

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PAVIA

SCIENTIFICA ACTA

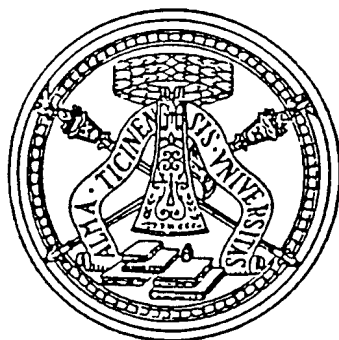
QUADERNI DEL DOTTORATO

VOLUME III

ANNO III

NUMERO 1

6 GIUGNO 1988



ISTITUTO NAZIONALE DI FISICA NUCLEARE

Fausto Borgonovi

**Dipartimento di Fisica Nucleare e Teorica
Università di Pavia**

**e
Istituto Nazionale di Fisica Nucleare
Sezione di Pavia**

**METODI DI DILATAZIONE ANALITICA E RISONANZE
IN SISTEMI QUANTISTICI NON RELATIVISTICI**

Seminario tenuto il 25 novembre 1987

1. INTRODUZIONE

Ci proponiamo di definire il concetto di risonanza nella classe dei sistemi quantistici non relativistici ad n corpi. Si parla di risonanza ogni volta che si ha a che fare con sistemi che decadono spontaneamente con vita media sufficientemente lunga : tali stati sono chiamati metastabili e tempo di vita media τ e larghezza in energia Γ sono collegati dal principio di indeterminazione di Heisenberg $\Gamma \sim \frac{\hbar}{\tau}$. Il calcolo di Γ viene solitamente affidato alla teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo dalla incerta collocazione matematica, a differenza della invece collaudata teoria di Kato-Rellich o teoria indipendente dal tempo, per la quale viene garantita analiticità delle soluzioni nel parametro perturbativo e convergenza della serie associata.

In questo lavoro dimostriamo come è possibile studiare le risonanze in generici sistemi quantistici non relativistici di interesse, cioè interagenti con potenziali di tipo coulombiano o di Yukawa, utilizzando la teoria di Kato-Rellich che sfocierà nella regola d'oro di Fermi per il calcolo di Γ . Partiamo allora da un semplice esempio in cui le risonanze vengono ad essere strettamente connesse a certe peculiarità dello spettro dell'operatore hamiltoniano associato al sistema.

2. ATOMO DI ELIO

Consideriamo il modello non relativistico dell'atomo di elio, in approssimazione di massa nucleare infinita e trascurando le interazioni spin-orbita : i due elettroni sono allora supposti interagire con il nucleo fisso e tra loro unicamente in virtù della loro carica elettrica, per cui l'hamiltoniana in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^6)$ sarà :

$$H = -\Delta_1 - \Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \equiv H_0 + \frac{1}{|r_1 - r_2|}$$

ove le unità sono state scelte in modo tale che $\hbar^2 = 2m = e = 1$ essendo e ed m la carica e la massa dell'elettrone.

Scegliamo la repulsione coulombiana come perturbazione ed analizziamo lo spettro dell'hamiltoniano imperturbato H_0 . E' conveniente a tal fine considerare la decomposizione naturale in prodotto tensoriale

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^6) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$$

ed osservare che

$$H_0 = h_0 \otimes 1 + 1 \otimes h_0$$

ove h_0 è l'hamiltoniana imperturbata agente in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ ovvero l'operatore che descrive l'atomo di idrogeno. Partendo dalla conoscenza dello spettro di h_0 :

$$\sigma(h_0) = \sigma_{disc} \cup \sigma_{ess} = \left\{ -\frac{1}{n^2} ; n \geq 1 \right\} \cup [0, +\infty)$$

e dal fatto che per operatori della forma di H_0 vale che

$$\sigma(H_0) = \sigma(h_0) + \sigma(h_0)$$

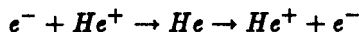
è facile constatare che tale spettro è costituito da $\left\{ -\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} ; n, m \geq 1 \right\}$ e da $[-1, +\infty)$.

Lo spettro essenziale è il semiasse reale a destra del punto -1 , dunque gli autovalori $E_{n,m} \equiv -\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}$ con n, m maggiori di 2 cadono al suo interno. In definitiva allora abbiamo uno spettro discreto $\left\{ -1 - \frac{1}{n^2} ; n \geq 1 \right\}$, uno spettro essenziale $[-1, +\infty)$ ed autovalori $\left\{ -\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} ; n, m \geq 2 \right\}$ immersi nel continuo $(0, 1)$.

Concentriamoci sugli autovalori nel continuo : in base a considerazioni di tipo fisico ci si aspetta che l'accensione dell'interazione elettrone elettrone ne provochi la scomparsa. Ciò è dovuto intuitivamente al fatto che le autofunzioni del continuo immediatamente adiacenti sono costituite dalla somma di una autofunzione dello spettro discreto e di una del continuo dell'hamiltoniana h_0

per l'atomo di idrogeno, fornendo un modello per il sistema ione nello stato fondamentale più elettrone libero.

In ogni caso la "memoria" che l'atomo di elio conserva di questi autovalori è evidente se si considera lo scattering di elettroni su ioni elio. Riportando infatti in un grafico i valori della sezione d'urto in funzione dell'energia cinetica totale si osservano dei picchi in corrispondenza degli autovalori immersi nel continuo. In pratica però solo i picchi relativi a piccoli valori dell'energia potranno essere distinti dal background. Questi rappresentano le risonanze o stati metastabili e possono essere pensati come derivanti dal processo



con formazione intermedia di uno stato legato di He che decade spontaneamente in He^+ ed e^- , con un tempo di vita media dato da $\tau \simeq \frac{h}{\Gamma}$. Questi stati, detti autoionizzanti o Auger, sono presenti anche nell'assorbimento di fotoni da parte dell'atomo di elio, per energie degli stessi pari alla differenza tra tale livello ed il livello fondamentale.

Tali picchi sono ben approssimati da una lorentziana

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \left[(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4} \right]^{-1}$$

ove Γ è l'ampiezza a metà altezza ; ricordando allora che la sezione d'urto differenziale è pari al quadrato dell'ampiezza di scattering possiamo constatare, seguendo Wigner e Weisskopf , che le risonanze rappresentano la parte immaginaria dei poli dell'ampiezza di scattering nel piano complesso dell'energia (a meno di un fattore 2) .

L'introduzione di energie complesse merita però alcune attenzioni ; consideriamo a tale proposito la soluzione radiale dell'equazione di Schroedinger per problemi di scattering su centro di forze fisso, essa è data asintoticamente da

$$\chi(r) \sim_{r \rightarrow \infty} A(E) e^{\frac{-r\sqrt{-2mE}}{\hbar}} + B(E) e^{\frac{r\sqrt{-2mE}}{\hbar}}$$

definita per ogni valore dell'energia E reale minore di zero . Se si estende la definizione ad E positivi si vede che $\sqrt{-E}$ assume valore $\pm i\sqrt{|E|}$ a seconda che si prolunghi dal semipiano inferiore piuttosto che da quello superiore. E' ben noto infatti che $\sqrt{-E}$ è una funzione polidroma , eseguendo infatti un giro completo di 2π nel piano delle E , $\sqrt{-E}$ compie un semigiro di π in modo tale che la funzione viene ad assumere valori diversi negli stessi punti. Il modo formale per evitare tale polidromia consiste nel tagliare il piano delle E lungo l'asse reale positivo, introducendo in questo modo un piano a due fogli (detto di Riemann) nel quale la radice risulta ad un sol valore.

Analizziamo allora le risonanze : è chiaro che affinché esse rappresentino correttamente stati metastabili occorre che la parte temporale della funzione d'onda presenti un andamento esponenziale decrescente, i.e.

$$e^{-\frac{1}{2}\Gamma t} = e^{-\frac{1}{2}\Gamma_0 t} e^{-\frac{\Gamma}{2}t}$$

ossia occorre fornire $E = E_0 - i\frac{\Gamma}{2}$ di una parte immaginaria negativa. Tali stati dovranno inoltre essere rappresentati asintoticamente da un'onda sferica divergente rappresentante cioè la particella decaduta o sfuggita ($\sim e^{ikr}$). Partiamo allora da valori positivi delle E , imponiamo l'annullarsi, per grandi r , dell'onda convergente : $B(E) = 0$ e cerchiamo di raggiungere il polo, situato nel quarto quadrante, mantenendo la condizione di asintoticità all'onda divergente per grandi r . E' chiaro che se eseguiamo un cammino attorno al punto di diramazione $E = 0$ (ossia se ci si muove sul foglio superiore o fisico) la radice cambia segno e l'onda divergente diventa convergente. Ci si deve allora muovere direttamente attraverso il taglio ossia andare sul secondo foglio di Riemann o foglio non fisico. Sviluppando $B_l(E)$, essendo l riferito al momento angolare, in un intorno di $E_0 - i\frac{\Gamma}{2}$ si ricava la fase :

$$e^{2i\delta_l} = \frac{B_l^*}{B_l} = \left(1 - \frac{i\Gamma}{E - E_0 + i\frac{\Gamma}{2}}\right) e^{2i\delta_l^0}$$

$e^{2i\delta_l^0}$ sta a significare la fase lontano dalla risonanza. Questo permette di valutare l'ampiezza di scattering (relativamente al termine con il valore di l al quale corrisponde E_0) :

$$f(\theta) = f^0(\theta) + c \frac{\frac{\Gamma}{2}}{E - E_0 + i\frac{\Gamma}{2}}$$

$f^0(\theta)$ rappresenta l'ampiezza lontano dalla risonanza (background) mentre il secondo dà appunto il polo sul secondo foglio di Riemann.

Esistono però delle analogie formali tra ampiezza di scattering e risolvete che permettono di caratterizzare le risonanze nella ricerca dei poli del valore di aspettazione del risolvete (o funzione di Green) dell'hamiltoniana.

Tutte queste considerazioni permettono la definizione di risonanza: se per un insieme denso di vettori il valore di aspettazione del risolvete

$$\langle \psi | (E - H)^{-1} \psi \rangle$$

ha un polo nel secondo foglio di Riemann per $E = E_0 - i\frac{\Gamma}{2}$ mentre la funzione $\langle \psi | (E - H_0)^{-1} \psi \rangle$ risulta ivi analitica diremo che in tale punto il sistema ha una risonanza e chiameremo Γ larghezza di risonanza.

La condizione sul risolvibile imperturbato è necessaria se si richiede che sia la perturbazione a creare il polo. Per quanto visto sopra solo in opportune condizioni si potrà poi identificare la larghezza Γ con l'ampiezza dei picchi nella sessione d'urto differenziale.

Definite le risonanze sorge la necessità della loro caratterizzazione e determinazione; ci proponiamo di fare ciò usando la teoria di Kato-Rellich che brevemente si può riassumere dicendo che sotto opportune ipotesi sulla perturbazione viene garantita esistenza e unicità di un autovalore perturbato "vicino" ad ogni autovalore discreto (e quindi isolato) non degenerare imperturbato, insieme alla analiticità nel parametro di accoppiamento. Tale autovalore può allora essere espresso nei termini di una serie convergente. Se l'autovalore è degenerare viene introdotta qualche complicazione ma il risultato non cambia.

Vediamo allora come trattare in modo perturbativo gli autovalori immersi nel continuo, visto l'impossibilità di applicare direttamente la teoria (a causa della non isolatezza). Il metodo è quello delle dilatazioni analitiche.

3. DILATAZIONI ANALITICHE

Si consideri il gruppo ad un parametro unitario delle trasformazioni da $L^2(\mathbb{R}^{3n-3})$ in sé :

$$(U(\theta)f)(r) = e^{\frac{(3n-3)\theta}{2}} f(e^\theta r)$$

ove n si riferisce ad un generico sistema ad n corpi (nel caso dell'atomo di Elio $n = 3$) ; e la classe C_α dei potenziali a due corpi relativamente compatti rispetto a Δ tali che se $V \in C_\alpha$ allora

$$V(\theta) \equiv U(\theta)VU(\theta)^{-1}$$

è una famiglia analitica nella striscia $|Im \theta| < \alpha$. (Si deve considerare a tal fine il prolungamento analitico essendo $U(\theta)$ stato definito inizialmente solo per θ reali).

Definiamo anche il concetto di soglia : è possibile dividere l'insieme $\{0, \dots, n-1\}$ in $1 < k < n$ sottoinsiemi disgiunti e valutare l'hamiltoniana con il centro di massa rimosso all'interno di ogni cluster. Da queste possiamo valutare le energie degli stati legati ; la somma delle energie su tutti i cluster è detta soglia. Nel caso che ci interessa ($n = 3$) sono possibili i seguenti cluster $(e+n, e)$, $(e+e, n)$ distinti, di cui però solo il primo origina stati legati (atomo di idrogeno) : questo significa che le soglie sono $\{0\} \cup \{-\frac{1}{n^2}, n \geq 1\}$ (lo zero è assunto per definizione).

Queste definizioni sono necessarie per capire il contenuto dei teoremi di Baslev - Combes sullo spettro di $H(\theta) \equiv U(\theta) H U(\theta)^{-1} = e^{-2\theta} T + V(\theta)$ essendo T l'operatore relativo all'energia cinetica.

I Teorema B - C

Lo spettro $\sigma(\theta)$ di $H(\theta)$ è costituito da una parte essenziale che è l'unione di tutte le semirette staccantesi dalle soglie con un angolo di apertura di $-2 \operatorname{Im} \theta$ e da una parte discreta di autovalori di finita molteplicità. Inoltre soglie ed autovalori reali di H (si rammenti che è autoaggiunto a differenza di $H(\theta)$) rimangono soglie ed autovalori reali di $H(\theta)$: il che è come dire che la θ -dilatazione non muove gli autovalori ma solo lo spettro continuo, così che quelli immersi in esso rimangono isolati. Inoltre $\sigma(\theta)$ dipende solo da $\operatorname{Im} \theta$; tutti gli autovalori e le soglie complessi di $H(\theta)$ giacciono nel settore delimitato dalla semiretta staccantesi dalla soglia minima e dalla semiretta reale nella direzione dei valori positivi; inoltre se scegliamo $\operatorname{Im} \theta \sim \operatorname{Im} \theta'$ allora gli autovalori in $\sigma_{disc}(\theta)$ risultano in $\sigma_{disc}(\theta')$ (proprietà di continuità).

E' chiaro allora come la θ -dilatazione rendendo isolati gli autovalori nel continuo ne permetta una trattazione perturbativa alla Kato-Rellich. Enunciamo però prima un secondo importante risultato:

II Teorema B - C

Sia $\mathcal{N}_\alpha$ l'insieme dei vettori per cui $U(\theta)\psi$ (per ogni vettore ψ nello spazio di definizione) possa essere prolungato analiticamente nella striscia $|\operatorname{Im} \theta| < \alpha$ (questo insieme risulta denso nello spazio di definizione), e sia W una opportuna perturbazione in $\mathcal{C}_\alpha$.

Allora $\forall \psi \in \mathcal{N}_\alpha$ la funzione $\langle \psi | (H - z)^{-1} \psi \rangle$ ove $H = T + W$ può essere prolungata analiticamente sull'unione dei complementi degli spettri di $H(\theta)$ (dunque le singolarità sono ristrette agli autovalori reali o complessi e alle soglie).

Nel caso dell'atomo di elio lo spettro di $H_0(\theta)$ sarà:

$$\sigma(\theta) = \bigcup_n \left\{ -\frac{1}{n^2} + \lambda e^{-2\theta}, \lambda \geq 0 \right\} \cup \left\{ \lambda e^{-2\theta}, \lambda \geq 0 \right\} \cup \left\{ -\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}, n, m \geq 2 \right\}$$

Tutto è allora pronto per "accendere" l'interazione elettrone - elettrone :

$$\beta W \equiv \frac{\beta}{|r_1 - r_2|}$$

Come ultima cosa facciamo notare che gli autovalori immersi nel continuo $E_{n,m}$ sono degeneri ; restringendosi però in opportuni sottospazi, tramite l'uso delle costanti del moto, una tale difficoltà può essere superata e risulta allora applicabile l'usuale teoria indipendente dal tempo per livelli non degeneri. Ciò garantisce l'esistenza di un autovalore $E(\theta, \beta)$ in un intorno di quello imperturbato, analitico in β ed in θ per quanto visto sopra. Si osservi innanzitutto che per effetto della perturbazione l'autovalore imperturbato non può spostarsi nel semipiano superiore (del piano complesso delle energie) se $\beta \in \mathbb{R}$; deve cioè essere $\text{Im } E(\theta, \beta) \leq 0$. Infatti fissato $\beta \in \mathbb{R}$ $E(\theta, \beta)$ è analitico in θ ed indipendente da $\text{Re } \theta$ (I Teo. B-C), ossia indipendente da θ . Questo significa che se fosse $\text{Im } \theta > 0$ lo sarebbe anche per $\text{Im } \theta \rightarrow 0$ il che è assurdo poichè H_0 è autoaggiunto ed ha solo autovalori reali. Ciò che impedisce questo ragionamento se $\text{Im } E(\theta, \beta) \leq 0$ è il fatto che nel far tendere $\text{Im } \theta \rightarrow 0$ le semirette dello spettro essenziale si appiattiscono verso l'asse reale finendo per investire l'autovalore rendendolo così non isolato.

Abbiamo allora trovato degli autovalori complessi di $H(\theta, \beta)$ per β reale nel secondo foglio di Riemann : essi sono i poli del risolvete (II Teo. B-C). In particolare

$$E(\beta) = E_0 + \beta a_1 + \beta^2 a_2 + o(\beta^3)$$

ove E_0 è reale e dovendo essere $\text{Im } E(\theta, \beta) < 0$ se β è reale, sarà $\text{Im } (a_1) = 0$ (in caso contrario cambierebbe segno nel passare da β positivi a β negativi) . Dunque il primo contributo non nullo proviene dal termine al secondo ordine ; porremo allora

$$\text{Im } E(\beta) \approx a_2$$

ove a_2 è dato dallo sviluppo della serie di Rayleigh - Schroedinger (facendo attenzione al fatto che $H_0(\theta)$ non è autoaggiunto) , esplicitamente :

$$a_2 = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|E_0 - E| = \epsilon} \frac{dE}{E_0 - E} \langle \Omega_0(\theta) | W(\theta) (H_0(\theta) - E)^{-1} W(\theta) \Omega_0(\theta) \rangle$$

dove H_0 , Ω_0 , E_0 sono relativi al problema imperturbato:

$$H_0(\theta) \Omega_0(\theta) = E_0 \Omega_0(\theta)$$

La funzione entro $\langle \dots \rangle$ è analitica in un intorno di E_0 ad eccezione che nel punto E_0 stesso. Dunque se si sottrae il residuo nel polo si ottiene una funzione $f_\theta(E)$ analitica in E_0 :

$$f_\theta(E) = \langle \Omega_0(\theta) | W(\theta) (H_0(\theta) - E)^{-1} W(\theta) \Omega_0(\theta) \rangle -$$

$$-\frac{1}{E_0 - E} |\langle \Omega_0(\theta) | W(\theta) \Omega_0(\theta) \rangle|^2$$

Dalla formula integrale di Cauchy

$$a_2 = f_\theta(E_0)$$

inoltre

$$\text{Im } a_2 = \frac{a_2 - a_2^*}{2i}$$

dunque nel limite $\theta \rightarrow 0$ risulta (pur di prendere $\text{Im } E > 0$ la f è definita anche per $\text{Im } \theta = 0$) :

$$\begin{aligned} \text{Im } a_2 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2i} [\langle \Omega_0 | W(H_0 - E_0 - i\epsilon)^{-1} W \Omega_0 \rangle - \\ &\quad - \langle \Omega_0 | W(H_0 - E_0 + i\epsilon)^{-1} W \Omega_0 \rangle] - \\ &\quad - \frac{1}{2i} [(E - E_0 - i\epsilon)^{-1} - (E - E_0 + i\epsilon)^{-1}] |\langle \Omega_0 | W \Omega_0 \rangle|^2 \end{aligned}$$

Introduciamo ora il proiettore

$$\tilde{P}(E) \equiv P_{(-\infty, E) \setminus \{E_0\}}$$

Si verifica che $\langle \Omega_0 | W \tilde{P}(E) W \Omega_0 \rangle$ è analitica in E_0 e dunque risulta :

$$\text{Im } a_2 = \frac{1}{\pi} \frac{d}{dE} \langle \Omega_0 | W \tilde{P}(E) W \Omega_0 \rangle \Big|_{E=E_0}$$

Con le convenzioni da noi adottate, la regola d'oro di Fermi assume la forma :

$$\Gamma = 2\pi \frac{d}{dE} \langle \Omega_0 | W \tilde{P}(E) W \Omega_0 \rangle \Big|_{E=E_0}$$

Questa coincide con l'usuale espressione ricavabile dalla teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo, in cui si ottiene

$$\Gamma = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P^1(t)}{t} = 2\pi |\langle \phi(E) | W \Omega_n \rangle|^2 \Big|_{E=E_n}$$

ove $P^1(t)$ è la probabilità di transizione dal livello n -esimo, identificato dall'autofunzione Ω_n al primo ordine nella perturbazione. Infatti sviluppando il proiettore $\tilde{P}(E)$ sulle "autofunzioni" del continuo $\phi(E)$:

$$\tilde{P}(E) = \int_{-\infty}^E dE' \langle \phi(E') | \cdot \rangle \phi(E')$$

si ha

$$\Gamma = 2\pi \frac{d}{dE} \langle \Omega_n | W \tilde{P}(E) W \Omega_n \rangle \Big|_{E=E_n} = 2\pi |\langle \phi(E) | W \Omega_n \rangle|^2 \Big|_{E=E_n}$$

Abbiamo allora dato una caratterizzazione precisa di larghezza di una risonanza, ricavabile nell'ambito della teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo. Questo come già detto garantisce analiticità e convergenza della serie oltre a risultare l'unico modo matematicamente ben definito per introdurre il concetto di stato metastabile nell'ambito della meccanica quantistica non relativistica. Questa grandezza (Γ) può inoltre essere messa in relazione, sotto opportune ipotesi, con la larghezza in energia dei picchi nella sezione d'urto e quindi, in definitiva, con il tempo di vita media di uno stato metastabile. In conclusione siamo allora riusciti a determinare, a partire dall'Hamiltoniana, un operatore non autoaggiunto i cui autovalori complessi sono strettamente collegati alle risonanze. Ciò acquista valore dal punto di vista numerico, attraverso il calcolo degli stessi autovalori, e da quello analitico poichè, come visto sopra, ci ha permesso di ricavare in modo formalmente corretto la regola d'oro di Fermi.

4. BIBLIOGRAFIA

- (1) Reed - Simon, Analysis of operator (vol. IV), cap XII
- (2) B. Simon, Ann. Math. 97 (1973) 247-274
- (3) Landau - Lifshitz, Quantum Mechanics: Non Relativistic Theory (pp 140-153)
- (4) Aguilar-Combes, Commun. Math. Phys. 22, 1971, 269
- (5) Balslev-Combes, Commun. Math. Phys. 22, 1971, 280
- (6) B. Simon, Phys. Lett. 36A, 1971, 23
- (7) Kato, Prog. of Theor. Phys. IV, No 4, Oct.-Dec. 1949, 514