

Teoria delle Perturbazioni (aspetti elementari)

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

31 Ottobre 2020

Questa breve dispensa discute gli aspetti più elementari della *teoria delle perturbazioni* in Meccanica Quantistica, per il caso in cui l'operatore imperturbato ammette spettro puramente discreto. In particolare, consideriamo qui solo i calcoli *al primo ordine* e ci limitiamo al caso in cui l'operatore imperturbato è *non degenere*. Ambedue queste limitazioni possono essere facilmente rimosse, come discuteremo nella dispensa seguente.

1 Quadro generale

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

$$H = H_0 + \varepsilon H_1$$

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.¹

Esercizio. Lo studente che ha già incontrato aspetti perturbativi in Meccanica Classica è invitato a rivedere quanto studiato a suo tempo, in particolare riguardo al concetto di “piccola” perturbazione, e discutere perché la nozione usata in quel contesto non è adeguata nel quadro della Meccanica Quantistica.

2 Sviluppo in serie

Procediamo a cercare le soluzioni del problema di Schroedinger

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

¹Naturalmente vogliamo che H sia anch'esso un operatore autoaggiunto; dato che H_0 lo è per ipotesi, stiamo considerando perturbazioni costituite da operatori H_1 autoaggiunti.

come una perturbazione delle soluzioni del problema imperturbato. Scriviamo dunque

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

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

Supponiamo inoltre per semplicità che H_0 sia *non degenera*.²

Introducendo queste scritte nella (1) otteniamo una equazioni tra due serie, che devono quindi essere uguali termine a termine.³

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

$$H_0 \psi_n = \lambda_n \psi_n, \quad (4)$$

che è verificata per ipotesi.⁴

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

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

Ora però ricordiamo che H_0 è per ipotesi 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

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

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

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

²Come noto, questa condizione è generica nel caso uno-dimensionale, ma è immediatamente violata quando consideriamo un caso in dimensione più alta con simmetria rotazionale. Quindi sappiamo già che ad esempio nello studio degli spettri atomici dovremo necessariamente trattare con problemi degeneri.

³Va sottolineato che qui ε può essere considerato come un semplice parametro di “book-keeping”, cioè serve a identificare rapidamente l’ordine dei vari termini. Infatti, l’operatore H_1 da una parte conterrà delle costanti (e dunque la ε potrebbe essere inglobata in queste), e dall’altra sarà in generale (una funzione delle (p, q) e quindi) illimitato. In effetti, in molte trattazioni della teoria delle perturbazioni in Meccanica Quantistica, il parametro ε è semplicemente assente.

⁴Avremmo potuto iniziare da termini μ_0 e ϕ_0 generici, per trovare ad ordine zero $H_0 \phi_0 = \mu_0 \phi_0$, e quindi comprendere che essi devono necessariamente coincidere con λ_n e ψ_n ; ho preferito evitare questa giravolta inutile.

Consideriamo ora il prodotto scalare di ψ_m (per m qualsiasi ma fissato) con i due membri dell'equazione. Grazie a $(\psi_m, \psi_k) = \delta_{mk}$ otteniamo

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

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 lineare⁵ – e non solo perché ψ ed $\alpha\psi$ rappresentano lo stesso stato fisico) 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

$$c_{nn}^{(1)} = 0 ;$$

più in generale, anche proseguendo la discussione ad ordini successivi si avrebbe sempre

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

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

$$\mu_n^{(1)} = (\psi_n, H_1 \psi_n) = \langle n | H_1 | n \rangle . \quad (9)$$

Abbiamo così determinato il contributo del primo ordine agli autovalori:

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

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

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

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

Notiamo che qui abbiamo usato l'ipotesi di non degenerazione, cioè $\lambda_m \neq \lambda_n$ per $m \neq n$ (e nell'ultimo passaggio $H_1^+ = H_1$).

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

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

⁵In effetti quello che stiamo ricordando non è altro che la *alternativa di Fredholm*, presumibilmente ben nota dai corsi di Analisi.

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

Il risultato della nostra discussione (al primo ordine) è riassunto nelle due formule

$$\mu_n^{(1)} = \langle n | H_1 | n \rangle , \quad (13)$$

$$c_{nm}^{(1)} = \frac{\langle m | H_1 | n \rangle}{\lambda_n - \lambda_m} . \quad (14)$$

3 Condizione di validità

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

$$\varepsilon \frac{(\psi_m, H_1 \psi_n)}{\lambda_n - \lambda_m} \ll 1 ; \quad (15)$$

notiamo che in questa notazione possiamo pensare di avere $c_{nm}^{(0)} = \delta_{nm}$.

Allo stesso modo, per quanto riguarda gli autovalori, è necessario che la correzione risulti piccola; e questo non solo rispetto al valore dell'autovalore imperturbato λ_n ,

$$|\varepsilon| |\langle \psi_n | H_1 | \psi_n \rangle| \ll \lambda_n , \quad (16)$$

ma anche rispetto alla separazione dagli autovalori vicini,

$$|\varepsilon| |\langle \psi_n | H_1 | \psi_n \rangle| \ll |\lambda_n - \lambda_{n\pm 1}| . \quad (17)$$

Come già sottolineato, questo approccio è valido nel caso di osservabili non degeneri; per una osservabile degenera (e più specificamente per le perturbazioni ai livelli degeneri) si avrebbe uno zero al denominatore nella (15), e una condizione del tipo $|\varepsilon| \ll 0$ nella (17).

Nel caso degenera è necessario procedere in modo simile ma non identico a quanto visto qui; non faremo qui questa discussione, rimandandola alla dispensa successiva.

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 (15), (17) discusse poco sopra (per assicurare la validità dell'approccio perturbativo) sono verificate.

A Appendice:

Esempio dettagliato di calcolo perturbativo

Consideriamo come problema imperturbato una particella vincolata a muoversi sul segmento $[-L, L]$, e come perturbazione un potenziale di tipo delta in zero,

$$H_1 = V_1(x) = -A \delta(x) .$$

A.1 Problema imperturbato

Trattandosi di un potenziale pari, il teorema di parità ci assicura che le autofunzioni saranno tutte di parità definita. In particolare, avremo autofunzioni pari

$$\psi_q^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cos \left[\left(q + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{L} x \right] ; \quad \lambda_q^{(+)} = \left(q + \frac{1}{2} \right)^2 \left(\frac{4\pi^2 \hbar^2}{8m L^2} \right) \quad (q = 0, 1, 2, \dots) ;$$

ed autofunzioni dispari

$$\psi_q^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin \left[q \frac{\pi}{L} x \right] ; \quad \lambda_q^{(-)} = q^2 \left(\frac{4\pi^2 \hbar^2}{8m L^2} \right) \quad (q = 1, 2, \dots) .$$

E' conveniente unificare le due serie, scrivendo

$$E_k = \left(\frac{k+1}{2} \right)^2 \left(\frac{4\pi^2 \hbar^2}{8m L^2} \right) \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

e con

$$\psi_k = \begin{cases} \psi_m^{(+)} & \text{se } k = 2m \\ \psi_m^{(-)} & \text{se } k = 2m - 1 \end{cases}$$

A.2 Calcolo perturbativo

Ora, secondo le nostre formule generali e limitandosi alle correzioni al primo ordine, gli autovalori del problema imperturbato saranno

$$\widehat{E}_k = E_k + \langle k | H_1 | k \rangle = E_k - A |\psi_k(0)|^2 = \begin{cases} E_k - A/L & \text{per } k \text{ pari} \\ E_k & \text{per } k \text{ dispari.} \end{cases}$$

Quanto alle autofunzioni, avremo

$$\widehat{\psi}_k = \psi_k + \sum c_{km}^{(1)} \psi_m$$

dove i coefficienti sono dati da

$$c_{km}^{(1)} = \frac{\langle m | H_1 | k \rangle}{E_k - E_m} = \begin{cases} -\frac{A/L}{E_k - E_m} & \text{se sia } k \text{ che } m \text{ sono pari} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Notiamo che in particolare per $k = 0$ (stato fondamentale) il livello energetico imperturbato è

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8 m L^2} ;$$

la correzione a questo (al primo ordine) è

$$E_0^{(1)} = -\frac{A}{L} ,$$

e quindi una condizione necessaria per la validità dell'approccio perturbativo è che sia

$$A \ll \frac{\pi^2 \hbar^2}{8 m L} .$$

In effetti, potremmo esprimere i nostri risultati successivi in termini del piccolo parametro

$$\varepsilon := \frac{8 m L A}{\pi^2 \hbar^2} \ll 1 .$$

Quanto alla correzione della autofunzione, osservando che

$$E_m - E_k = [(m+1)^2 - 1] \gamma = m(m-1) \gamma \quad \left(\gamma := \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m L^2} \right)$$

abbiamo immediatamente

$$\widehat{\psi}_0(x) = \psi_0(x) + \frac{8 m L^2}{\pi^2 \hbar^2} \frac{A}{L} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s(s+1)} \psi_s(x) .$$

Questa si può anche scrivere come

$$\widehat{\psi}_0(x) = \psi_0(x) + \varepsilon \left[\sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s(s+1)} \psi_s(x) \right] .$$

Notiamo che le nuove autofunzioni sono ancora normalizzate al primo ordine in teoria delle perturbazioni (i termini di ordine ε sono ortogonali al termine ψ_0). Se volessimo considerare la norma di $\widehat{\psi}_0$ dato qui sopra⁶ al secondo ordine in ε , otterremmo

$$\|\widehat{\psi}_0\|^2 = 1 + \varepsilon^2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{[s(s+1)]^2} = 1 + \varepsilon^2 \left[\frac{4\pi^2 - 39}{12} \right] .$$

⁶Sottolineiamo comunque che per calcolare la norma dell'autofunzione perturbata al secondo ordine in ε sarebbe necessario considerare anche le sue correzioni di ordine ε^2 !

A.3 Soluzione esatta

Il nostro semplice problema puo' anche essere risolto esattamente.

Osserviamo innanzi tutto che il potenziale perturbato è ancora *pari*, e quindi resta vero che le autofunzioni sono o pari o dispari, ed anzi alternativamente pari o dispari.

Quindi le funzioni pari possono essere determinate a partire dalla loro espressione in $x = (0, L]$ come

$$\psi^{(+)}(-x) = \psi^{(+)}(x) ,$$

mentre quelle dispari come

$$\psi^{(-)}(-x) = -\psi^{(-)}(x) .$$

Inoltre ogni autofunzione risolve in $x \in (0, L]$ – ed anche in $x \in [-L, 0]$ – il problema

$$\psi_{xx} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi ;$$

come sappiamo questo ha soluzioni (con $E > 0^7$) date da

$$\psi_k(x) = a_k \cos(\omega_k x) + b_k \sin(\omega_k x) ,$$

dove abbiamo definito

$$\omega_k = \frac{\sqrt{2mE_k}}{\hbar} .$$

Naturalmente la derivata della funzione d'onda ψ_k in $(0, L]$ è data da

$$(\psi_k)_x = b_k \omega_k \cos(\omega_k x) - a_k \omega_k \sin(\omega_k x) .$$

Le condizioni di raccordo in $x = 0$ (da intendersi nel senso del limite per $\varepsilon \rightarrow 0$ restando positivo) sono

$$\psi(\varepsilon) = \psi(-\varepsilon) , \quad \psi_x(\varepsilon) = \psi_x(-\varepsilon) - A\psi(0) .$$

E' a questo punto più comodo discutere separatamente il caso di k pari e quello di k dispari (sostanzialmente per avere una notazione più leggera, senza doppi segni che distinguano i due casi). Ovviamente se la funzione è pari (dispari) allora la sua derivata è dispari (pari).

A.3.1 Stati dispari

Per gli stati dispari – il che vuol dire sia k dispari che autofunzione dispari rispetto all'inversione spaziale – abbiamo

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \psi_k^{(+)}(x) & \text{per } x \in [0, L] \\ \psi_k^{(-)}(x) = -\psi_k^{(+)}(-x) & \text{per } x \in [-L, 0] \end{cases}$$

⁷Lo studente è invitato a discutere perché abbiamo fatto questa assunzione, e se – o quanto – essa è giustificata.

Vista la forma generale delle ψ_k , abbiamo immediatamente

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \psi_k^{(+)}(x) = a_k \cos(\omega_k x) + b_k \sin(\omega_k x) & \text{per } x \in [0, L] , \\ \psi_k^{(-)}(x) = -a_k \cos(\omega_k x) + b_k \sin(\omega_k x) & \text{per } x \in [-L, 0] ; \end{cases}$$

$$\psi_k'(x) = \begin{cases} (\psi_k^{(+)}(x))_x = b_k \omega_k \cos(\omega_k x) - a_k \omega_k \sin(\omega_k x) & \text{per } x \in [0, L] , \\ (\psi_k^{(-)}(x))_x = b_k \omega_k \cos(\omega_k x) + a_k \omega_k \sin(\omega_k x) & \text{per } x \in [-L, 0] . \end{cases}$$

Le condizioni di raccordo, che ora si scrivono come

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)}(0) &= \psi_k^{(-)}(0) \\ (\psi_k^{(+)}(0))_x &= (\psi_k^{(-)}(0))_x - A \psi_k(0) , \end{aligned}$$

forniscono immediatamente

$$a_k = 0$$

la prima, con naturalmente $\psi_k(0) = 0$ (come ovvio, trattandosi di funzioni dispari); e quindi la seconda si riduce all'identità $b_k = b_k$, senza nessun salto. In altre parole, le funzioni *dispari* si scrivono semplicemente come

$$\psi_k = a_k \sin(\omega_k x) ;$$

la frequenza ω_k deve essere tale da avere $\sin(\omega_k L) = 0$, e quindi come nel caso imperturbato $\omega_k = k(\pi/L)$, ed infine

$$E_k = \frac{\hbar^2 \omega_k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} k^2 .$$

In altre parole, il calcolo esatto conferma il risultato del calcolo perturbativo: gli autovalori dispari e le corrispondenti autofunzioni non sono modificati dalla perturbazione.

A.3.2 Stati pari

Per gli stati pari – il che vuol dire sia k pari che autofunzione pari rispetto all'inversione spaziale – abbiamo

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \psi_k^{(+)}(x) & \text{per } x \in [0, L] \\ \psi_k^{(-)}(x) = \psi_k^{(+)}(-x) & \text{per } x \in [-L, 0] \end{cases}$$

Vista la forma generale delle ψ_k , abbiamo immediatamente

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \psi_k^{(+)}(x) = a_k \cos(\omega_k x) + b_k \sin(\omega_k x) & \text{per } x \in [0, L] , \\ \psi_k^{(-)}(x) = a_k \cos(\omega_k x) - b_k \sin(\omega_k x) & \text{per } x \in [-L, 0] ; \end{cases}$$

$$\psi_k'(x) = \begin{cases} (\psi_k^{(+)}(x))_x = -b_k \omega_k \cos(\omega_k x) - a_k \omega_k \sin(\omega_k x) & \text{per } x \in [0, L] , \\ (\psi_k^{(-)}(x))_x = b_k \omega_k \cos(\omega_k x) - a_k \omega_k \sin(\omega_k x) & \text{per } x \in [-L, 0] . \end{cases}$$

Le condizioni di raccordo, che si scrivono ancora come

$$\begin{aligned}\psi_k^{(+)}(0) &= \psi_k^{(-)}(0) \\ (\psi_k^{(+)})_x(0) &= (\psi_k^{(-)})_x(0) - A \psi_k(0),\end{aligned}$$

forniscono immediatamente una banale identità $a_k = a_k$ la prima (con $\psi_k(0) = a_k$), e la seconda la condizione

$$-b_k \omega_k = b_k \omega_k - A a_k.$$

Naturalmente questa ci da'

$$b_k = \frac{1}{2} \frac{A}{\omega_k} a_k.$$

In altre parole le soluzioni pari sono identificate da

$$\psi_k^{(+)}(x) = a_k \left[\cos(\omega_k x) + \frac{A}{2\omega_k} \sin(\omega_k x) \right].$$

Dobbiamo ancora determinare la costante di normalizzazione a_k e soprattutto richiedere che $\psi_k^{(+)}(L) = 0$; questa condizione fornisce

$$\cos(\omega_k L) + \frac{A}{2\omega_k} \sin(\omega_k L) = 0$$

ossia l'equazione (trascendente)

$$\tan(\omega_k L) = -\frac{A}{2\omega_k} = -\frac{AL}{2\omega_k L}.$$

Questa si riscrive come

$$\tan(\xi) = -\frac{AL}{2\xi},$$

ed ha soluzioni per $\xi = \omega_k L$ vicino ai multipli di π , quindi per

$$\omega_k \approx n \frac{\pi}{L} - \delta_n.$$

Scrivendo $\xi_k = k\pi - \eta_k$, abbiamo

$$\tan(\xi_k) \simeq -\eta_k, \quad \frac{AL}{2\xi_k} \simeq -\frac{AL}{2k\pi} - \frac{AL}{2(k\pi)^2} \eta_k$$

e quindi (ricordando che AL è piccolo) la radice dell'equazione si trova in

$$\eta_k \simeq \frac{AL}{2k\pi}.$$

B Un altro calcolo esplicito

Consideriamo ora, con minore dettaglio (cioè lasciando allo studente di effettuare alcuni calcoli) un altro problema perturbativo che coinvolge la funzione delta di Dirac.

Consideriamo ora, con A e $B \ll A$ costanti positive,

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - A\delta(x); \quad H_1 = -B[\delta(x+\xi) + \delta(x-\xi)].$$

B.1 Problema imperturbato

E' noto che il problema imperturbato ammette *un solo* stato legato (ovviamente con energia $E < 0$),

$$\psi_0(x) = \begin{cases} \alpha e^{\beta x} & \text{per } x < 0 \\ \alpha e^{-\beta x} & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

La costante α è un fattore di normalizzazione; scegliendo

$$\alpha = \sqrt{\beta}$$

la funzione risulta di norma unitaria. L'esponente β è invece come al solito

$$\beta = \frac{\sqrt{2m|E_0|}}{\hbar};$$

le condizioni di raccordo in $x = 0$ sono soddisfatte se e solo se $\beta = A/2$, e quindi

$$|E_0| = \frac{A^2 \hbar^2}{8m}.$$

B.2 Problema perturbato. Soluzione esatta

La soluzione esatta del problema perturbato richiede di considerare quattro intervalli:

$$I_1 = (-\infty, -\xi), \quad I_2 = (-\xi, 0), \quad I_3 = (0, \xi), \quad I_4 = (\xi, +\infty).$$

In ognuno di questi intervalli la funzione d'onda è del tipo

$$\psi_i = a_i e^{\beta x} + b_i e^{-\beta x};$$

ovviamente $b_1 = a_4 = 0$, la condizione di parità (il potenziale perturbato è anch'esso pari) assicura che

$$b_2 = a_3, \quad b_3 = a_2, \quad b_4 = a_1;$$

e le condizioni di raccordo in $x = \pm\xi$ forniscono

$$a_1 = a_2 + a_3 e^{2\beta\xi}.$$

La condizione di raccordo sulle derivate in $x = 0$ (quella sulle funzioni è triviale) fornisce ora una equazione trascendente

$$\exp[-2\beta\xi] = \frac{(A - 2\beta)(B - 2\beta)}{B(A + 2\beta)}.$$

Ponendo $\beta = A/2 + \gamma$, $B = A\lambda$ (con γ e λ piccoli) otteniamo

$$\gamma = A e^{-A\xi} \lambda.$$

Quindi abbiamo

$$\begin{aligned} \beta &\simeq \frac{A}{2} + A e^{-A\xi}, \\ |\widehat{E}_0| &\simeq \frac{\beta^2 \hbar^2}{2m} = \frac{A^2 \hbar^2}{8m} + \frac{A^2 \hbar^2}{2m} e^{-A\xi} \lambda. \end{aligned}$$

B.3 Problema perturbato. Soluzione perturbativa

Per calcolare la correzione ad E_0 in termini di teoria delle perturbazioni, dobbiamo semplicemente calcolare

$$\begin{aligned} \delta E_0 &= \langle 0 | H_1 | 0 \rangle \\ &= -B \int \psi_0^*(x) \psi(x) (\delta(x + \xi) + \delta(x - \xi)) dx \\ &= -B (|\psi_0(-\xi)|^2 + |\psi_0(\xi)|^2) \\ &= -(2A\lambda) |\psi_0(\xi)|^2 \\ &= -(2A\lambda) e^{-A\xi}. \end{aligned}$$

Esercizio. Confrontare questo risultato con quello ottenuto in precedenza. Quale pensate sia più affidabile? Eventualmente, provare a risolvere il problema numericamente, ad esempio con $B/A = 0.01$.

Esercizio. Cosa possiamo dire, nel quadro della teoria delle perturbazioni sviluppata nella prima parte di questa dispensa, riguardo alla autofunzione $\widehat{\psi}_0(x)$ del problema perturbato?

C Perturbazioni dell'oscillatore armonico

Come ben noto, ogni potenziale classico $V(x)$ si approssima intorno ad un suo punto di equilibrio x_0 come

$$V(x) \approx V(x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0) x^2 + \dots ;$$

è dunque naturale considerare perturbazioni dell'oscillatore armonico (in una o più dimensioni).

D Alcune formule utili per perturbare l'oscillatore armonico

Nel calcolare perturbazioni all'oscillatore armonico risulta particolarmente utile la notazione in termini di operatori di innalzamento ed abbassamento. Ricordiamo che questi sono definiti come

$$\begin{aligned} \eta^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (p + im\omega q) , \\ \eta &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (p - im\omega q) ; \end{aligned}$$

da queste si ottiene immediatamente che

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\eta^\dagger + \eta) , \\ q &= -i \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\eta^\dagger - \eta) . \end{aligned}$$

Ricordiamo inoltre che gli autovalori per l'oscillatore armonico di Hamiltoniana

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{\kappa}{2} x^2 , \quad \omega = \sqrt{\kappa/m} ,$$

sono

$$\lambda_k = \left(k + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

e che gli stati eccitati $|k\rangle$ si ottengono a partire dallo stato fondamentale $|0\rangle$ applicando ripetutamente l'operatore η^\dagger ; più precisamente,

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\eta^\dagger)^n |0\rangle .$$

Segue da questa e dalle proprietà delle η, η^\dagger che

$$\eta |n+1\rangle = \sqrt{n+1} |n\rangle , \quad \eta^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle . \quad (18)$$

D.1 Un esempio di calcolo perturbativo

Consideriamo un oscillatore armonico di Hamiltoniana

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 ; \quad (19)$$

ed una Hamiltoniana perturbata

$$H = H_0 + H_1$$

in cui la perturbazione – allo scopo sia di avere un calcolo semplice che di poter confrontare i risultati perturbativi con quelli esatti – è

$$H_1 = \alpha \frac{x^2}{2} ; \quad (20)$$

in questa formula supporremo

$$\alpha \ll m\omega^2 ,$$

ed anzi nel seguito porremo

$$\alpha := \varepsilon \frac{m\omega^2}{2} , \quad \varepsilon \ll 1 . \quad (21)$$

Notiamo che in questo modo la Hamiltoniana completa H diventa

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2}{2} x^2 ; \quad \omega_1 = \sqrt{1 + \varepsilon} \omega . \quad (22)$$

E' dunque possibile risolvere esattamente l'equazione di Schroedinger per H , con le consuete formule ricordate poco sopra (e naturalmente applicate ad ω_1 anziché ad ω).

Vogliamo però effettuare il calcolo in modo perturbativo. Possiamo senz'altro considerare la base completa $\{\psi_k , k = 0, 1, \dots\}$ delle autofunzioni (normalizzate) di H_0 , i cui corrispondenti autovalori sono – come ricordato poco sopra – $\lambda_k = (k + 1/2)\hbar\omega$.

Allora la nostra formula generale per la correzione (al primo ordine in ε) agli autovalori ci fornisce

$$\mu_n^{(1)} = \langle n | H_1 | n \rangle = \alpha \langle n | x^2 | n \rangle . \quad (23)$$

Usando la rappresentazione di x in termini degli operatori η ed η^\dagger abbiamo

$$x^2 = -\frac{\hbar}{2m\omega} (\eta^\dagger - \eta) (\eta^\dagger - \eta) = -\frac{\hbar}{2m\omega} (\eta^\dagger \eta^\dagger - \eta^\dagger \eta - \eta \eta^\dagger + \eta \eta) . \quad (24)$$

Il valor medio su uno stato di una somma di operatori è pari alla somma dei valori medi dei diversi operatori, quindi possiamo calcolare questi quattro valori medi di operatori elementari.

E' però evidente dalle proprietà delle η ed η^\dagger , cioè dal loro essere operatori di abbassamento ed innalzamento, che nel calcolare il valor medio di x^2 sullo stato $|n\rangle$ solo i termini contenenti tante η quante η^\dagger contribuiranno. Quindi ci è sufficiente calcolare i valori medi dei termini $\eta^\dagger\eta$ ed $\eta\eta^\dagger$.

Risulta immediatamente dalle (18) che

$$\begin{aligned}\langle n|\eta^\dagger\eta|n\rangle &= n \langle n|n\rangle = n , \\ \langle n|\eta\eta^\dagger|n\rangle &= (n+1) \langle n|n\rangle = n+1 .\end{aligned}$$

Quindi

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) ; \quad (25)$$

ed infine

$$\langle n|H_1|n\rangle = \alpha \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) = \varepsilon \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) = \varepsilon \frac{\hbar\omega}{4} (2n+1) . \quad (26)$$

I livelli energetici sono dunque (al primo ordine in ε)

$$\begin{aligned}E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + \varepsilon \frac{\hbar\omega}{4} (2n+1) \\ &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\right) \hbar\omega .\end{aligned} \quad (27)$$

Esercizio. Verificare la relazione tra questa formula e (lo sviluppo al primo ordine in ε del)la formula esatta in termini di ω_1 definita poco sopra, (22).

Bibliografia

Il materiale di questa dispensa è assolutamente standard. Lo studente può consultare per approfondimenti qualsiasi testo di Meccanica Quantistica, tra cui i “soliti” testi di Landau-Lifshitz, Dirac, Picasso, e Messiah.

- L.E. Picasso, *Lezioni sui Fondamenti della Meccanica Quantistica*; ETS 2017
- L.E. Picasso, *Lezioni di Meccanica Quantistica*; ETS 2015
- L.D. Landau and I.M. Lifshits, *Meccanica Quantistica*, Editori Riuniti
- P.A.M. Dirac, *I principi della Meccanica Quantistica*, Boringhieri
- A. Messiah *Quantum Mechanics*, Dover

G. Gaeta -- 31 Ottobre 2020