



Appunti di Meccanica Quantistica

Alcune nozioni fondamentali

Luca Morelli

Copyright © 2013 John Smith

PUBLISHED BY PUBLISHER

BOOK-WEBSITE.COM

Licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial 3.0 Unported License (the “License”). You may not use this file except in compliance with the License. You may obtain a copy of the License at <http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>. Unless required by applicable law or agreed to in writing, software distributed under the License is distributed on an “AS IS” BASIS, WITHOUT WARRANTIES OR CONDITIONS OF ANY KIND, either express or implied. See the License for the specific language governing permissions and limitations under the License.

First printing, March 2013

Indice

1	Principi della Meccanica Quantistica	5
1.1	Sistemi Quantomeccanici	5
1.1.1	Polarizzazione di fotoni	5
1.1.2	Interferenza di un fotone	7
1.1.3	Principio di Sovrapposizione	8
1.2	Osservabili di un sistema	9
1.2.1	Osservabili e operatori lineari	9
1.2.2	Operatori autoaggiunti	9
1.2.3	La funzione d'onda quantistica	10
1.2.4	Basi ortonormali	11
2	Sistemi a due stati	13
2.1	Fondamenti fisici e matematici dei sistemi a due stati	13
2.1.1	Formalismo di Pauli	13
2.1.2	Problema agli autovalori	14
2.1.3	Basi ortonormali per rappresentare operatori	15
2.1.4	Matrici di Pauli	15
2.1.5	Esponenziale di Pauli	16
2.1.6	Rotazioni degli autospazi	17
2.2	Modellizzare un sistema a due livelli	19
2.2.1	Hamiltoniano a due livelli	19
2.2.2	Perturbazioni di un sistema a due livelli	20
3	Teoria delle perturbazioni	23
3.1	Perturbazioni indipendenti dal tempo	23
3.1.1	Calcolo degli stati perturbati	25

3.1.2	Sistemi perturbati non degeneri	27
	Bibliografia	29
	Libri	29
	Articoli	29
	Indice	31

1. Principi della Meccanica Quantistica

1.1 Sistemi Quantomeccanici

Gli studi dei modelli atomici, portati avanti nei primi decenni del novecento, mostrarono l'inadeguatezza della meccanica classica nella descrizione di tutti i fenomeni che avvengono alle scale atomiche. Inoltre già in precedenza alcuni fenomeni di carattere elettromagnetico erano già stati spiegati teoricamente introducendo alcune ipotesi in contrasto con la descrizione dell'elettromagnetismo di Maxwell. Nella fattispecie Einstein mostrò che l'effetto *fotoelettrico* è spiegabile teoricamente supponendo che la luce sia formata da pacchetti discreti ognuno di energia fissata e dipendente dalla frequenza dell'onda luminosa a cui appartengono secondo la relazione:

$$E = h\nu \quad h = \text{costante di Plank.} \quad (1.1)$$

Questi pacchetti discreti o quanti di luce furono in seguito chiamati *fotoni* e non vi è modo di dedurre teoricamente l'ipotesi della loro esistenza dalla teoria di Maxwell. È possibile conciliare questa interpretazione con l'elettromagnetismo classico supponendo che la natura indipendente dalla frequenza dell'energia di un'onda elettromagnetica sia dovuta al fatto che: dati due fasci di luce monocromatica di eguale frequenza ma con intensità differenti il numero di fotoni che compone ogni fascio è differente ed è direttamente proporzionale all'intensità. Questa ipotesi è sperimentalmente confermata dall'effetto fotoelettrico stesso nel quale si osserva una maggior numero di fotoelettroni emessi tanto maggiore è l'intensità del fascio di luce incidente sul metallo.

1.1.1 Polarizzazione di fotoni

Una volta constatata la necessità di formulare un nuovo formalismo capace di descrivere i sistemi in cui la meccanica classica fallisce è necessario capire quali caratteristiche deve possedere questo formalismo, per farlo si consideri un sistema di fotoni che compongono un fascio di luce.

Per procedere è necessario avere ben presente che quanto è fisicamente possibile descrivere di un sistema è tale solamente se è possibile misurare, direttamente o indirettamente, tale proprietà e siccome senza un teoria ben sviluppata a disposizione non è ricavare grandezze non misurabili direttamente da queste sarà necessario iniziare descrivendo solamente proprietà direttamente misurabili. In questo modo non ci si domanderà come descrivere la posizione o la velocità di un fotone

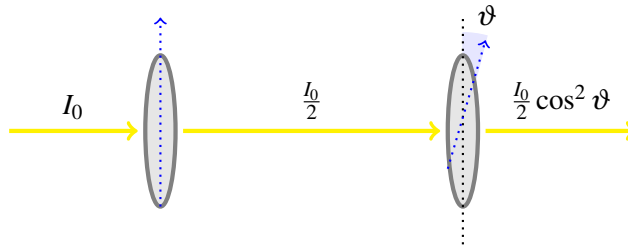
fin tanto non si introdurrà un sistema in grado di misurare queste.

Come si è già osservato nella discussione della relazione (1.1) l'intensità di un fascio di luce è strettamente legata a fenomeni quantistici poiché è legata alla quantità di fotoni del fascio stesso, per questo si considererà un apparato sperimentale che consente di interagire con questa grandezza. Gli studi ottocenteschi mostrarono che un fascio di luce cambia di intensità in seguito al passaggio attraverso alcuni filtri polarizzatori, questo secondo fatto suggerisce che può essere opportuno considerare la polarizzazione come una quantità intrinseca di ogni fotone.



Infatti, per quanto si è detto fin'ora, una diminuzione dell'intensità luminosa del fascio deve essere dovuta ad una diminuzione di fotoni nel fascio stesso, per cui l'interazione tra filtro e fascio è da intendersi in primo luogo come interazione tra filtro e singolo fotone che dovrà quindi essere caratterizzato anch'esso da una polarizzazione che ne determina il suo passaggio o il suo assorbimento dal filtro. Così facendo un fascio di luce polarizzato in una direzione sarà composto da soli fotoni polarizzati in tale direzione.

Si consideri ora un sistema di due filtri polarizzanti posti uno di seguito all'altro e tali da avere gli assi di polarizzazione reciprocamente inclinati di un angolo ϑ . Un fascio di luce non polarizzata passa attraverso il primo filtro e l'elettromagnetismo classico dice che in questo passaggio la sua intensità è dimezzata, successivamente giunge al secondo filtro un fascio polarizzato totalmente nella direzione del primo filtro, questo interagendo con il secondo diminuisce di intensità secondo la *legge di Malus* che da un'intensità finale pari a $(I_0 \cos^2 \vartheta)/2$, dove I_0 è l'intensità iniziale.



Studiando il sistema dal punto di vista di un fotone quello che avviene è che il primo filtro lascia passare solamente i fotoni polarizzati nella sua direzione così che il fascio che giunge al secondo filtro sia polarizzato linearmente in una direzione. Per quanto detto fino ad ora il secondo filtro non dovrebbe far passare alcun fotone poiché tutti hanno una polarizzazione differente da quella di questo filtro ma ne l'elettromagnetismo classico ne l'esperienza concordano con questa interpretazione.

Si consideri ora un fascio con intensità tale da far passare nel sistema di filtri un solo fotone alla volta¹: osservazioni sperimentali mostrarono che anche in questo caso la frazione di fotoni che passano attraverso ad entrambi i filtri non è nulla ma è proporzionale all'intensità prevista dalla legge di Malus. Inoltre i fotoni che hanno attraversato entrambi i filtri hanno una polarizzazione finale differente da quella che possedevano inizialmente e dopo il passaggio attraverso il primo filtro. Tutte queste osservazioni suggeriscono che non sia possibile interpretare in maniera deterministica questo

¹ Affinché sia soddisfatta questa condizione l'intensità del fascio deve essere dell'ordine di grandezza dell'energia di un solo fotone.

fenomeno ma è concesso solamente avere risultati teorici di natura probabilistica; l'interazione tra fotone e filtro modifica stocasticamente lo stato del fotone.

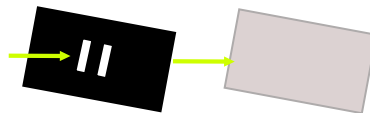
Così facendo inizialmente il fotone non ha una polarizzazione ben definita e interagendo con il primo filtro è forzato ad assumere una polarizzazione precisa, per le proprietà intrinseche dell'interazione, o quella del filtro o quella perpendicolare a questa. Siccome la polarizzazione iniziale non è definita è verosimile assumere che in media metà dei fotoni assumerà la polarizzazione del filtro, passandoci attraverso, e l'altra metà quella perpendicolare, venendo così assorbita. Questo approccio non spiega comunque l'interazione con il secondo filtro che può essere spiegata solamente dal *principio di sovrapposizione*. Questo principio afferma che lo stato di un sistema quantistico può essere dato dalla sovrapposizione di più stati che può assumere il sistema, in questo modo si ha:

- se $\vartheta = 0$ il fotone uscente dal primo filtro è polarizzato in maniera da attraversare il secondo,
- se $\vartheta = 90^\circ$ il fotone uscente nel primo filtro è polarizzato ortogonalmente all'asse del secondo filtro che quindi lo assorbe senza che esso possa passare,
- infine se $\vartheta \neq 0$ e $\vartheta \neq 90^\circ$ il fotone uscente dal primo filtro è in uno stato di sovrapposizione dei due stati precedenti e interagendo con il secondo filtro può stocasticamente essere assorbito o trasmesso con probabilità date dalla legge di Malus.

1.1.2 Interferenza di un fotone

Si studierà ora un secondo esperimento che consente di studiare come proprietà dello stato del fotone la sua posizione, è quindi necessario costruire un apparato che consenta di misurare tale grandezza, tale sistema è costituito da una lastra fotografica che in seguito all'impatto di un fotone su di essa si impressiona nel punto in cui esso ha impattato determinandone la posizione. Questo apparato costringe quindi i fotoni ad assumere uno stato di posizione ben definita se questa non lo fosse in precedenza.

L'ottica classica già aveva scoperto che, interpretando la luce come un'onda, se posto uno schermo con due fenditure piccole e vicine tra una sorgente monocromatica e la lastra fotosensibile, su quest'ultima si osserva un'immagine nota come pattern di interferenza.



Questo fatto, confermato sperimentalmente, è di difficile interpretazione con l'approccio di Einstein che considera la luce formata da fotoni. In prima istanza si potrebbe considerare che i vari fotoni passando attraverso una fenditura interferisca con quelli passanti per l'altra generando il pattern. In realtà però se si compie il medesimo esperimento facendo passare un solo fotone alla volta osservando la figura che si produce dopo aver fatto passare molti fotoni si osserva nuovamente il pattern, per cui in realtà il fenomeno osservato non è dato dall'interferenza tra fotoni ma è un fenomeno intrinseco del singolo fotone.

Il principio di sovrapposizione in questo caso consente di affermare che il fotone, dopo aver attraversato le due fenditure, è in una sovrapposizione di due stati: uno nel quale è passato attraverso una fenditura e uno nel quale è passato nell'altra. In questo modo sono questi due stati contemporaneamente esistenti che interferiscono tra di loro.

Questo esperimento mette in luce un altro aspetto fondamentale di questi fenomeni: infatti classicamente è la funzione d'onda del campo elettromagnetico che descrive il fascio di luce e il pattern di interferenza è descritto dall'intensità dell'onda che è proporzionale al modulo quadrato della funzione d'onda del fascio. Secondo l'interpretazione quantistica che si sta costruendo invece

il pattern di interferenza descrive le natura probabilistica del sistema, essendo questa data però dalla funzione d'onda del fascio è naturale porre questa come stato del sistema il cui modulo quadro stima la probabilità di misurare un fotone in un punto.

1.1.3 Principio di Sovrapposizione

Terminate le osservazioni di carattere sperimentale è necessario costruire un formalismo matematico che tenga conto di quanto precedentemente osservato.

Lo stato di un sistema, come si è visto, ha proprietà vettoriali, ossia può essere combinato linearmente con altri stati per ottenere ulteriori stati, questo di fatto già racchiude il principio di sovrapposizione.

Definizione 1.1.1 — Stato di un sistema. Lo stato di un sistema caratterizzato da grandezze $\alpha_1 \dots \alpha_n$ è rappresentato da un vettore $ket |\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle$.
L'insieme di questi stati forma uno spazio vettoriale.

È fondamentale osservare che la somma di due stati identici non genera un nuovo stato del sistema, infatti se la somma di due funzioni d'onda classiche varierebbero l'intensità del fascio di luce essendo questa legata solamente al numero di fotoni non variando lo stato del singolo fotone. Questo significa che eventuali fattori moltiplicativi di un singolo stato non influiscono su questo. La questione è differente se si considera la sovrapposizione di più stati $c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle$: in questo caso vale ancora che multipli dello stato risultante rappresentano il medesimo stato di partenza ma questo non vale se si cambiano i singoli valori di c_1 e c_2 . Lo stato risultante è quindi determinato dal rapporto c_1/c_2 : si osservi che però lo stato di un fotone non in generale è determinato da un solo parametro, infatti si è visto che lo stato di un fotone è descritto dalla sua funzione d'onda del campo elettromagnetico ma la combinazione di due di queste è in ogni istante determinata sia dal rapporto dei moduli delle loro ampiezze d'onda sia da un fattore di fase. Questa osservazione mostra che i fattori c_1 e c_2 debbano essere numeri complessi e non reali, così che il loro rapporto goda di due gradi di libertà. La polarizzazione di un fotone è un chiaro esempio fisico di questa necessità infatti polarizzazioni ellittiche sono determinate sia dal rapporto delle ampiezze delle funzioni d'onda scalari di due componenti ortogonali di campo elettrico o magnetico sia dalla loro differenza di fase.

Poiché le costanti delle combinazioni lineari di stati, come si è appena osservato, sono parte integrante della descrizione dello stato risultante da tale combinazione è naturale dotare di un prodotto scalare lo spazio vettoriale degli stati, in modo tale da poter interagire con queste costanti.

Definizione 1.1.2 — Prodotto scalare. Sia $\langle\alpha|\beta\rangle$ un'applicazione che associa a due vettori $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ un numero complesso. Si dirà tale applicazione prodotto scalare se:

- è lineare rispetto a $|\beta\rangle$ e antilineare rispetto a $|\alpha\rangle$,
- $\langle\alpha|\beta\rangle = \overline{\langle\beta|\alpha\rangle}$, dove con \bar{z} si intende il complesso coniugato di z ,
- $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$ per ogni $|\alpha\rangle$ a meno che $|\alpha\rangle = 0$ per cui $\langle\alpha|\alpha\rangle = 0$.

Il teorema di rappresentazione di Riesz consente, una volta definito un prodotto scalare e fissato un vettore $ket |\alpha\rangle$, di identificare univocamente un'applicazione lineare tale che $\varphi_\alpha(|\beta\rangle) = \langle\alpha|\beta\rangle$. Questa applicazione appartiene allo spazio duale dello spazio degli stati: in virtù di questo del fatto che il duale di uno spazio vettoriale è a sua volta uno spazio vettoriale si chiamano i duali degli stati vettori *bra* $\langle\alpha| = \varphi_\alpha$.

Il prodotto scalare così introdotto consente di calcolare la norma di uno stato così da operare l'operazione di *normalizzazione*, questa poiché, come si è osservato, lo stato del sistema è defi-

nito a meno di fattori moltiplicativi e in seguito si rivelerà utile fare uso di questi vettori normalizzati. Infine è importante definire, in analogia geometrica, cosa siano due vettore ortogonali.

Definizione 1.1.3 Si diranno $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ ortogonali se e solo se $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$.

Se ora si considerando due vettori normalizzati e ortogonali $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, la cui combinazione lineare da luogo allo stato $|\gamma\rangle$, si ha che $\langle\alpha|\gamma\rangle$ è proprio il coefficiente di $|\alpha\rangle$ nella combinazione lineare.

1.2 Osservabili di un sistema

1.2.1 Osservabili e operatori lineari

Ora che si è definito il formalismo con cui descrivere uno stato è necessario descrivere matematicamente come da tale stato sia possibile ottenere le quantità misurabili sperimentalmente, ossia gli osservabili. Inoltre si vuole poter definire questi osservabili in analogia con quelli classici e in maniera tale che si comportino similmente a questi.

Per poter capire come ottenere gli osservabili è necessario fare un'ipotesi generale ma anche di buon senso: come si è visto tramite prodotti scalari, ossia particolari operatori lineari, è possibile ottenere le informazioni determinanti sullo stato di sovrapposizione del sistema, ossia i coefficienti delle sovrapposizioni, è quindi sensato supporre che siano sempre altri operatori lineari, o più in generale combinazioni di questi, a permettere di ottenere gli osservabili caratteristici dello stato.

Si consideri l'esperimento di polarizzazione della luce, all'interazione tra filtro e fotone si associa un operatore \hat{Q} e allo stato del fotone il vettore $|\alpha\rangle$: si consideri in primo luogo il fotone polarizzato come il filtro, si osserva quindi che questi due interagiscono e il fotone finale è ancora nel suo stato iniziale, si può dire che $\hat{Q}|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$, viceversa se la polarizzazione del fotone è perpendicolare a quella del filtro si ha $\hat{Q}|\alpha\rangle = 0$ per indicare che il fotone è stato assorbito. Questa considerazione suggerisce che il valore dell'osservabile è rappresentato dagli autovalori dell'operatore: in questo caso le due relazioni descritte esprimono due autovalori 0 e 1, corrispondenti agli osservabili di polarizzazione rispettivamente coincidente e normale al filtro.

A ognuno di questi autovalori è associato uno o più autovettori (o autoket) \hat{Q} .

Considerando ora un fotone con polarizzazione qualsiasi si può considerare lo stato come un sovrapposizione degli stati di polarizzazione parallela e normale a quella del filtro, si indicheranno questi due fissando i valori di α pari agli autovalori di \hat{Q} , così che si abbia:

$$|\alpha\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle.$$

Se si applica a questo l'operatore \hat{Q} si ottiene:

$$\hat{Q}|\alpha\rangle = c_0\hat{Q}|0\rangle + c_1\hat{Q}|1\rangle = c_1|1\rangle,$$

che corrisponde a quanto osservato sperimentalmente: ossia che i fotoni, successivamente al passaggio attraverso il filtro, sono in uno stato di polarizzazione parallela al filtro.

1.2.2 Operatori autoaggiunti

In generale gli autovalori di un operatore, siccome si sta considerando uno spazio vettoriale su campo complesso come spazio degli stati, sono numeri complessi, se però questi devono rappresentare le possibili misure di un osservabile devono necessariamente essere numeri reali puri. Per questo motivo gli operatori di osservabili vengono sempre assunti essere autoaggiunti.

Per definire cosa significhi operatore autoaggiunto è necessario definire in primo luogo l'aggiunto di un operatore.

Definizione 1.2.1 — Aggiunto di un operatore. Sia \hat{A} un operatore lineare allora si dirà *aggiunto di \hat{A}* l'operatore \hat{A}^* tale che:

$$\langle \alpha | (\hat{A} | \beta \rangle) = (\hat{A}^* \langle \alpha |) | \beta \rangle. \quad (1.2)$$

L'esistenza di questo operatore è data dal teorema di rappresentazione di Riesz che garantisce che esista, fissato $|\alpha\rangle$, un unico operatore lineare tale che $\varphi_\alpha(|\beta\rangle) = \langle \alpha | (\hat{A} | \beta \rangle)$, in questo modo di \hat{A}^* è costruito come l'operatore che associa a $|\alpha\rangle$ l'operatore φ_α .

Definizione 1.2.2 — Operatore autoaggiunto. Sia \hat{A} un operatore lineare, se vale $\hat{A} = \hat{A}^*$ allora è detto autoaggiunto.

Notazione 1.1. Si indica il prodotto scalare $\langle \alpha | (\hat{A} | \beta \rangle)$ con $\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle$.

Direttamente dalla definizione di operatore autoaggiunto si hanno alcune proprietà importanti di questi operatori.

Proposizione 1.2.1 Sia \hat{A} un operatore lineare autoaggiunto, allora la quantità $\langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle \in \mathbb{R}$. Inoltre se $|\lambda\rangle$ è un suo autoket di autovalore λ si ha che $\lambda \in \mathbb{R}$. Infine se $|\xi\rangle$ è un altro autoket di autovalore $\xi \neq \lambda$ allora $\langle \xi | \lambda \rangle = 0$

Dimostrazione. Si osservi che essendo \hat{A} autoaggiunto vale $\forall |\lambda\rangle$:

$$\langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle = \overline{\langle \lambda | \hat{A}^* | \lambda \rangle} = \overline{\langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle},$$

questa relazione mostra che $\langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle$ è pari al suo coniugato complesso per cui deve essere reale. Se ora $|\lambda\rangle$ è un suo autoket di autovalore λ si ha:

$$\langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle = \langle \lambda | \lambda \rangle \lambda = \overline{\langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle} = \overline{\langle \lambda | \lambda \rangle} \bar{\lambda} = \langle \lambda | \lambda \rangle \bar{\lambda},$$

da questa si deduce che $\lambda = \bar{\lambda}$ che deve quindi essere reale.

Infine se $|\xi\rangle$ è un altro autoket di autovalore $\xi \neq \lambda$ e considerando $\langle \lambda | \hat{A} | \xi \rangle$ si ha:

$$\langle \lambda | \hat{A} | \xi \rangle = \langle \lambda | \xi \rangle \xi = \overline{\langle \xi | \hat{A} | \lambda \rangle} = \overline{\langle \xi | \lambda \rangle} \lambda = \langle \lambda | \hat{A} | \xi \rangle \lambda,$$

segue che

$$\langle \lambda | \hat{A} | \xi \rangle \lambda - \langle \lambda | \xi \rangle \xi = \langle \lambda | \xi \rangle (\lambda - \xi) = 0$$

ma poiché per ipotesi $\xi \neq \lambda$ allora necessariamente $\langle \lambda | \xi \rangle = 0$. ■

1.2.3 La funzione d'onda quantistica

Si consideri ora l'esperimento di interferenza della luce: inizialmente si fissi un punto x sulla lastra fotosensibile, l'osservabile desiderato è "il moto del fotone termina in x ?" e a questo si associ \hat{Q}_x con autoket $|1\rangle$, se il fotone termina in x , e $|0\rangle$ altrimenti. Lo stato di un fotone sarà quindi dato dalla sovrapposizione di tutti gli stati caratterizzati dal punto terminale della traiettoria: applicando \hat{Q}_x a questo stato si otterrà quindi solamente lo stato in cui il fotone termina il moto in x moltiplicato per il suo coefficiente che si chiamerà ψ . Facendo ora variare x su tutta la lastra si ottiene una funzione di autovalori $\psi(x)$, inoltre non si potrà più parlare di autoket $|1\rangle$ ma si parlerà di autoket $|x\rangle$.

Chiaramente $\psi(x)$ è una funzione caratteristica dello stato dei fotoni, per questo indicheremo

tale stato con $|\psi\rangle$; inoltre per costruzione, siccome questa funzione determina i coefficienti di sovrapposizione dello stato rispetto agli autoket $|x\rangle$ ed essendo tutti questi autoket ortogonali in quanto autoket di un operatore autoaggiunto, a patto di aver normalizzato tutti i $|x\rangle$, vale la seguente relazione:

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x). \quad (1.3)$$

È plausibile supporre che la funzione $\psi(x)$ stimi la probabilità di osservare il moto terminale del fotone in x : infatti, alla luce delle osservazioni sulla relazione tra intensità luminosa e quantità di fotoni già fatte nelle sezioni precedenti, il pattern di interferenza che emerge dalla sovrapposizione degli stati del un fotone è da interpretare come distribuzione di probabilità della posizione finale di questo. La sovrapposizione è infatti determinata per costruzione da $\psi(x)$. Questa funzione è però a valori complessi, siccome è data dai coefficienti di sovrapposizione che sono numeri complessi, e quindi per poter essere ricondotta ad una stima della probabilità deve essere ridotta ad una funzione a valori reali. Per far ciò si può supporre che tale probabilità sia stimata dal modulo quadro di $\psi(x)$. Inoltre è necessario che questa funzione sia normalizzata ad 1, il che può sempre essere fatto siccome ogni stato può, nel suo complesso, esser moltiplicato per uno scalare senza che questo modifichi lo stato fisico che descrive. In questo modo la probabilità di osservare un fotone in una regione dello schermo \mathcal{D} è data da

$$P(\mathcal{D}) = \int_{\mathcal{D}} |\langle x|\psi\rangle|^2 dx. \quad (1.4)$$

Analogamente, siccome si è identificata la distribuzione di probabilità della posizione del fotone con $|\langle x|\psi\rangle|^2$, è possibile calcolare i momenti di questa, ossia il valor medio della posizione e la sua deviazione standard:

$$\langle x \rangle = \int_{\mathcal{D}} x |\langle x|\psi\rangle|^2 dx, \quad (1.5)$$

$$\Delta x = \sqrt{\int_{\mathcal{D}} (x - \langle x \rangle)^2 |\langle x|\psi\rangle|^2 dx}. \quad (1.6)$$

In questi integrali x è da intendere come un vettore di \mathbb{R}^2 , ossia un punto del piano.

Infine si vuole esprimere $|\psi\rangle$ rispetto agli autoket $|x\rangle$, come si è detto questo è possibile tramite una sovrapposizione di questi, bisogna notare che però in questo caso gli autoket sono una quantità non numerabile, uno per ogni punto della lastra fotografica, per questo invece di un classica combinazione lineare è necessario utilizzare un'integrale:

$$|\psi\rangle = \int |x\rangle \psi(x) dx = \int |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx. \quad (1.7)$$

1.2.4 Basi ortonormali

2. Sistemi a due stati

2.1 Fondamenti fisici e matematici dei sistemi a due stati

Il modello del sistema a due stati è un approccio allo studio di un sistema estremamente utile: da un lato è di facile analisi e dall'altro è molto versatile.

Un sistema di questo tipo (come particelle con spin $\frac{1}{2}$ o un qubit) è caratterizzato dalla proprietà di poter assumere due soli stati differenti. Questa proprietà si traduce matematicamente nella richiesta di avere uno spazio degli stati a due dimensioni. Sulla base di questa sola richiesta si può costruire un formalismo operatoriale noto come *formalismo di Pauli*.

2.1.1 Formalismo di Pauli

Come si è detto inizialmente, lo spazio degli stati è uno spazio $2 - D$ complesso. Questa struttura comporta che su di essi potranno agire una serie di operatori lineari che formano uno spazio vettoriale di dimensione 4 su campo complesso. Infatti in uno spazio finito dimensionale $2D$ questi operatori sono matrici di 4 elementi complessi.

Sia \hat{A} un qualsivoglia operatore, allora sarà scomponibile nella combinazione lineare di 4 operatori:

$$\hat{A} = a_m \hat{I} + a_1 \hat{\sigma}_1 + a_2 \hat{\sigma}_2 + a_3 \hat{\sigma}_3 = a_m \hat{I} + \underline{a} \cdot \underline{\hat{\sigma}},$$

dove $\underline{a} = (a_1, a_2, a_3)$ e $\underline{\hat{\sigma}} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$.

La scelta di $\underline{\hat{\sigma}}$ è arbitraria ma può essere fatta in maniera tale da garantire alcune proprietà particolari. In primo luogo si richiede che tutte le sue componenti siano autoaggiunte ($\hat{\sigma}^* = \hat{\sigma}$), così facendo \hat{A} è autoaggiunto se tutti i coefficienti numerici sono reali.

In secondo luogo si richiede che valga:

$$(\underline{a} \cdot \underline{\hat{\sigma}})(\underline{b} \cdot \underline{\hat{\sigma}}) = \underline{a} \cdot \underline{b} \hat{I} + i \underline{a} \times \underline{b} \cdot \underline{\hat{\sigma}}.$$

Questa richiesta è impartita da tre ragioni:

- il prodotto $(\underline{a} \cdot \underline{\hat{\sigma}})(\underline{b} \cdot \underline{\hat{\sigma}})$ è a sua volta un operatore e quindi deve essere espresso come combinazione lineare dei 4 operatori utilizzati per \hat{A} ,
- l'uso di prodotti scalari e vettoriali garantisce la linearità rispetto ai due fattori,
- l'unità immaginaria è necessaria affinché valga $[(\underline{a} \cdot \underline{\hat{\sigma}})(\underline{b} \cdot \underline{\hat{\sigma}})]^* = (\underline{b} \cdot \underline{\hat{\sigma}})(\underline{a} \cdot \underline{\hat{\sigma}})$.

Definizione 2.1.1 — Operatore di Pauli. Sia $\underline{\hat{\sigma}} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$, tale che $\underline{\hat{\sigma}}^* = \underline{\hat{\sigma}}$, allora se valgono

$$\begin{aligned} [\underline{a} \cdot \underline{\hat{\sigma}}, \underline{b} \cdot \underline{\hat{\sigma}}] &= 2i \underline{a} \times \underline{b} \cdot \underline{\hat{\sigma}}, \\ (\underline{a} \cdot \underline{\hat{\sigma}})(\underline{b} \cdot \underline{\hat{\sigma}}) + (\underline{b} \cdot \underline{\hat{\sigma}})(\underline{a} \cdot \underline{\hat{\sigma}}) &= 2 \underline{a} \cdot \underline{b} \hat{I}, \end{aligned}$$

questo è un *operatore di Pauli*.



Si osservi che queste due richieste sono del tutto analoghe a quella precedente (infatti esplicitando il commutatore e sommando queste due si ottiene la condizione iniziale).

2.1.2 Problema agli autovalori

Si vuole studiare il problema agli auto valori dell'operatore autoaggiunto \hat{A} :

$$\hat{A} = a_m \hat{I} + a \underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}},$$

dove \underline{n} è un versore di componenti reali tale che $a \underline{n} = \underline{a}$.

Siccome ogni ket è autoket dell'identità il problema considerato si riduce a quello di trovare lo spettro di $\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}$. Gli operatori di Pauli garantiscono la seguente proprietà.

Proposizione 2.1.1 Lo spettro di $\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}$ è $\{-1, +1\}$.

Dimostrazione. Gli autoket di $\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}$ formano una base ortonormale $\{|\underline{n}, +1\rangle, |\underline{n}, -1\rangle\}$ (poiché questo è autoaggiunto). Il problema agli autovalori è quindi:

$$\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}} |\underline{n}, \pm 1\rangle = |\underline{n}, \pm 1\rangle \lambda_{\pm}.$$

Il Teorema spettrale invece garantisce la seguente rappresentazione di $(\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}})^2$:

$$(\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}})^2 = |\underline{n}, +1\rangle \lambda_+^2 \langle \underline{n}, +1| + |\underline{n}, -1\rangle \lambda_-^2 \langle \underline{n}, -1|,$$

questa quantità può essere anche calcolata dalle proprietà richieste per un operatore di Pauli:

$$(\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}})^2 = (\underline{n} \cdot \underline{n}) \hat{I} + i(\underline{n} \times \underline{n}) \cdot \underline{\hat{\sigma}} = \hat{I}.$$

Da quest'ultima si ha che $\lambda_{\pm}^2 = 1$. Si osservi che non è possibile che $\lambda_+ = \lambda_-$, altrimenti l'operatore $\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}$, dal Teorema spettrale, sarebbe un multiplo dell'identità. Se questo fosse vero allora questo operatore di Pauli commuterebbe con tutti gli altri operatori, cosa non consentita dalla sua definizione.

Si conclude che il suo spettro è $\{-1, +1\}$ (convenzionalmente si fanno coincidere i segni degli autovalori con quelli degli autoket). ■

Se ora si applica uno degli autoket di $\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}$ all'operatore \hat{A} si ottiene:

$$\hat{A} |\underline{n}, \pm 1\rangle = [a_m \hat{I} + a \underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}] |\underline{n}, \pm 1\rangle = |\underline{n}, \pm 1\rangle (a_m \pm a),$$

per cui vale la seguente proposizione.

Proposizione 2.1.2 Lo spettro di $\hat{A} = a_m \hat{I} + a \underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}$ è $\{a_m + a, a_m - a\}$.

2.1.3 Basi ortonormali per rappresentare operatori

Si è precedentemente discusso di come sia possibile rappresentare un operatore autoaggiunto tramite la combinazione lineare:

$$\hat{A} = a_m \hat{I} + a_n \cdot \hat{\sigma}.$$

Il vettore $\underline{a} = a_n$ è un vettore di \mathbb{R}^3 (affinché sia autoaggiunto \hat{A}) e per questo deve poter essere proiettato sulla base canonica.

Definizione 2.1.2 — Base ortonormale orientata. Si dice *base ortonormale orientata* l'insieme dei versori $\{\underline{e}_1, \underline{e}_3, \underline{e}_3\}$ tali che $\underline{e}_i = \underline{e}_1$ e che siano soddisfatte:

$$\begin{aligned} \underline{e}_i \cdot \underline{e}_j &= \delta_{ij} \\ \underline{e}_i \times \underline{e}_j &= \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \underline{e}_k. \end{aligned}$$

(ε_{ijk} è il simbolo di Levi-Civita.)

Analogamente si può definire una seconda base che risulta molto utile per svariati conti.

Definizione 2.1.3 — Base sferica orientata. Si dice *base sferica orientata* l'insieme dei vettori $\{\underline{e}_{-1}, \underline{e}_0, \underline{e}_1\}$ tali che $\underline{e}_{-\alpha} = \underline{e}_{-\alpha}$ e che siano soddisfatte:

$$\begin{aligned} \underline{e}_{\alpha} \cdot \underline{e}_{\beta} &= 2^{|\alpha|} \delta_{-\alpha\beta} \\ \underline{e}_{\alpha} \times \underline{e}_{\beta} &= -i\delta_{\alpha 0} \beta \underline{e}_{\beta} + i\delta_{\beta 0} \alpha \underline{e}_{\alpha} - i\delta_{-\alpha\beta} (\alpha - \beta) \underline{e}_0. \end{aligned}$$

Queste due basi sono strettamente collegate, nella fattispecie esiste una corrispondenza uno ad uno data dalle seguenti relazioni (per i vettori delle basi e le componenti di un vettore \underline{a}):

$$\begin{aligned} \underline{e}_0 &= \underline{e}_3, & \underline{e}_{\pm 1} &= \underline{e}_1 \pm i\underline{e}_2, & \underline{e}_1 &= \frac{\underline{e}_{+1} + \underline{e}_{-1}}{2}, & \underline{e}_2 &= \frac{\underline{e}_{+1} - \underline{e}_{-1}}{2i}, \\ a_0 &= a_3, & a_{\pm 1} &= a_1 \pm ia_2, & a_1 &= \frac{a_{+1} + a_{-1}}{2}, & a_2 &= \frac{a_{+1} - a_{-1}}{2i}. \end{aligned}$$

Le medesime relazioni si applicano agli operatori di Pauli:

$$\hat{\sigma}_0 = \hat{\sigma}_3, \quad \hat{\sigma}_{\pm 1} = \hat{\sigma}_1 \pm i\hat{\sigma}_2, \quad \hat{\sigma}_1 = \frac{\hat{\sigma}_{+1} + \hat{\sigma}_{-1}}{2}, \quad \hat{\sigma}_2 = \frac{\hat{\sigma}_{+1} - \hat{\sigma}_{-1}}{2i}.$$

2.1.4 Matrici di Pauli

Si vuole ora esplicitare la forma degli operatori di Pauli come matrici. Si comincerà dalla base ortogonale, le relazioni tra una base e l'altra consentiranno di determinare tali matrici anche per quella sferica. Si seguirà un argomento non del tutto rigoroso ma efficace.

Nella base ortonormale orientata è possibile scegliere una base ortonormale di autoket dell'operatore $\hat{\sigma}_3$. Per quanto dimostrato lo spettro questo operatore è $\{-1, +1\}$, per cui:

$$\hat{\sigma}_3 |\underline{e}_3, \pm 1\rangle = |\underline{e}_3, \pm 1\rangle (\pm 1).$$

Il teorema spettrale consente di ottenere la rappresentazione matriciale di questo operatore:

$$\hat{\sigma}_3 = |\underline{e}_3, +1\rangle \langle \underline{e}_3, +1| - |\underline{e}_3, -1\rangle \langle \underline{e}_3, -1| \implies \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Si consideri ora una matrice M autoaggiunta, la si vuole decomporre nelle matrici di Pauli. Studiando l'aggiunta M^* (nel caso delle matrici queste devono essere anche trasposte):

$$\begin{pmatrix} m_1 & m_2 \\ m_3 & m_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1^* & m_3^* \\ m_2^* & m_4^* \end{pmatrix} \implies m_1, m_4 \in \mathbb{R}, m_3 = m_2^*$$

La base su cui si scomporrà M è formata dalla matrice identità e le tre matrici di Pauli. Per far questo si ridefiniscano i termini della matrice in maniera tale da ottenere un termine dato da \hat{I} e un termine dato da $\hat{\sigma}_3$:

$$m_1 = a + b, \quad m_4 = a - b, \quad m_3 = c + id, \quad m_2 = c - id.$$

La matrice M si scompone nei quattro termini desiderati:

$$M = \begin{pmatrix} a+b & c+id \\ c-id & a-b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + d \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

In coordinate ortonormali orientate si ha quindi:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Facendo uso delle trasformazioni degli operatori di Pauli, in coordinate sferiche si ha:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_{+1} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

2.1.5 Esponenziale di Pauli

Teorema 2.1.3 Sia \underline{n} un versore, allora vale la seguente uguaglianza

$$\exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) = \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\hat{I} + i\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}.$$

Dimostrazione. Si consideri gli operatori $|\underline{n}, \pm 1\rangle \langle \underline{n}, \pm 1|$ sommando e sottraendo opportuni termini (così che si stia sommando una quantità nulla) si ottiene:

$$|\underline{n}, \pm 1\rangle \langle \underline{n}, \pm 1| = \frac{1}{2} [|\underline{n}, +1\rangle \langle \underline{n}, +1| + |\underline{n}, -1\rangle \langle \underline{n}, -1| \pm (|\underline{n}, +1\rangle \langle \underline{n}, +1| - |\underline{n}, -1\rangle \langle \underline{n}, -1|)].$$

Riconoscendo che, per il Teorema spettrale, $|\underline{n}, +1\rangle \langle \underline{n}, +1| + |\underline{n}, -1\rangle \langle \underline{n}, -1| = \hat{I}$ e $|\underline{n}, +1\rangle \langle \underline{n}, +1| - |\underline{n}, -1\rangle \langle \underline{n}, -1| = \underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}$, si ottiene:

$$|\underline{n}, \pm 1\rangle \langle \underline{n}, \pm 1| = \frac{\hat{I} \pm \underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}}{2}.$$

Utilizzando il Teorema spettrale per l'operatore $\exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right)$ si ha:

$$\begin{aligned} \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) &= |\underline{n}, +1\rangle \exp\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \langle \underline{n}, +1| + |\underline{n}, -1\rangle \exp\left(-\frac{\vartheta}{2}\right) \langle \underline{n}, -1| \\ &= \exp\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \frac{\hat{I} + \underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}}{2} + \exp\left(-\frac{\vartheta}{2}\right) \frac{\hat{I} - \underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}}{2} = \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\hat{I} + i\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}. \end{aligned}$$

■

2.1.6 Rotazioni degli autospazi

Si considerino due operatori $\underline{u} \cdot \hat{\sigma}$ e $\underline{v} \cdot \hat{\sigma}$ (\underline{u} , \underline{v} versori), ognuno con autoket, rispettivamente, $|\underline{u}, \pm 1\rangle$ e $|\underline{v}, \pm 1\rangle$. Si desidera trovare una relazione tra gli autoket di un operatore e l'altro.

Si osservi che i due operatori in questione possono essere interpretati come sempre il medesimo operatore ruotato prima nella direzione del primo versore e poi in quella del secondo. In virtù di questa analogia si procede nel seguente modo.

Definizione 2.1.4 Dati gli operatori $\underline{u} \cdot \hat{\sigma}$ e $\underline{v} \cdot \hat{\sigma}$ (\underline{u} , \underline{v} versori) si definiscono l'angolo di rotazione ϑ e il versore \underline{k} dalle:

$$\cos(\vartheta) = \underline{v} \cdot \underline{u}, \quad \underline{k} = \frac{\underline{v} \times \underline{u}}{|\underline{v} \times \underline{u}|}.$$

Il formalismo di Pauli fornisce il seguente risultato per tale rotazione:

Teorema 2.1.4 Dati gli operatori $\underline{u} \cdot \hat{\sigma}$ e $\underline{v} \cdot \hat{\sigma}$ (\underline{u} , \underline{v} versori), l'angolo di rotazione ϑ e il versore \underline{k} , tra questi operatori vale la seguente relazione:

$$\exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \hat{\sigma}\right)\underline{u} \cdot \hat{\sigma}\exp\left(-i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \hat{\sigma}\right) = \underline{v} \cdot \hat{\sigma}.$$

Mentre, tra i loro autoket vale:

$$|\underline{v}, \pm 1\rangle = \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \hat{\sigma}\right)|\underline{u}, \pm 1\rangle.$$

Dimostrazione. Utilizzando l'esponenziale di Pauli si ottiene:

$$\begin{aligned} & \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \hat{\sigma}\right)\underline{u} \cdot \hat{\sigma}\exp\left(-i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \hat{\sigma}\right) \\ &= \left[\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\hat{I} + i\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\underline{k} \cdot \hat{\sigma}\right]\underline{u} \cdot \hat{\sigma}\left[\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\hat{I} - i\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\underline{k} \cdot \hat{\sigma}\right] \\ &= \cos^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\underline{u} \cdot \hat{\sigma} + \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right)(\underline{k} \cdot \hat{\sigma})(\underline{u} \cdot \hat{\sigma})(\underline{k} \cdot \hat{\sigma}) + \\ & \quad + i\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)[(\underline{k} \cdot \hat{\sigma})(\underline{u} \cdot \hat{\sigma}) - (\underline{u} \cdot \hat{\sigma})(\underline{k} \cdot \hat{\sigma})]. \end{aligned}$$

Usando le richieste fatte per definire gli operatori di Pauli

$$(\underline{a} \cdot \hat{\sigma})(\underline{b} \cdot \hat{\sigma}) = \underline{a} \cdot \underline{b}\hat{I} + i\underline{a} \times \underline{b} \cdot \hat{\sigma}, \quad [\underline{a} \cdot \hat{\sigma}, \underline{b} \cdot \hat{\sigma}] = 2i\underline{a} \times \underline{b} \cdot \hat{\sigma},$$

e che $\underline{k} \perp \underline{u}, \underline{v}$, si ottiene:

$$\begin{aligned} (\underline{k} \cdot \hat{\sigma})(\underline{u} \cdot \hat{\sigma})(\underline{k} \cdot \hat{\sigma}) &= [\underline{k} \cdot \underline{u}\hat{I} + i\underline{k} \times \underline{u} \cdot \hat{\sigma}](\underline{k} \cdot \hat{\sigma}) = (i\underline{k} \times \underline{u} \cdot \hat{\sigma})(\underline{k} \cdot \hat{\sigma}) \\ &= i\underline{k} \times \underline{u} \cdot \underline{k}\hat{I} + i(i\underline{k} \times \underline{u} \times \underline{k}) \cdot \hat{\sigma} = -(\underline{k} \times \underline{u} \times \underline{k}) \cdot \hat{\sigma} \\ &= -[\underline{u}(\underline{k} \cdot \underline{k}) + \underline{k}(\underline{u} \cdot \underline{k})] \cdot \hat{\sigma} = -\underline{u} \cdot \hat{\sigma}, \end{aligned}$$

e usando che $\underline{k} = \underline{v} \times \underline{u}$ e $\sin \vartheta = |\underline{v} \times \underline{u}|$ si ha:

$$\begin{aligned} (\underline{k} \cdot \hat{\sigma})(\underline{u} \cdot \hat{\sigma}) - (\underline{u} \cdot \hat{\sigma})(\underline{k} \cdot \hat{\sigma}) &= [\underline{k} \cdot \hat{\sigma}, \underline{u} \cdot \hat{\sigma}] = 2i\underline{k} \times \underline{u} \cdot \hat{\sigma} = 2i\frac{\underline{v} \times \underline{u} \times \underline{u}}{|\underline{v} \times \underline{u}|} \cdot \hat{\sigma} \\ &= \frac{2i}{\sin \vartheta}[(\underline{u} \cdot \underline{v})\underline{u} - \underline{v}] \cdot \hat{\sigma}. \end{aligned}$$

Infine ricordando le formule trigonometriche

$$\cos(2x) = \cos^2(x) - \sin^2(x), \quad \sin(2x) = 2 \sin(x) \cos(x),$$

e inserendo gli ultimi due risultati nella prima equazione, si ottiene:

$$\begin{aligned} & \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) \underline{u} \cdot \underline{\hat{\sigma}} \exp\left(-i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) \\ &= \cos^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \underline{u} \cdot \underline{\hat{\sigma}} - \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \underline{u} \cdot \underline{\hat{\sigma}} - 2 \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \frac{1}{\sin \vartheta} [(\underline{u} \cdot \underline{v}) \underline{u} - \underline{v}] \cdot \underline{\hat{\sigma}} \\ &= \cos(\vartheta) \underline{u} \cdot \underline{\hat{\sigma}} - \sin(\vartheta) \frac{1}{\sin \vartheta} [(\underline{u} \cdot \underline{v}) \underline{u} - \underline{v}] \cdot \underline{\hat{\sigma}} = (\underline{u} \cdot \underline{v}) \underline{u} \cdot \underline{\hat{\sigma}} - [(\underline{u} \cdot \underline{v}) \underline{u} - \underline{v}] \cdot \underline{\hat{\sigma}} = \underline{v} \cdot \underline{\hat{\sigma}}. \end{aligned}$$

La relazione per gli autoket è verificata da un conto diretto:

$$\begin{aligned} \underline{v} \cdot \underline{\hat{\sigma}} |\underline{v}, \pm 1\rangle &= \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) \underline{u} \cdot \underline{\hat{\sigma}} \exp\left(-i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) |\underline{v}, \pm 1\rangle \\ &= \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) \underline{u} \cdot \underline{\hat{\sigma}} \exp\left(-i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) |\underline{u}, \pm 1\rangle \\ &= \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) \underline{u} \cdot \underline{\hat{\sigma}} |\underline{u}, \pm 1\rangle = \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{k} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) |\underline{u}, \pm 1\rangle (\pm 1) = |\underline{v}, \pm 1\rangle (\pm 1). \end{aligned}$$

■

■ **Esempio 2.1** Si vuole esprimere l'autoket $|\underline{n}, \pm 1\rangle$, dell'operatore $\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}$, in funzione degli autoket $|\underline{e}_3, \pm 1\rangle$, dell'operatore $\hat{\sigma}_3$.

In primo luogo si determinano:

$$\cos \vartheta = \underline{n} \cdot \underline{e}_3 = n_3, \quad \underline{k} = \frac{\underline{n} \times \underline{e}_3}{|\underline{n} \times \underline{e}_3|} = \frac{n_2 \underline{e}_1 - n_1 \underline{e}_2}{\sqrt{n_1^2 + n_2^2}}.$$

L'operatore che consente di passare da un autospazio all'altro è quindi dato dall'esponenziale di Pauli:

$$\exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) = \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \hat{I} + i \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}} = \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \hat{I} + i \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \frac{n_2 \hat{\sigma}_1 - n_1 \hat{\sigma}_2}{\sqrt{n_1^2 + n_2^2}}$$

A questo punto è utile passare alle coordinate sferiche orientate (queste semplificano i conti):

$$\begin{aligned} \underline{e}_0 = \underline{e}_3 &\Rightarrow \cos \vartheta = n_0, \\ n_1^2 + n_2^2 &= \left(\frac{n_{+1} + n_{-1}}{2}\right)^2 + \left(\frac{n_{+1} - n_{-1}}{2i}\right)^2 = n_{+1} n_{-1}, \\ n_2 \hat{\sigma}_1 - n_1 \hat{\sigma}_2 &= \frac{n_{+1} - n_{-1}}{2i} \frac{\sigma_{+1} + \sigma_{-1}}{2} - \frac{n_{+1} + n_{-1}}{2} \frac{\sigma_{+1} - \sigma_{-1}}{2i} = \frac{i}{2} [n_{-1} \sigma_{+1} - n_{+1} \sigma_{-1}], \\ \Rightarrow \underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}} &= i \frac{n_{-1} \sigma_{+1} - n_{+1} \sigma_{-1}}{2\sqrt{n_{+1} n_{-1}}}. \end{aligned}$$

Si definisca $\exp(\pm i\varphi) = \sqrt{\frac{n_{\pm 1}}{n_{\mp 1}}}$, così facendo l'esponenziale di Pauli diviene:

$$\exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{n} \cdot \underline{\hat{\sigma}}\right) = \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \hat{I} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) [\exp(-i\varphi) \hat{\sigma}_{+1} - \exp(i\varphi) \hat{\sigma}_{-1}].$$

Dovendo applicare questo operatore ai ket $|n_3, \pm\rangle = |n_0, \pm\rangle$ è opportuno calcolare $\hat{\sigma}_{\pm}$ applicato a questi (siccome appaiono nella sua espressione esplicita). Dalla rappresentazione in coordinate sferiche degli operatori di Pauli si ha:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_{\pm 1} |n_0, \pm 1\rangle &= 2 |n_0, \pm 1\rangle \langle n_0, \mp 1 | n_0, \pm \rangle = 0, \\ \hat{\sigma}_{\pm 1} |n_0, \mp 1\rangle &= 2 |n_0, \pm 1\rangle \langle n_0, \mp 1 | n_0, \mp 1 \rangle = 2 |n_0, \pm 1\rangle.\end{aligned}$$

Si può quindi procedere esplicitando la relazione:

$$\begin{aligned}|\underline{n}, +1\rangle &= \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{n} \cdot \hat{\sigma}\right) |e_0, +1\rangle \\ &= \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \hat{I} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) [\exp(-i\varphi) \hat{\sigma}_{+1} - \exp(i\varphi) \hat{\sigma}_{-1}] |e_0, +1\rangle \\ \Rightarrow \quad |\underline{n}, +1\rangle &= |e_0, +1\rangle \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) + |e_0, -1\rangle \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \exp(i\varphi), \\ |\underline{n}, -1\rangle &= \exp\left(i\frac{\vartheta}{2}\underline{n} \cdot \hat{\sigma}\right) |e_0, -1\rangle \\ &= \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \hat{I} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) [\exp(-i\varphi) \hat{\sigma}_{+1} - \exp(i\varphi) \hat{\sigma}_{-1}] |e_0, -1\rangle \\ \Rightarrow \quad |\underline{n}, -1\rangle &= |e_0, -1\rangle \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) - |e_0, +1\rangle \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \exp(-i\varphi).\end{aligned}$$

Dove si ricorda $\cos \vartheta = n_0 = n_3$ e $\exp(\pm i\varphi) = \sqrt{\frac{n_{\pm 1}}{n_{+1}}} = \sqrt{\frac{n_1 \pm in_2}{n_1 \mp in_2}}$. ■



Si osservi che così facendo lo stato $|\underline{n}, \pm 1\rangle$ è parametrizzato su una sfera. Infatti al variare di \underline{n} varieranno i parametri angolari ϑ , φ muovendosi su di una superficie sferica chiamata *sfera di Bloch*.

2.2 Modellizzare un sistema a due livelli

Si desidera ora applicare ad un sistema fisico la struttura algebrica descritta nella precedente sezione. Un sistema a soli due stati raramente corrisponde alla realtà fisica ma spesso rappresenta una prima approssimazione del sistema (per esempio supponendo che solo i primi due livelli energetici possano essere occupati).

2.2.1 Hamiltoniano a due livelli

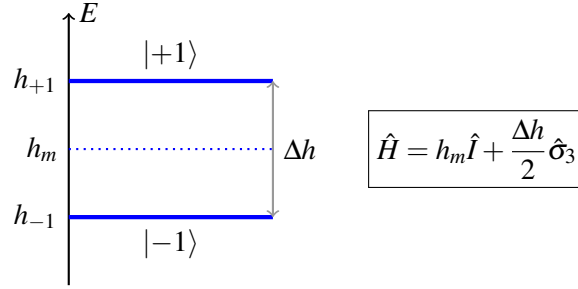
Un sistema a due livelli energetici è quindi caratterizzato da due stati con due energie differenti, rispettivamente $|\pm 1\rangle$ e $h_{\pm 1}$ ($h_{+1} > h_{-1}$). Si può costruire l'hamiltoniano del sistema sfruttando questa osservazione e il Teorema spettrale:

$$\hat{H} = | +1 \rangle h_{+1} \langle +1 | + | -1 \rangle h_{-1} \langle -1 |.$$

Definendo i parametri $h_m = \frac{h_{+1} + h_{-1}}{2}$ (energia media) e $\Delta h = h_{+1} - h_{-1}$ (separazione dei livelli) l'hamiltoniano può essere riscritta come:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= | +1 \rangle \left(h_m + \frac{\Delta h}{2} \right) \langle +1 | + | -1 \rangle \left(h_m - \frac{\Delta h}{2} \right) \langle -1 | \\ &= h_m \left[| +1 \rangle \langle +1 | + | -1 \rangle \langle -1 | \right] + \frac{\Delta h}{2} \left[| +1 \rangle \langle +1 | - | -1 \rangle \langle -1 | \right] = h_m \hat{I} + \frac{\Delta h}{2} \hat{\sigma}_3.\end{aligned}$$

Si è così mostrato come costruire una corrispondenza diretta tra sistema a due livelli energetici e formalismo di Pauli.



2.2.2 Perturbazioni di un sistema a due livelli

Spesso e volentieri identificare lo stato di un sistema, seppur a due soli livelli, può essere complesso. In questi casi si può considerare un sistema più semplice, per il quale è facile identificare gli stati del sistema, per esprimere lo stato del sistema reale in funzione di quello più semplice.

Si considera quindi un hamiltoniano imperturbato $\hat{H}_0 = h_{0,m} \hat{I} + \frac{\Delta h_0}{2} \hat{\sigma}_0^1$, che da origine a due autostati $|0, \pm 1\rangle$. Una perturbazione del sistema è rappresentata da un operatore autoaggiunto che può quindi essere espresso in funzione degli operatori di Pauli:

$$\hat{W} = w_m \hat{I} + \underline{w} \cdot \underline{\hat{\sigma}} \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} = (h_{0,m} + w_m) \hat{I} + \left(\frac{\Delta h_0}{2} \underline{e}_0 + \underline{w} \right) \cdot \underline{\hat{\sigma}}.$$

Si avranno quindi due autoket di \hat{H} con i loro rispettivi autovalori (determinati dalla teoria degli operatori di Pauli):

$$\hat{H} |\pm 1\rangle = |\pm 1\rangle h_{\pm 1}, \quad h_{\pm 1} = h_{0,m} + w_m \pm \left| \frac{\Delta h_0}{2} \underline{e}_0 + \underline{w} \right|.$$

Come si è visto è possibile esprimere questi autoket (e i loro autovalori) in funzione di quelli dell'operatore \hat{H} :

$$|\pm 1\rangle = |0, \pm 1\rangle \cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \pm |0, \mp 1\rangle \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \exp(\pm i\varphi).$$

Per determinare ϑ e φ è necessario identificare prima il versore \underline{n} dell'operatore di Pauli perturbato (in questo modo si possono usare le formule ottenute nell'Esempio 2.1):

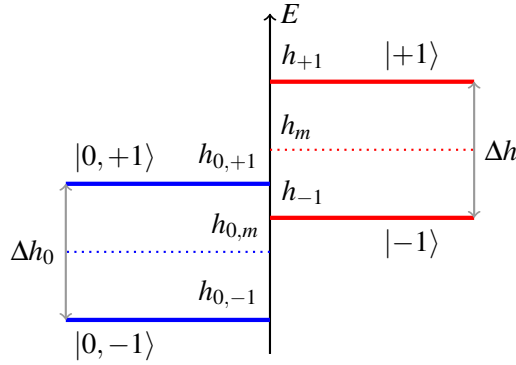
$$\underline{n} = \frac{\frac{\Delta h_0}{2} \underline{e}_0 + \underline{w}}{\left| \frac{\Delta h_0}{2} \underline{e}_0 + \underline{w} \right|} \quad \Rightarrow \quad \cos \vartheta = \underline{n} \cdot \underline{e}_0 = \frac{\frac{\Delta h_0}{2} + w_0}{\left| \frac{\Delta h_0}{2} \underline{e}_0 + \underline{w} \right|}, \quad \exp(\pm i\varphi) = \sqrt{\frac{n_{\pm 1}}{n_{\mp 1}}} = \sqrt{\frac{w_{\pm 1}}{w_{\mp 1}}}.$$

Infine definendo $h_m = \frac{h_{+1} + h_{-1}}{2}$ (energia media) e $\Delta h = h_{+1} - h_{-1}$ (separazione dei livelli) si ha:

$$h_m = h_{0,m} + w_m, \quad \Delta h = |\Delta h_0 \underline{e}_0 + 2\underline{w}|.$$

Si osservi che, seppure queste quantità possano sembrare facilmente ricavabili, in particolar modo l'autovalore energetico può essere alquanto complesso da calcolare (per via della presenza del modulo vettoriale).

¹ Si stanno usando le coordinate sferiche orientate.



Le espressioni ottenute possono essere approssimate nel caso in cui la perturbazione sia piccola, ossia se vale la seguente condizione:

$$|w| \ll h_{0,m}, \Delta h_0.$$

In questo caso valgono le seguenti approssimazioni²:

$$\begin{aligned} \left| \frac{\Delta h_0}{2} e_0 + w \right| &= \sqrt{\left(\frac{\Delta h_0}{2} \right)^2 + \Delta h_0 w_0 + |w|^2} = \frac{\Delta h_0}{2} \sqrt{1 + \left[\frac{4w_0}{\Delta h_0} + \left(\frac{2|w|}{\Delta h_0} \right)^2 \right]} \\ &= \frac{\Delta h_0}{2} \left[1 + \frac{1}{2} \left[\frac{4w_0}{\Delta h_0} + \left(\frac{2|w|}{\Delta h_0} \right)^2 \right] - \frac{1}{8} \left[\frac{4w_0}{\Delta h_0} + \left(\frac{2|w|}{\Delta h_0} \right)^2 \right]^2 + O\left(\frac{|w|}{\Delta h_0} \right)^3 \right] \\ &= \frac{\Delta h_0}{2} \left[1 + \frac{2w_0}{\Delta h_0} + 2 \left(\frac{|w|}{\Delta h_0} \right)^2 - 2 \left(\frac{w_0}{\Delta h_0} \right)^2 + O\left(\frac{|w|}{\Delta h_0} \right)^3 \right] \\ &= \frac{\Delta h_0}{2} + w_0 + \frac{|w|^2 - w_0^2}{\Delta h_0} + O\left(\frac{|w|^3}{\Delta h_0^2} \right) \\ &= \frac{\Delta h_0}{2} + w_0 + \frac{w_{+1}w_{-1}}{\Delta h_0} + O\left(\frac{|w|^3}{\Delta h_0^2} \right), \\ \Rightarrow \quad &\boxed{h_{\pm 1} = h_{0,m} + w_m \pm \left[\frac{\Delta h_0}{2} + w_0 + \frac{w_{+1}w_{-1}}{\Delta h_0} \right] + O\left(\frac{|w|^3}{\Delta h_0^2} \right)}. \end{aligned}$$

Con conti analoghi si ottiene: l'approssimazione degli autostati

$$\boxed{|\pm 1\rangle = |0, \pm 1\rangle \pm |0, \pm 1\rangle \frac{w_{\pm 1}}{\Delta h_0} + O\left(\frac{|w|^2}{\Delta h_0^2} \right)}$$

l'approssimazione della differenza di energia dei due livelli:

$$\boxed{\Delta h = \Delta h_0 + 2w_0 + 2 \frac{w_{+1}w_{-1}}{\Delta h_0} + O\left(\frac{|w|^3}{\Delta h_0^2} \right)}.$$

²Si ricorda l'approssimazione in serie di Taylor $\sqrt{1+x} = 1 + x/2 - x^2/8 + O(x^3)$.

3. Teoria delle perturbazioni

3.1 Perturbazioni indipendenti dal tempo

In questo capitolo si discuterà la *teoria delle perturbazioni*, incominciando da quelle indipendenti dal tempo. Questo approccio allo studio di un sistema è estremamente utile in quanto consente di studiare anche sistemi non riconducibili direttamente ai problemi analiticamente più semplici da risolvere. Un classico esempio è quello dell'atomo di idrogeno: in prima istanza l'equazione di Schrödinger idrogenoide ben approssima tale sistema ma studi più approfonditi mettono in mostra la necessità di una teoria più precisa. In questo caso alcune correzioni perturbative si rivelano sufficienti a descrivere fenomeni relativistici o di carattere spin-orbita.

Nello studio di questi sistemi è comune suddividere l'hamiltoniano \hat{H} che descrive il sistema in due termini:

- \hat{H}_0 *hamiltoniano imperturbato*, di cui è nota la soluzione del problema agli autovalori,
- \hat{W} *perturbazione*, ossia il termine che perturba il sistema.

Nel complesso l'hamiltoniano diventa:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}. \quad (3.1)$$

SI supporrà inizialmente che \hat{H}_0 abbia spettro discreto.

Per poter utilizzare la teoria perturbata è necessario che il termine \hat{W} descriva un'interazione di piccola entità rispetto all'hamiltoniano imperturbato. Per questo si definiscono tre quantità che stimano l'ordine di grandezza dei contributi energetici:

- \overline{H}_0 che stima l'ordine di grandezza dei livelli energetici imperturbati,
- $\overline{\Delta H_0}$ che stima l'ordine di grandezza della separazione di due livelli imperturbati successivi,
- \overline{W} che stima il contributo energetico dovuto alla perturbazione \hat{W} .

L'approccio perturbativo è adoperabile solamente se sono valide:

$$\overline{H}_0 \gg \overline{W}, \quad \overline{\Delta H_0} \gg \overline{W}. \quad (3.2)$$

Queste condizioni garantiscono che anche l'hamiltoniano perturbato abbia spettro discreto come quello imperturbato. Infatti eventuali ulteriori livelli energetici, la cui degenerazione è rimossa

dalla perturbazione, per le condizioni richieste si separeranno per energie piccole rispetto a quelle del sistema imperturbato.

Lo stato imperturbato, come si è già detto, è di soluzione nota, fornita dall'equazione:

$$\hat{H}_0 |n\rangle = |n\rangle h(n), \quad (3.3)$$

dove $|n\rangle$ è un autoket di autovalore $h(n)$. Siccome \hat{H}_0 è autoaggiunto e ha spettro discreto tutti i $|n\rangle$ sono ortogonali e per il principio di completezza si assume che formino una base.

Lo stato del sistema perturbato è determinato dalla soluzione del problema agli autovalori dell'operatore (3.1):

$$\hat{H} |n_p, p\rangle = |n_p, p\rangle h(n_p, p), \quad (3.4)$$

dove $|n_p, p\rangle$ è un autoket di autovalore $h(n_p, p)$, n_p rappresenta un indice che caratterizza l'autoket perturbato e p indica che risolve l'equazione di Schrödinger perturbata.

Siccome è richiesto che la perturbazione sia piccola si suppone che autoket e autovalori perturbati siano esprimibili come una serie di potenze dell'energia di perturbazione

$$|n_p, p\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |n_p, k\rangle = |n_p, 0\rangle + |n_p, 1\rangle + |n_p, 2\rangle \dots, \quad (3.5)$$

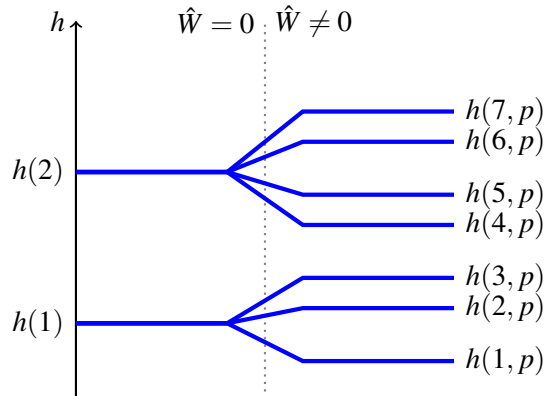
$$h(n_p, p) = \sum_{k=0}^{\infty} h(n_p, k) = h(n_p, 0) + h(n_p, 1) + h(n_p, 2) + \dots, \quad (3.6)$$

dove $|n_p, k\rangle$, $h(n_p, k)$ sono di ordine $O(\bar{W}^k)$.

Va ora osservato che se si considera il limite fittizio¹ in cui la perturbazione viene eliminata dal sistema allora gli autoket perturbati (3.5) e gli autovalori perturbati (3.6) si riducono a quelli imperturbati. Inoltre in questo caso le serie di potenze si riducono al solo termine di ordine zero:

$$\begin{aligned} |n_p, p\rangle &= |n_p, 0\rangle \longrightarrow |i\rangle, \\ h(n_p, p) &= h(n_p, 0) \longrightarrow h(i). \end{aligned}$$

Si osservi che più autoket e autovalori perturbati differenti (potendo avere identici termini di ordine 0) possono degenerare, in assenza di perturbazione, in un unico autoket e autovalore imperturbato.



¹Fittizio poiché non sempre fisicamente realizzabile.

3.1.1 Calcolo degli stati perturbati

Si vuole ottenere ora un metodo operativo per determinare i termini delle serie che esprimono gli autoket e gli autovalori perturbati.

Per procedere nell'analisi del problema perturbato è opportuno introdurre due nuovi operatori. Infatti in generale il problema imperturbato può essere degenerare: sia A_i l'insieme degli autoket imperturbati $|n\rangle$ che hanno autovalore $h(i)$.

Definizione 3.1.1 Si definisce autoproiettore di $h(i)$ l'operatore:

$$\hat{P}(i) = \sum_{n \in A_i} |n\rangle \langle n|. \quad (3.7)$$

Questo non è altro che il proiettore ortogonale sull'autospazio di $h(i)$.

Definizione 3.1.2 Si definisce risolvente di $h(i)$ l'operatore:

$$\hat{D}(i) = \sum_{n \notin A_i} \frac{|n\rangle \langle n|}{h(i) - h(n)}. \quad (3.8)$$

Questi due operatori saranno utili nella risoluzione del problema di Schrödinger perturbato. Per prima cosa è necessario dimostrare una serie di proprietà di questi due operatori.

Proposizione 3.1.1 Valgono le seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \hat{P}(i) &= \hat{P}(i) \hat{H}_0 = h(i) \hat{P}(i), \\ \hat{D}(i) \hat{P}(i) &= \hat{P}(i) \hat{D}(i) = 0, \\ (h(i) \hat{I} - \hat{H}_0) \hat{D}(i) &= \hat{D}(i) (h(i) \hat{I} - \hat{H}_0) = \hat{I} - \hat{P}(i). \end{aligned}$$

Dimostrazione. Si osservi che dalle definizioni segue:

$$\hat{H}_0 \hat{P}(i) = \sum_{n \in A_i} \hat{H}_0 |n\rangle \langle n| = \sum_{n \in A_i} |n\rangle h(n) \langle n| = h(i) \sum_{n \in A_i} |n\rangle \langle n| = h(i) \hat{P}(i).$$

Da questa segue il resto della relazione poiché entrambi sono operatori autoaggiunti.

Per dimostrare la seconda relazione è sufficiente far uso delle definizioni:

$$\hat{D}(i) \hat{P}(i) = \sum_{m \notin A_i} \sum_{n \in A_i} |m\rangle \frac{\langle m|n\rangle}{h(i) - h(n)} \langle n| = \sum_{m \notin A_i} \sum_{n \in A_i} |m\rangle \frac{\delta_{m,n}}{h(i) - h(n)} \langle n| = 0.$$

Analogamente si procede per $\hat{P}(i) \hat{D}(i)$, dimostrando la seconda relazione.

Per la terza relazione dalle definizioni si ha:

$$\begin{aligned} (h(i) \hat{I} - \hat{H}_0) \hat{D}(i) &= \sum_{n \notin A_i} (h(i) \hat{I} - \hat{H}_0) \frac{|n\rangle \langle n|}{h(i) - h(n)} = \sum_{n \notin A_i} |n\rangle \frac{h(i) - h(n)}{h(i) - h(n)} \langle n| \\ &= \sum_{n \notin A_i} |n\rangle \langle n| = \sum_n |n\rangle \langle n| - \sum_{n \in A_i} |n\rangle \langle n| = \hat{I} - \hat{P}(i). \end{aligned}$$

Da questa, usando il fatto che \hat{H}_0 e $\hat{D}(i)$ sono autoaggiunti, si dimostra il resto della terza relazione. ■

Note queste proprietà si può ottenere la formula generale che consente di risolvere il problema agli autovalori perturbati. Da adesso in poi si fissa n_p e i in maniera tale che $h(n_p, 0) = h(i)$ e si ometteranno questi nella notazione degli operatori. Inoltre si definisce $w(n_p, p) = h(n_p, p) - h(n_p, 0) = h(n_p, 1) + h(n_p, 2) + \dots$.

Teorema 3.1.2 Il problema di Schrödinger perturbato è riconducibile alla risoluzione delle seguenti equazioni operatoriali:

$$\hat{P}(\hat{W} + \hat{W} \sum_{n=0}^{\infty} [\hat{D}(\hat{W} - \hat{I}w)]^n \hat{D}\hat{W})\hat{P}|n_p, p\rangle = \hat{P}|n_p, p\rangle w, \quad (3.9)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} [\hat{D}(\hat{W} - \hat{I}w)]^n \hat{D}\hat{W})\hat{P}|n_p, p\rangle = (\hat{I} - \hat{P})|n_p, p\rangle \quad (3.10)$$

Il vantaggio di queste due equazioni è quello di poter essere facilmente adoperate assieme allo sviluppo in serie degli autoket e degli autovalori. Volendo ottenere il problema di Schrödinger approssimato al prim'ordine si inseriscono nelle relazioni del Teorema 3.1.2 i termini perturbativi di ordine 1 e si eliminano tutti i termini dove appaiono termini di ordine superiore:

$$\boxed{\hat{P}(i)\hat{W}\hat{P}(i)|n_p, 0\rangle = |n_p, 0\rangle h(n_p, 1)}. \quad (3.11)$$

Al secondo ordine invece si ottengono le due seguenti equazioni:

$$\boxed{\hat{P}(i)(\hat{W} + \hat{W}\hat{D}(i)\hat{W})\hat{P}(i)(|n_p, 0\rangle + \hat{P}(i)|n_p, 1\rangle) = (|n_p, 0\rangle + \hat{P}(i)|n_p, 1\rangle)(h(n_p, 1) + h(n_p, 2))}, \quad (3.12)$$

$$\boxed{(\hat{I} - \hat{P}(i))|n_p, 1\rangle = \hat{D}(i)\hat{W}|n_p, 0\rangle}. \quad (3.13)$$

Dimostrazione Teorema 3.1.2. Si vogliono ricavare le relazioni del Teorema 3.1.2 dall'equazione di Schrödinger:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_0 + \hat{W}]|n_p, p\rangle &= |n_p, p\rangle h(n_p, p) = |n_p, p\rangle (h(i) - w(n_p, p)) \\ \implies [\hat{H}_0 + \hat{W} - \hat{I}(h(i) - w(n_p, p))]|n_p, p\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Utilizzando le proprietà dell'operatore \hat{D} (per cui $\hat{D}(\hat{H}_0 + \hat{I}h(i)) = \hat{P} - \hat{I}$) e moltiplicando a sinistra l'equazione di Schrödinger per \hat{D} si ha:

$$[\hat{I} - \hat{P}]|n_p, p\rangle = \hat{D}[\hat{W} - w(n_p, p)\hat{I}]|n_p, p\rangle. \quad (3.14)$$

Si osservi che, scomponendo $|n_p, p\rangle$ nell'autospazio di $h(i)$

$$|n_p, p\rangle = (\hat{P} + \hat{I} - \hat{P})|n_p, p\rangle$$

e inserendo questa nell'equazione precedente, si ottiene:

$$[\hat{I} - \hat{P}]|n_p, p\rangle = \hat{D}[\hat{W} - w(n_p, p)\hat{I}](\hat{P} + \hat{I} - \hat{P})|n_p, p\rangle.$$

Questa equazione presenta due volte il termine $\hat{I} - \hat{P}$, se si sfrutta ricorsivamente questa uguaglianza si ottiene:

$$[\hat{I} - \hat{P}]|n_p, p\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} [\hat{D}(\hat{W} - w(n_p, p)\hat{I})]^n \hat{P}|n_p, p\rangle.$$

Ricordando la proprietà per cui $\hat{D}\hat{P} = 0$ si ha l'uguaglianza: $\hat{D}(\hat{W} - w\hat{I})\hat{P} = \hat{D}\hat{W}\hat{P}$. Facendo uso di questa, nell'ultima equazione ottenuta, si ha la seconda relazione del Teorema:

$$\begin{aligned} [\hat{I} - \hat{P}] |n_p, p\rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} [\hat{D}(\hat{W} - w(n_p, p)\hat{I})]^{n-1} \hat{D}\hat{W}\hat{P} |n_p, p\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} [\hat{D}(\hat{W} - w(n_p, p)\hat{I})]^n \hat{D}\hat{W}\hat{P} |n_p, p\rangle \end{aligned}$$

A questo punto si moltiplichi l'equazione di Schrödinger per \hat{P} a sinistra, utilizzando le proprietà di questo operatore (per cui $\hat{P}(\hat{H}_0 - h(i)) = 0$) si ottiene:

$$\hat{P}[\hat{W} - w(n_p, p)\hat{I}] |n_p, p\rangle = 0.$$

Scomponendo $|n_p, p\rangle$ nell'autospazio di $h(i)$ questa diventa:

$$\hat{P}[\hat{W} - w(n_p, p)\hat{I}](\hat{P} + \hat{I} - \hat{P}) |n_p, p\rangle = 0.$$

Si sostituisca in quest'ultima equazione il termine $[\hat{I} - \hat{P}] |n_p, p\rangle$ con la sua espressione data dalla serie precedentemente ottenuta:

$$[\hat{P}\hat{W}\hat{P} - w(n_p, p)\hat{P}] |n_p, p\rangle + \hat{P}[\hat{W} - w(n_p, p)\hat{I}] \sum_{n=0}^{\infty} [\hat{D}(\hat{W} - w(n_p, p)\hat{I})]^n \hat{D}\hat{W}\hat{P} |n_p, p\rangle = 0$$

Per concludere si osservi che per la proprietà $\hat{D}\hat{P} = 0$ si ha che $\hat{D}\hat{P}\hat{W} = \hat{D}\hat{P}(\hat{W} - w\hat{I}) = 0$, che consente di annullare l'ultimo addendo dell'equazione sopra, così da ottenere la prima relazione:

$$\hat{P}(\hat{W} + \hat{W} \sum_{n=0}^{\infty} [\hat{D}(\hat{W} - \hat{I}w)]^n \hat{D}\hat{W})\hat{P} |n_p, p\rangle = \hat{P} |n_p, p\rangle w.$$

■

3.1.2 Sistemi perturbati non degeneri

I risultati ottenuti dal Teorema 3.1.2 sono di facile utilizzo nel caso in cui gli stati perturbati non degenerano, ossia quando si rimuove la perturbazione. In questo caso l'auto spazio $h(i)$ contiene un solo autoket perturbato e quindi gli operatori autoproiettore e risolvante si riducono a:

$$\hat{P}(i) = |i\rangle \langle i|, \quad \hat{D}(i) = \sum_{n \neq i} \frac{|n\rangle \langle n|}{h(i) - h(n)}.$$

I termini di ordine 0, degli autoket e autovalori perturbati, sono autovalori e autoket imperturbati. Prendendo $|i\rangle = |n_p, 0\rangle$ ed esplicitando gli operatori nell'equazione utilizzata per calcolare le perturbazioni al prim'ordine:

$$\begin{aligned} \hat{P}(i)\hat{W}\hat{P}(i) |n_p, 0\rangle &= |i\rangle \langle i| \hat{W} |i\rangle \langle i| |n_p, 0\rangle = |n_p, 0\rangle \langle n_p, 0| \hat{W} |n_p, 0\rangle = |n_p, 0\rangle h(n_p, 1) \\ \implies \boxed{h(n_p, 1) = \langle n_p, 0| \hat{W} |n_p, 0\rangle}. \end{aligned}$$

Al second'ordine è più complessa la trattazione e necessita di più passaggi. Per prima cosa si consideri la prima relazione ottenuta al second'ordine e si diagonalizzi l'operatore a sinistra dell'uguale:

$$\begin{aligned} \hat{P}(i)(\hat{W} + \hat{W}\hat{D}(i)\hat{W})\hat{P}(i)(|n_p, 0\rangle + \hat{P}(i)|n_p, 1\rangle) &= (|n_p, 0\rangle + \hat{P}(i)|n_p, 1\rangle)(h(n_p, 1) + h(n_p, 2)) \\ &= \left[|i\rangle \langle i| \hat{W} (1 + \sum_{n \neq i} \frac{|n\rangle \langle n|}{h(i) - h(n)} \hat{W}) |i\rangle \langle i| \right] (|n_p, 0\rangle + \hat{P}(i)|n_p, 1\rangle) \\ &= |i\rangle \left[\langle i| \hat{W} |i\rangle + \sum_{n \neq i} \frac{|\langle i| \hat{W} |n\rangle|^2}{h(i) - h(n)} \right] \langle i| (|n_p, 0\rangle + \hat{P}(i)|n_p, 1\rangle). \end{aligned}$$

Questa scomposizione (ricordando $|i\rangle = |n_p, 0\rangle$) implica che l'autovalore:

$$h(n_p, 1) + h(n_p, 2) = \langle i | \hat{W} | i \rangle + \sum_{n \neq i} \frac{|\langle i | \hat{W} | n \rangle|^2}{h(i) - h(n)} = h(n_p, 1) + \sum_{n \neq i} \frac{|\langle n_p, 0 | \hat{W} | n \rangle|^2}{h(i) - h(n)}$$

$$\Rightarrow h(n_p, 2) = \sum_{n \neq i} \frac{|\langle n_p, 0 | \hat{W} | n \rangle|^2}{h(i) - h(n)}$$

La diagonalizzazione dell'operatore implica anche che $|i\rangle = |n_p, 0\rangle + \hat{P}(i) |n_p, 1\rangle$, come si è già detto però $|i\rangle = |n_p, 0\rangle$, per cui $\hat{P}(i) |n_p, 1\rangle = 0$. Usando questo fatto nella seconda relazione al second'ordine si ottiene:

$$(\hat{I} - \hat{P}(i)) |n_p, 1\rangle = \hat{D}(i) \hat{W} |n_p, 0\rangle = \sum_{n \neq i} |n\rangle \frac{\langle n | \hat{W} | n_p, 0 \rangle}{h(i) - h(n)}$$

$$\Rightarrow |n_p, 1\rangle = \sum_{n \neq i} |n\rangle \frac{\langle n | \hat{W} | n_p, 0 \rangle}{h(i) - h(n)}.$$

Proposizione 3.1.3 Il problema di Schrödinger, per perturbazioni di \hat{H}_0 non degeneri, è approssimato al secondo ordine da:

$$\begin{aligned} |n_p, 0\rangle &= |i\rangle, \\ h(n_p, 0) &= h(i), \\ |n_p, 1\rangle &= \sum_{n \neq i} |n\rangle \frac{\langle n | \hat{W} | n_p, 0 \rangle}{h(i) - h(n)}, \\ h(n_p, 1) &= \langle n_p, 0 | \hat{W} | n_p, 0 \rangle, \\ h(n_p, 2) &= \sum_{n \neq i} \frac{|\langle n_p, 0 | \hat{W} | n \rangle|^2}{h(i) - h(n)}. \end{aligned}$$

Dove si sono indicati $|i\rangle$, $h(i)$ rispettivamente autoket e autovalore imperturbati e $|n_p, k\rangle$, $h(n_p, k)$ rispettivamente autoket e autovalore perturbati di ordine k .

■ **Esempio 3.1 — Perturbazioni di un sistema a due livelli.** ■



Bibliografia

Libri

Articoli

Indice analitico

S

Sistemi Quantomeccanici 5