrispondenti autospazi (identificati tramite una loro base) sono

$$\begin{aligned} E_0 &= \hbar\omega , & \{ \chi_{00} \} , \\ E_1 &= 2\hbar\omega , & \{ \chi_{10}, \chi_{01} \} , \\ E_2 &= 3\hbar\omega , & \{ \chi_{20}, \chi_{11}, \chi_{02} \} , \\ & \dots & , \\ E_N &= (N - 1)\hbar\omega , & \{ \chi_{N,0}, \chi_{N-1,1}, \dots, \chi_{0,N} \} . \end{aligned}$$

A.1 Perturbazione separabile

La più semplice perturbazione che possiamo considerare corrisponde ad una piccola modifica della frequenza in una delle due direzioni, diciamo x ; scriveremo allora

$$H_1 = \alpha \frac{x^2}{2} .$$

Qui α è un parametro, che è conveniente scrivere come

$$\alpha = \varepsilon m \omega^2 .$$

Assumeremo naturalmente $\varepsilon \ll 1$, cosicché si ha effettivamente una piccola perturbazione (in senso naturale) dell'Hamiltoniana H_0 .

In questo modo la Hamiltoniana completa $\tilde{H} = H_0 + H_1$ corrisponde ad un oscillatore armonico *non* isotropo, in cui le due frequenze sono (con ovvia notazione)

$$\tilde{\omega}_x = (1 + \varepsilon) \omega , \quad \tilde{\omega}_y = \omega .$$

Dato che \tilde{H} è ancora separabile, ed è ancora la somma di due oscillatori armonici uno-dimensionali, possiamo facilmente ottenere informazioni *esatte* sulle sue autofunzioni e sui corrispondenti autovalori (lo studente è invitato ad effettuare i semplici conti relativi, anche per poter poi confrontare i risultati che otterremo), ma in questa sede vogliamo invece considerare il problema dal punto di vista perturbativo.

Applicando la teoria sviluppata nella sezione precedente, dobbiamo semplicemente considerare una base $\{\phi_1, \dots, \phi_{N+1}\}$ nell'autospazio corrispondente al livello energetico E_N , e calcolare la matrice V i cui elementi sono

$$V_{mn} = (\phi_m, H_1 \phi_n) .$$

Consideriamo per concretezza il caso $N = 1$, e dunque l'autospazio due-dimensionale generato dalle funzioni

$$|1\rangle = \phi_1(x, y) = \psi_1(x) \psi_0(y) , \quad |2\rangle = \phi_2(x, y) = \psi_0(x) \psi_1(y) .$$

Per effettuare i calcoli, è conveniente esprimere x^2 in termini degli operatori di abbassamento ed innalzamento (relativi al grado di libertà x) $\eta = \eta_x$ ed $\eta^+ = \eta_x^+$. Come abbiamo ricordato nel discutere le perturbazioni nel caso non degenerare, abbiamo

$$x = -i A (\eta^+ - \eta) , \quad A = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} .$$

Dunque

$$x^2 = -A^2 (\eta^+ \eta^+ - \eta^+ \eta - \eta \eta^+ + \eta \eta) .$$

Con semplici calcoli basati sulle proprietà degli operatori η ed η^+ , in particolare su

$$\eta |n+1\rangle = \sqrt{n+1} |n\rangle , \quad \eta^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle ,$$

otteniamo che

$$\langle 1|x^2|1\rangle = \frac{3}{2} A^2 , \quad \langle 1|x^2|2\rangle = 0 = \langle 2|x^2|1\rangle , \quad \langle 2|x^2|2\rangle = \frac{1}{2} A^2 .$$

Reinserendo il fattore $\alpha/2$, abbiamo quindi

$$V = \varepsilon \frac{m\omega^2}{4} \frac{\hbar}{2m\omega} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \varepsilon \frac{\hbar\omega}{8} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

Quindi il livello energetico $E_1 = 2\hbar\omega$ si scinde – al primo ordine in perturbazione – in due livelli,

$$\begin{cases} \lambda_{1,1}^{(1)} = [2 + (3/8)\varepsilon] \hbar\omega \\ \lambda_{1,2}^{(1)} = [2 + (1/8)\varepsilon] \hbar\omega \end{cases} .$$

Notiamo che gli autovettori corrispondenti sono – nella base $\{\phi_1, \phi_2\}$ – semplicemente

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} ;$$

questo corrisponde ad avere una Hamiltoniana perturbata che è ancora separabile, cosicché le autofunzioni saranno sempre anch'esse in forma separabile.

Esercizio. Confrontare il risultato di questo calcolo perturbativo con la soluzione esatta per l'oscillatore armonico due-dimensionale anisotropo, sia per quanto riguarda i livelli energetici che per quanto riguarda le autofunzioni.

Esercizio. Effettuare lo stesso calcolo per quanto riguarda il livello (imperturbato) $E_2 = 3\hbar\omega$.

Osservazione. Nel calcolo precedente, abbiamo ottenuto che le autofunzioni scelte inizialmente come base (e che rappresentano una scelta naturale) per il problema imperturbato sono anche autofunzioni per il problema perturbato. E' bene sottolineare che se consideriamo perturbazioni che dipendono solo da x , avremo *sempre* una situazione simile. Ad esempio, scegliendo

$$H_1 = \beta \frac{x^4}{4},$$

e con la stessa base $\{\phi_1, \phi_2\}$, abbiamo

$$V = \frac{\beta}{4} A^4 \begin{pmatrix} 15 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Osservazione. Naturalmente possiamo anche combinare le due perturbazioni fin qui considerate¹³: se consideriamo

$$H_1 = \alpha \frac{x^2}{2} + \beta \frac{x^4}{4},$$

scrivendo nel seguito per semplicità'

$$\mu = \frac{\alpha}{2} A^2, \quad \nu = \frac{\beta}{4} A^4, \quad A = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}},$$

la matrice V sarà data dalla *somma* delle matrici ottenute in precedenza:

$$V = \begin{pmatrix} 3\mu + 15\nu & 0 \\ 0 & \mu + 3\nu \end{pmatrix}.$$

A.2 Perturbazione non separabile

Consideriamo ora un caso in cui la stessa Hamiltoniana H_0 è perturbata da un termine H_1 ancora quadratico, ma non separabile, ad esempio

$$H_1 = \alpha x y.$$

¹³L'essenza della teoria delle perturbazioni sta proprio nel linearizzare il problema, ed un problema lineare ammette un principio di sovrapposizione!

Ora scriveremo

$$x = -i A (\eta_x^+ - \eta_x) , \quad y = -i A (\eta_y^+ - \eta_y) ; \quad A = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} .$$

Ricordando che $[x, y] = 0$ e che gli operatori η, η^+ corrispondenti a gradi di libertà diversi commutano tra loro, abbiamo semplicemente

$$x y = -A^2 (\eta_x^+ \eta_y^+ - \eta_x^+ \eta_y - \eta_x \eta_y^+ + \eta_x \eta_y) .$$

Procedendo come sopra, otteniamo facilmente

$$\langle 1|xy|1 \rangle = \langle 2|xy|2 \rangle = 0 , \quad \langle 1|xy|2 \rangle = \langle 2|xy|1 \rangle = A^2 ,$$

e quindi¹⁴

$$V = \alpha A \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \varepsilon \hbar \omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

I livelli energetici perturbati sono quindi

$$\lambda_{\pm} = (1 \pm \varepsilon) \hbar \omega .$$

Quanto alle autofunzioni (cioè, lavorando nella base ϕ_k , gli autovettori \mathbf{a}), abbiamo evidentemente – a meno del fattore di normalizzazione –

$$\mathbf{a}_{\pm} = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} ,$$

e quindi le autofunzioni che diagonalizzano (nell'autospazio degenere) la Hamiltoniana perturbata sono

$$\tilde{\phi}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 \pm \phi_2) .$$

Queste si possono anche scrivere come

$$\tilde{\phi}_{\pm}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) \psi_0(y) \pm \psi_0(x) \psi_1(y)) .$$

Esercizio. Verificare, usando l'espressione esplicita delle $\tilde{\phi}_{\pm}$, che queste diagonalizzano l'Hamiltoniana $H_0 + H_1$ (nell'autospazio degenere), e spiegare il senso della precisazione data tra parentesi.

B Esempio di calcolo perturbativo per il caso quasi degenere

sezione da aggiungere riportando il calcolo effettuato a lezione

¹⁴Stiamo qui usando $\alpha A = \varepsilon m \omega^2 (\hbar / (2m\omega)) = \varepsilon \hbar \omega$.

Bibliografia

La dispensa è basata sul capitolo VI del testo di Landau-Lifshitz e sul capitolo VII del testo di Davydov (ambedue disponibili in Italiano, oltre che in numerose altre lingue); gli studenti possono consultare innanzitutto questi per approfondimenti. Ove ciò non fosse sufficiente (ad esempio per una dimostrazione completa del *Teorema Adiabatico* in ambito quantistico) si può consultare il Messiah.

La teoria delle perturbazioni è naturalmente trattata anche da Dirac, e come al solito una introduzione molto leggibile è fornita da Picasso.

Lo studente che non abbia esperienza con la teoria delle perturbazioni in ambito classico può consultare il testo di Verhulst per il caso di sistemi dinamici generali, e quello di Arnold per il caso Hamiltoniano.

- L.D. Landau & E.M. Lifshitz, *Meccanica Quantistica*, Editori Riuniti
- A.S. Davydov, *Meccanica Quantistica*, MIR
- A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Dover
- P.A.M. Dirac, *I principi fisici della teoria dei quanti*, Boringhieri
- L.E. Picasso, *Lezioni di Meccanica QUantistica*, ETS
- F. Verhulst, *Nonlinear differential equations and dynamical systems*, Springer
- V.I. Arnold, *Metodi matematici della meccanica classica*, Editori Riuniti