

# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

## Tecniche Algebriche nella Diagonalizzazione di Hamiltoniane Quantistiche

Relatore

Prof./Dr. Lorenzo Fortunato

Laureando

Giulio Malenza

Anno Accademico 2017/2018



# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>v</b>
<b>1 Algebra Heisenberg-Weyl</b>	<b>1</b>
<b>2 Oscillatore armonico bidimensionale</b>	<b>3</b>
2.1 Caso anisotropo . . . . .	3
2.2 Caso isotropo . . . . .	4
<b>3 Oscillatore isotropo perturbato</b>	<b>7</b>
3.1 Analisi del potenziale . . . . .	7
3.2 Autovalori . . . . .	9
3.3 Analisi degli autovalori . . . . .	12
3.4 Autofunzioni . . . . .	13
<b>4 Applicazioni</b>	<b>15</b>
4.1 Modello di Nilsson per nuclei deformati . . . . .	15
4.2 Quantum Dots . . . . .	16
<b>5 Conclusioni</b>	<b>19</b>



# Introduzione

L'oscillatore armonico quantistico è uno dei modelli più importanti e studiati della Fisica del '900. Prendendo in considerazione l'Hamiltoniana che descrive tale sistema, si vuole andare a ricavare e analizzare gli autostati e le autofunzioni quando si inserisce, all'interno del potenziale, un termine perturbativo il cui effetto, come si vedrà nei prossimi capitoli, sarà quello di rimuovere la degenerazione degli stati del sistema.

Inizialmente abbiamo dato la definizione di algebra, con particolare riferimento all'algebra di Heisenberg-Weyl, successivamente sono state descritte le tre rappresentazioni che quest'ultima ammette, utili a costruire lo spazio vettoriale degli stati del sistema che si andrà ad utilizzare.

Abbiamo applicato questi concetti allo studio dell'oscillatore armonico bidimensionale, nel caso anisotropo e isotropo, in assenza di perturbazione. Quindi definendo una coppia di operatori di creazione e distruzione si sono ricavati analiticamente gli autovalori e gli autovettori.

Prendendo in considerazione anche il termine perturbativo abbiamo analizzato la forma del potenziale al variare del parametro di deformazione  $\alpha$ . Poiché aggiungendo quest'ultimo termine non si riesce a risolvere analiticamente l'equazione di Schrödinger, siamo andati a ricavare gli autostati in modo algebrico attraverso metodi computazionali, pertanto abbiamo analizzato la loro convergenza e il loro splitting al variare del parametro e della dimensione dello spazio vettoriale. Infine abbiamo costruito l'autofunzione relativa allo stato fondamentale del nostro sistema e siamo andati ad analizzarne il comportamento, sempre al variare di  $\alpha$ .

Concludendo abbiamo esposto brevemente due applicazioni in cui si può applicare quanto descritto precedentemente: il Modello di Nilsson, nel campo della fisica nucleare, e i Quantum Dots, nel campo della fisica della materia.



# Capitolo 1

## Algebra Heisenberg-Weyl

Diamo la definizione di Algebra di Lie [1]:

**Definizione 1.** Uno spazio vettoriale  $L$  su un campo  $F$ , con un'operazione  $L \times L \rightarrow L$ , denotata  $[X, Y]$  e chiamata commutatore di  $X$  e  $Y$ , è chiamato *Algebra di Lie* su  $F$  se i seguenti assiomi sono soddisfatti:

- L'operazione è bilineare;
- $[X, X] = 0 \forall X \in L$ ;
- Vale l'identità di Jacobi:  $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0 \forall X, Y, Z \in L$ ;

Dove con bilinearità intendiamo:

$$[aX + bY, Z] = a[X, Z] + b[Y, Z], \quad [X, bY + cZ] = b[X, Y] + c[X, Z]. \quad (1.1)$$

Ora possiamo introdurre l'algebra di Heisenberg-Weyl definita da tre operatori  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$ ,  $\hat{Z}$ , chiamati generatori dell'algebra, che soddisfano le seguenti relazioni:

$$[\hat{X}, \hat{Y}] = \hat{Z}, \quad [\hat{X}, \hat{Z}] = 0, \quad [\hat{Y}, \hat{Z}] = 0. \quad (1.2)$$

Essa soddisfa tutti gli assiomi della definizione 1, quindi è un'algebra di Lie.

Per caratterizzare l'algebra di Heisenberg-Weyl abbiamo bisogno del concetto di rappresentazione di un'algebra:

**Definizione 2.** Una rappresentazione di un'algebra di Lie,  $A$ , è un omomorfismo:  $\rho: A \rightarrow L(V)$  dall'algebra allo spazio degli operatori su uno spazio vettoriale  $V$  tale che:

$$\rho([S, T]) = [\rho(S), \rho(T)]. \quad (1.3)$$

In questo modo possiamo contraddistinguere l'algebra di Heisenberg-Weyl attraverso tre possibili rappresentazioni [2], che soddisfano le relazioni 1.2 :

### 1. Rappresentazione Matriciale:

Basata sulle matrici reali  $3 \times 3$  definite come:

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Y} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Z} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

## 2. Rappresentazione Differenziale:

Definita dagli operatori differenziali  $C^\infty(\mathbb{R}^3) \rightarrow C^\infty(\mathbb{R}^3)$ :

$$\hat{X} = \partial_x - \frac{1}{2}y\partial_z, \quad \hat{Y} = \partial_y + \frac{1}{2}x\partial_z, \quad \hat{Z} = \partial_z. \quad (1.4)$$

## 3. Rappresentazione tramite operatori di creazione e distruzione:

Per descrivere questa terza rappresentazione bisogna introdurre l'operatore  $\hat{N} = \hat{Y}\hat{X}$  che soddisfa:

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{Y}] &= [\hat{Y}\hat{X}, \hat{Y}] = \hat{Y}[\hat{X}, \hat{Y}] + [\hat{Y}, \hat{Y}]\hat{X} = \hat{Z}\hat{Y}, \\ [\hat{N}, \hat{X}] &= [\hat{Y}\hat{X}, \hat{X}] = \hat{Y}[\hat{X}, \hat{X}] + [\hat{Y}, \hat{X}]\hat{X} = -\hat{Z}\hat{X}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Così facendo possiamo supporre che esista un vettore  $v_0$  chiamato stato di vuoto tale che:  $\hat{X}v_0 = 0$ ; a partire da questo possiamo costruire gli altri stati iterativamente come:

$$v_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{Y}^n v_0. \quad (1.6)$$

Andiamo a dimostrare due proprietà dell'algebra di Heisenberg-Weyl:

1.  $[\hat{Y}, \hat{X}^n] = -n\hat{Z}\hat{X}^{n-1}$ ,
2.  $[\hat{X}, \hat{Y}^n] = n\hat{Z}\hat{Y}^{n-1}$ .

Dimostrazione:

$$\begin{aligned} [\hat{Y}, \hat{X}^n] &= [\hat{Y}, \hat{X}\hat{X}^{n-1}] = \hat{X}[\hat{Y}, \hat{X}^{n-1}] + [\hat{Y}, \hat{X}]\hat{X}^{n-1} = \hat{X}[\hat{Y}, \hat{X}^{n-1}] - \hat{Z}\hat{X}^{n-1} \\ &= \hat{X}[\hat{Y}, \hat{X}\hat{X}^{n-2}] - \hat{Z}\hat{X}^{n-1} = \hat{X}^2[\hat{Y}, \hat{X}^{n-2}] + \hat{X}[\hat{Y}, \hat{X}]\hat{X}^{n-2} - \hat{Z}\hat{X}^{n-1} \\ &= \hat{X}^2[\hat{Y}, \hat{X}^{n-2}] - \hat{X}\hat{Z}\hat{X}^{n-2} - \hat{Z}\hat{X}^{n-1}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Dalle regole di commutazione 1.2 possiamo notare che  $\hat{Z}\hat{X} = \hat{X}\hat{Z}$  quindi il termine  $\hat{X}\hat{Z}\hat{X}^{n-2}$  è uguale a  $\hat{Z}\hat{X}\hat{X}^{n-2}$  che è equivalente a  $\hat{Z}\hat{X}^{n-1}$ . Di conseguenza l'espressione si riduce a:

$$[\hat{Y}, \hat{X}^n] = \hat{X}^2[\hat{Y}, \hat{X}^{n-2}] - 2\hat{Z}\hat{X}^{n-1}. \quad (1.8)$$

Procedendo per induzione su n si conclude:

$$[\hat{Y}, \hat{X}^n] = -n\hat{Z}\hat{X}^{n-1}. \quad (1.9)$$

La seconda proprietà si dimostra analogamente.

Utilizzando la definizione 1.6 e le proprietà appena dimostrate è facile mostrare che:

$$\begin{aligned} \hat{Y}v_n &= \sqrt{n+1}v_{n+1}, & n \geq 0. \\ \hat{X}v_n &= \sqrt{n}\hat{Z}v_{n-1}, & n \geq 1. \end{aligned} \quad (1.10)$$

da ciò segue  $\hat{N}v_n = n\hat{Z}v_n$ ,  $n \geq 0$ .

Se, inoltre, si verifica che:  $\hat{Y} = \hat{X}^\dagger$  e  $\hat{Z} = \hat{I}$ , allora i vettori  $v_n$  sono ortonormali, ossia  $(v_n, v_m) = \delta_{nm}$ . Lo spazio vettoriale generato da  $\text{span}(v_n | n \geq 0)$  è chiamato Spazio di Fock, gli operatori  $\hat{X}$ ,  $\hat{X}^\dagger$  e  $\hat{N}$  sono rispettivamente gli operatori di distruzione, di creazione e l'operatore numero.

Utilizzeremo questa terza rappresentazione per andare a studiare il sistema dell'oscillatore armonico quantistico bidimensionale.

## Capitolo 2

# Oscillatore armonico bidimensionale

### 2.1 Caso anisotropo

Prendiamo in considerazione l'Hamiltoniana dell'oscillatore armonico bidimensionale [3]:

$$H(p_x, p_y, q_x, q_y) = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega_x^2q_x^2 + \frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2q_y^2, \quad (2.1)$$

dove  $p_x, p_y$  sono rispettivamente il momento coniugato alle coordinate  $q_x$  e  $q_y$ , che soddisfano le relazioni algebriche:

$$[q_x, p_x] = i\hbar, \quad [q_y, p_y] = i\hbar. \quad (2.2)$$

Si vede facilmente che essa è composta dalla somma di due oscillatori armonici unidimensionali, quindi può essere riscritta come:

$$H = \sum_{n=x,y} H_n = \sum_{n=x,y} \frac{1}{2m} [p_n^2 + m^2\omega_n^2q_n^2]. \quad (2.3)$$

Utilizzando le conoscenze sull'oscillatore armonico unidimensionale, possiamo introdurre una coppia di operatori di creazione e distruzione nelle variabili  $q_x$  e  $q_y$  definiti come:

$$\hat{a}_i^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_i}{2\hbar}}q_i - i\sqrt{\frac{m\omega_i\hbar}{2}}p_i, \quad \hat{a}_i = \sqrt{\frac{m\omega_i}{2\hbar}}q_i + i\sqrt{\frac{m\omega_i\hbar}{2}}p_i, \quad i = x, y. \quad (2.4)$$

Facendo il cambio di variabili:

$$Q_i = \sqrt{\frac{m\omega_i}{\hbar}}q_i, \quad P_i = \sqrt{\frac{1}{m\omega_i\hbar}}p_i. \quad (2.5)$$

gli operatori si possono riscrivere come:

$$\hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_i - iP_i), \quad \hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_i + iP_i), \quad (2.6)$$

Riportiamo qui anche le trasformazioni inverse che saranno utili nel prossimo capitolo:

$$Q_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger), \quad P_i = -i\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger). \quad (2.7)$$

A partire dalle relazioni 2.2 si può mostrare che  $\hat{a}_i^\dagger$  e  $\hat{a}_i$  soddisfano:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0. \quad (2.8)$$

Queste relazioni sono utili perché permettono di riscrivere l'Hamiltoniana nella forma:

$$\hat{H} = \sum_{n=x,y} \hbar\omega_n \left[ \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{1}{2} \right]. \quad (2.9)$$

Per fare agire quest'ultima sugli stati di base del nostro spazio vettoriale, è utile ricordare le relazioni 1.10 in base alle quali:

$$\hat{a}_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle, \quad \hat{a}_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle. \quad (2.10)$$

In questo modo possiamo ricavare analiticamente gli autovalori  $E_{n_x, n_y}$  e gli autovettori  $\psi_{n_x, n_y}$  dell'oscillatore anisotropo, i quali risultano essere:

$$\hat{H}\psi_{n_x, n_y} = E_{n_x, n_y}\psi_{n_x, n_y} = \left[ \hbar\omega_x \left( n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \right] \psi_{n_x, n_y}, \quad (2.11)$$

dove

$$\psi_{n_x, n_y} = \frac{(a_1^\dagger)^{n_x} (a_2^\dagger)^{n_y}}{\sqrt{n_x! n_y!}} \psi_0, \quad (2.12)$$

e  $a_i \psi_0 = 0$ .

Dall'equazione 2.11 possiamo notare che c'è una corrispondenza biunivoca tra autovalori e autovettori eccetto il caso in cui  $\omega_x$  e  $\omega_y$  siano commensurabili ossia il loro rapporto sia un numero razionale; in questo caso si parla di degenerazione accidentale.

## 2.2 Caso isotropo

Andiamo ad analizzare il caso in cui  $\omega_x = \omega_y = \omega$ , l'Hamiltoniana prende la forma:

$$H = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 (q_x^2 + q_y^2). \quad (2.13)$$

In questo caso utilizzando gli stessi operatori di creazione e distruzione del caso precedente e facendo lo stesso cambio di variabili si arriva a scrivere l'Hamiltoniana nella seguente forma:

$$\hat{H} = \hbar\omega \sum_{n=x,y} \left[ \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{1}{2} \right]. \quad (2.14)$$

Da questa, ripercorrendo lo stesso procedimento fatto nel caso anisotropo, possiamo ricavare gli autovalori che assumeranno la forma:

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\omega \left[ \left( n_x + \frac{1}{2} \right) + \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \right] = \hbar\omega(N + 1), \quad N = n_x + n_y. \quad (2.15)$$

Quest'equazione mostra che gli autovalori dipendono dalla somma di  $n_x$  e  $n_y$ , quindi, eccetto lo stato con  $N = 0$ , tutti gli altri stati sono degeneri. Consideriamo, per esempio, lo stato  $N = 1$ , esso può essere ottenuto con  $n_x = 1$  e  $n_y = 0$  ma anche con  $n_x = 0$  e  $n_y = 1$ .

Assegnato  $N$ , il numero totale  $k_{tot}$  di stati degeneri sarà dato da:

$$k_{tot} = \sum_{n=0}^N n + 1. \quad (2.16)$$

Quindi in questo caso, a differenza del caso anisotropo in cui si esclude la degenerazione accidentale, si perde la corrispondenza biunivoca tra autovalori e autovettori. Questo significa che ad un autovalore possono essere associati più autovettori.

Per rimuovere questa degenerazione possiamo andare a vedere lo spettro dell'Hamiltoniana dell'oscillatore armonico bidimensionale nel caso isotropo introducendo un potenziale di perturbazione del tipo

$$V(q_x, q_y) = \alpha q_x q_y, \quad (2.17)$$

con  $\alpha$  una costante.



## Capitolo 3

# Oscillatore isotropo perturbato

In questo capitolo andremo ad analizzare, al variare del parametro  $\alpha$ , gli autovalori dell'Hamiltoniana:

$$H = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q_x^2 + \frac{1}{2m}p_y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q_y^2 + \alpha q_x q_y. \quad (3.1)$$

### 3.1 Analisi del potenziale

Consideriamo il termine potenziale e, per semplicità, scegliamo  $\frac{1}{2}m\omega^2 = 1MeV$ :

$$V(q_x, q_y) = q_x^2 + q_y^2 + \alpha q_x q_y. \quad (3.2)$$

L'analisi di questo termine è importante perché ci permette di fare delle previsioni sul comportamento degli autovalori. Per questo motivo, attraverso il software *Mathematica* siamo andati a studiarne l'andamento prendendo vari valori del parametro.

Di seguito sono riportati i grafici 3D per  $\alpha = 1, 2, 4$  e i Contour Plot:

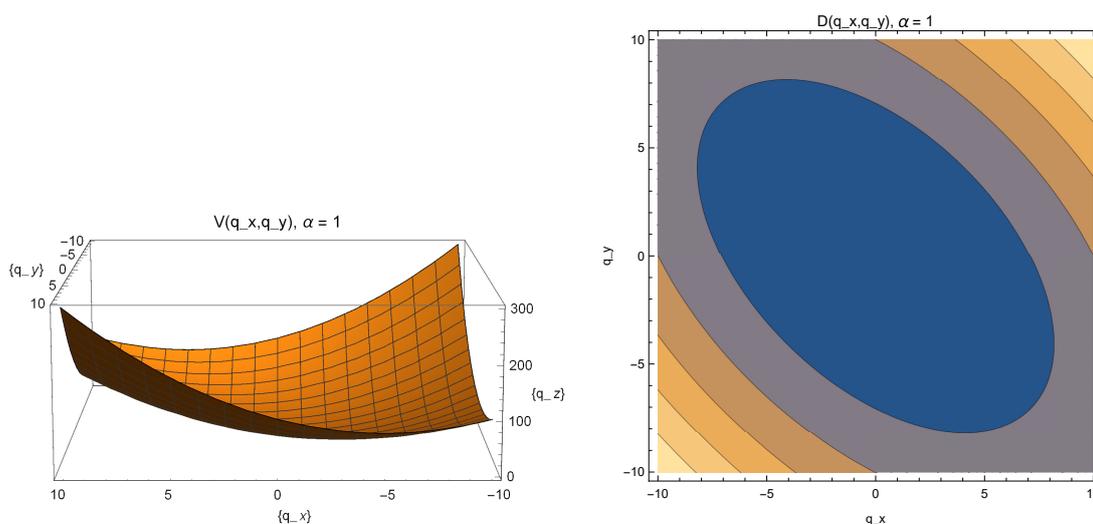


Figura 3.1: Grafici Potenziale ( $\alpha = 1$ )

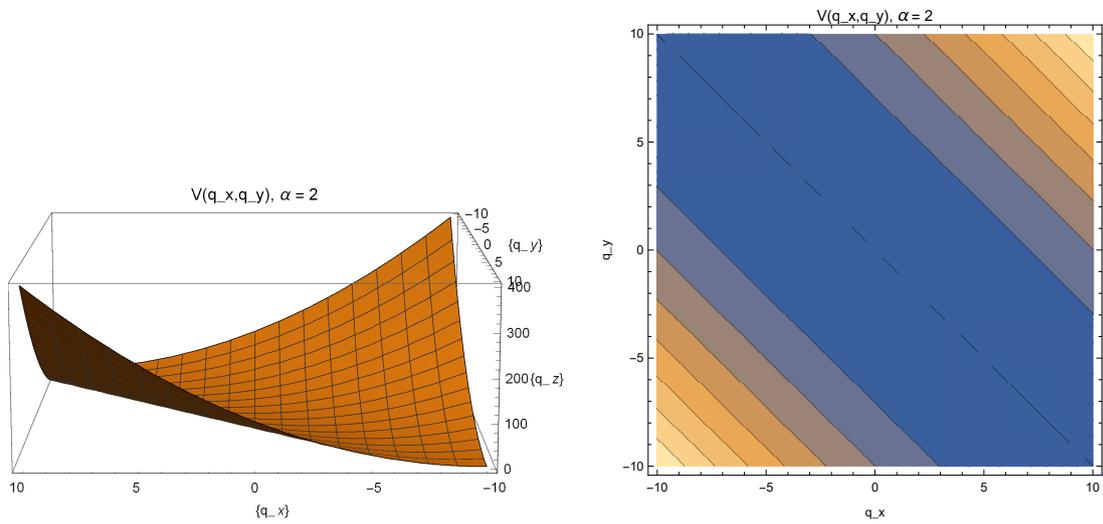


Figura 3.2: Grafici Potenziale ( $\alpha = 2$ )

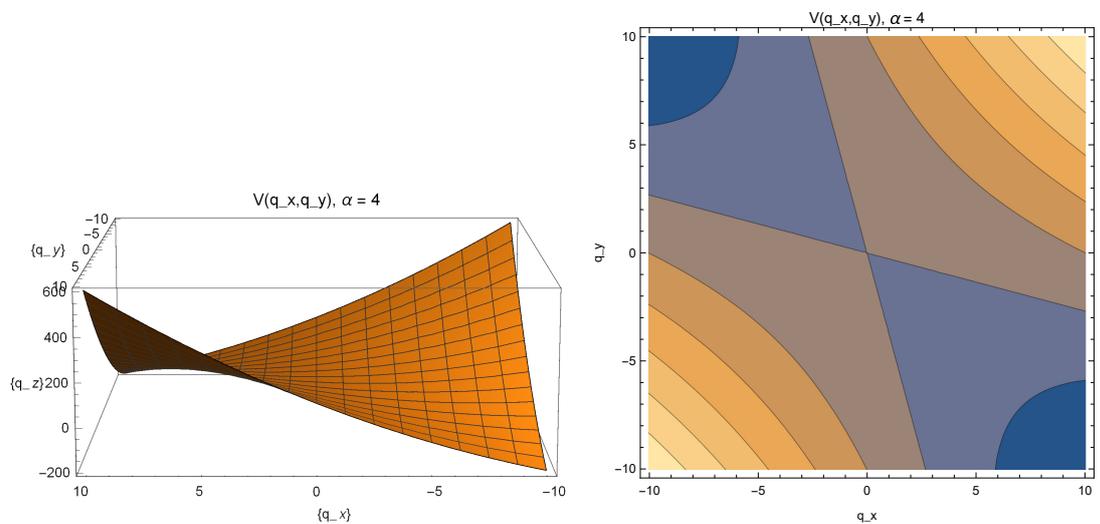


Figura 3.3: Grafici Potenziale ( $\alpha = 4$ )

Dai grafici possiamo notare come si deforma il potenziale al variare di  $\alpha$ . In assenza di deformazione,  $\alpha = 0$ , questo assume la forma:  $V(q_x, q_y) = q_x^2 + q_y^2$ , che rappresenta un paraboloide centrato in  $(0, 0)$ . Questo è il caso che possiamo chiamare “sferico”.

Per  $\alpha = 1$  il paraboloide si deforma e, lungo la diagonale  $q_y = -q_x$ , assume una forma schiacciata come si vede in Figura 3.1. Il minimo si trova però ancora nell’origine, e quindi siamo ancora in un caso “sferico”.

Per  $\alpha = 2$  si ha un caso particolare, con i valori scelti, in cui possiamo riscrivere il potenziale come:

$$V(q_x, q_y) = q_x^2 + q_y^2 + 2q_x q_y = (q_x + q_y)^2. \quad (3.3)$$

Da questa possiamo vedere che lungo la stessa diagonale, il potenziale si annulla e corrispondentemente il grafico assumerà la forma in Figura 3.2. Infine, quando  $\alpha > 2$ , Figura 3.3, il potenziale si deforma in modo tale che lungo  $q_y = -q_x$  assumerà valori negativi. Da qui in poi il minimo non è più nell’origine, ma si trova per un valore finito e simmetrico rispetto ad essa.

Analizzando il potenziale come funzione in due variabili possiamo andare a studiare i punti critici andando a calcolare dove si annullano le derivate parziali  $\partial_{q_x}$  e  $\partial_{q_y}$ .

$$\partial_{q_x} = 2q_x + \alpha q_y = 0, \quad \partial_{q_y} = 2q_y + \alpha q_x = 0. \quad (3.4)$$

Da questo risulta che per  $\alpha \neq \pm 2$  l'unico punto critico è  $(0, 0)$  mentre per  $\alpha = \pm 2$  tutti i punti sulle rette  $y = \mp x$  sono critici. Per andare a studiare la natura di questi abbiamo calcolato l'Hessiana:

$$\begin{bmatrix} 2 & \alpha \\ \alpha & 2 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Ricavandoci gli autovalori,  $\lambda_{1,2} = 2 \pm \alpha$ , possiamo distinguere 3 casi:

1. Per  $|\alpha| = 2$ ,  $\lambda_1 = 4 \vee \lambda_2 = 0$ : in questo caso l'Hessiana è semidefinita e non possiamo dire nulla sulla natura dei punti critici.
2. Per  $|\alpha| > 2$ ,  $\lambda_1 > 0 \vee \lambda_2 < 0$ : avendo un autovalore negativo e uno positivo l'Hessiana è indefinita quindi  $(0, 0)$  è un punto di sella.
3. Per  $0 < |\alpha| < 2$ ,  $\lambda_1 > 0 \vee \lambda_2 > 0$ : l'Hessiana è definita positiva perciò  $(0, 0)$  è un punto di minimo.

## 3.2 Autovalori

Utilizzando *Mathematica* abbiamo costruito un programma che a partire dalla scelta del numero di occupazione  $N$ , valuta le coppie  $(n_x, n_y)$  tali che:  $N = n_x + n_y$ . Queste coppie, il cui numero totale è  $k_{tot}$ , definito in 2.16, formano la base dello spazio vettoriale degli stati del sistema.

La scelta di  $N$  non è banale, infatti esso specifica indirettamente la dimensione dello spazio vettoriale. Normalmente questa dovrebbe essere infinita così come la dimensione delle matrici con cui lavoriamo, tuttavia il nostro approccio computazionale non ci permette di costruire una base infinito dimensionale. Per questo motivo sono inevitabili errori di arrotondamento e troncamento da cui sono affette le matrici. Inoltre, poiché per determinare gli autovalori dell'Hamiltoniana combiniamo queste tramite prodotti matriciali, questi errori si diffondono e potrebbero diventare rilevanti.

Come abbiamo visto nel capitolo precedente la nostra Hamiltoniana può essere riscritta in termini degli operatori di creazione e distruzione 2.6. Quindi con la base creata andiamo a costruire tali operatori che saranno rappresentati da matrici di dimensione  $k_{tot} \times k_{tot}$ . Ricordiamo che per quanto riguarda la parte imperturbata abbiamo già ricavato analiticamente gli autovalori 2.15.

Utilizzando le trasformazioni 2.7 la parte perturbativa può essere riscritta come:

$$V(q_x, q_y) = \frac{\alpha}{4}(\hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x)(\hat{a}_y^\dagger + \hat{a}_y). \quad (3.6)$$

Di conseguenza, poiché che  $a_i$  e  $a_i^\dagger$  agiscono sulla base dello spazio vettoriale nel modo evidenziato dalle relazioni 2.10, possiamo valutare gli elementi di matrice del termine perturbativo nel seguente modo:

$$\begin{aligned} \langle n'_x, n'_y | V(q_x, q_y) | n_x, n_y \rangle &= \frac{\alpha}{4} (\langle n'_x | \hat{a}_x^\dagger | n_x \rangle + \langle n'_x | \hat{a}_x | n_x \rangle) (\langle n'_y | \hat{a}_y^\dagger | n_y \rangle + \langle n'_y | \hat{a}_y | n_y \rangle) = \\ &= \frac{\alpha}{4} (\sqrt{n_x + 1} \delta_{n'_x, n_x+1} + \sqrt{n_x} \delta_{n'_x, n_x-1}) (\sqrt{n_y + 1} \delta_{n'_y, n_y+1} + \sqrt{n_y} \delta_{n'_y, n_y-1}). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Ove  $\delta_{n,m}$  identifica la delta di Kronecker.

Decidiamo di analizzare la convergenza dei primi tre autovalori, corrispondenti a  $n = 0, 1, 2$ , al variare della dimensione della base e del parametro  $\alpha$ . Mentre per il primo non si ha degenerazione, per il secondo e terzo si hanno rispettivamente due e tre stati degeneri.

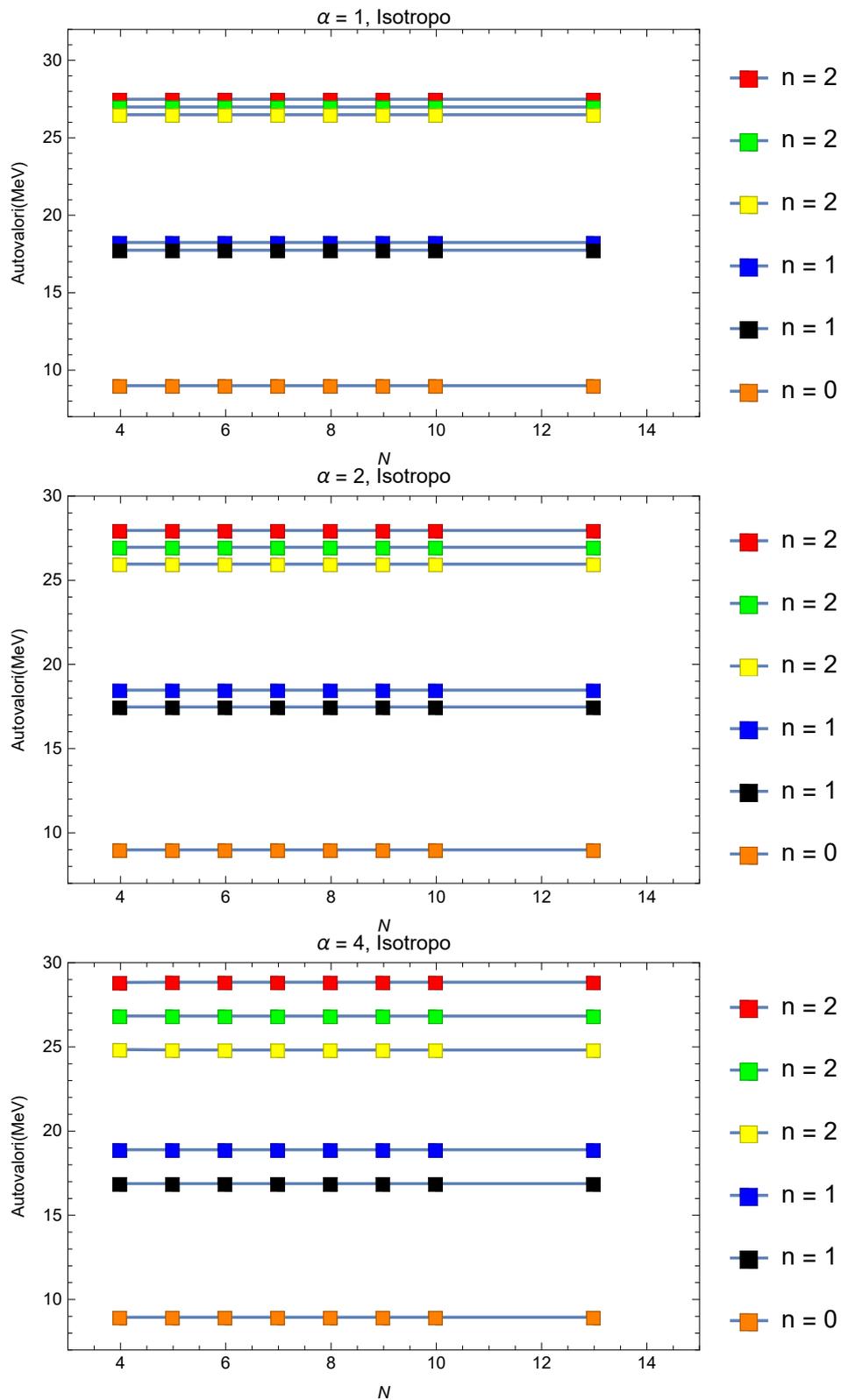


Figura 3.4: Autovalori ( $\alpha = 1, 2, 4$ )

Dai grafici possiamo notare che al crescere di  $N$  e quindi della dimensione della base, gli autovalori convergono ad un valore sempre più preciso. In particolare si osserva che, per valori del parametro abbastanza piccoli, per  $N = 6$  gli autovalori convergono in modo molto accurato.

Tale valore non è univoco. Infatti quando aumentiamo il valore di  $\alpha$  la deformazione si amplia e gli autovalori convergono, ma la dimensione della base scelta precedentemente potrebbe non essere sufficiente a fornire una buona precisione di questa convergenza. Tale comportamento lo si evince nel seguente grafico:

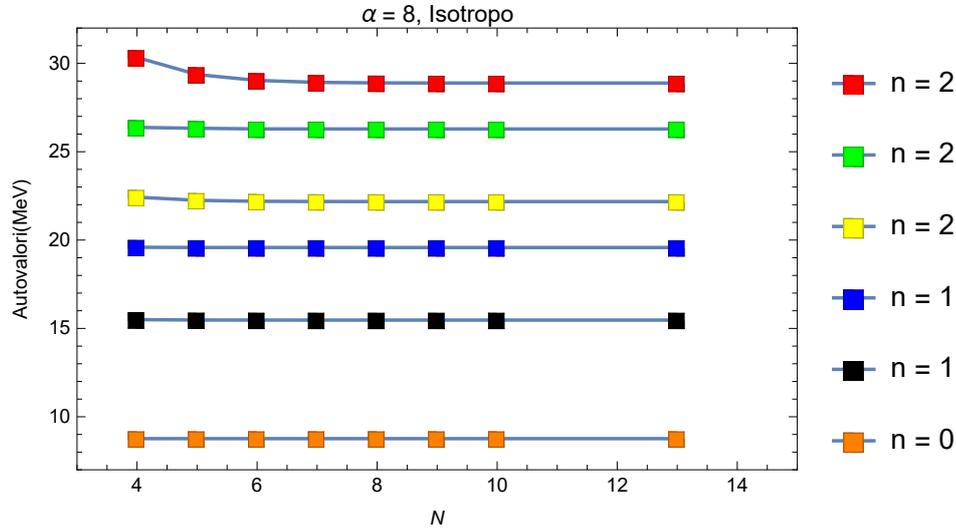


Figura 3.5: Autovalori ( $\alpha = 8$ )

Da questo possiamo notare che: l'andamento dello stato maggiore in energia, corrispondente a  $n = 2$ , è convergente tuttavia quando la dimensione della base varia tra  $4 \leq N \leq 6$ , assume valori decrescenti mentre dopo  $N > 6$  si stabilizza. Dunque possiamo assumere che gli autovalori convergano in modo sufficientemente preciso per  $N = 10$ .

Inoltre dai grafici possiamo osservare che al crescere del parametro di deformazione  $\alpha$  lo splitting degli autovalori aumenta. Per meglio evidenziare tale andamento siamo andati a plottare le differenze dei valori degli autovalori in funzione di  $\alpha$ .

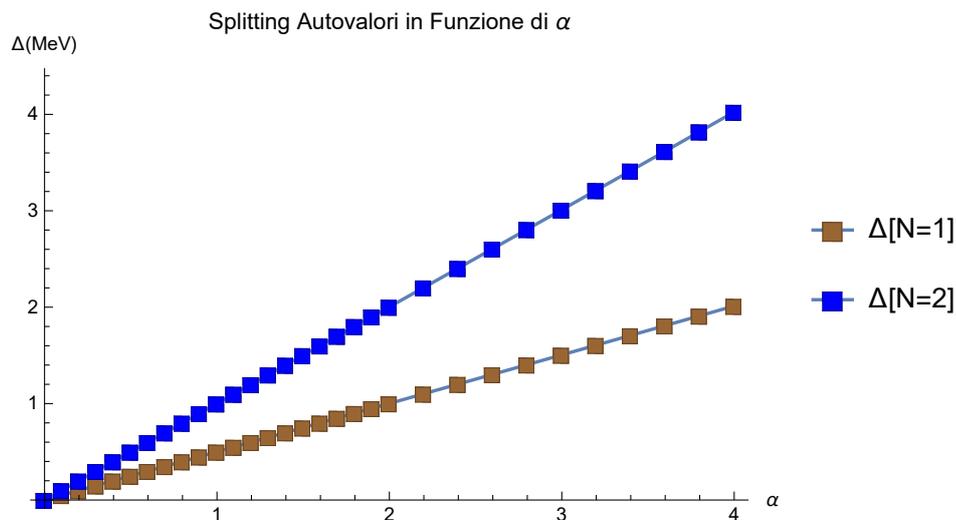


Figura 3.6: Splitting Autovalori

Ove  $\Delta[N = 1]$  rappresenta lo splitting tra gli autovalori corrispondenti a  $n = 1$ , mentre  $\Delta[N = 2]$  descrive quello calcolato prendendo la differenza tra lo stato di massima e di minima energia corrispondente all'autovalore  $n = 2$ .

Può essere interessante valutare l'entità dello splitting al variare di  $\alpha$ , per questo motivo abbiamo interpolato i dati con due rette del tipo:

$$y = mx + q. \quad (3.8)$$

Ci siamo quindi ricavati i coefficienti  $m, q$  che, approssimati, risultano essere:

- Per  $\Delta[N = 1]$ :  $m \sim 0.5, q = 0$ ;
- Per  $\Delta[N = 2]$ :  $m \sim 1, q = 0$ .

Questo implica che lo splitting tra gli stati di massima e minima energia relativi a  $n = 2$  sia pari ad  $\alpha$ , mentre quello relativo all'autovalore  $n = 1$  sia uguale a  $0.5\alpha$ .

### 3.3 Analisi degli autovalori

All'inizio del capitolo abbiamo evidenziato attraverso le Figure: 3.1, 3.2, 3.3, la deformazione del potenziale al variare di  $\alpha$ . Inoltre abbiamo visto che la natura dei punti critici dipende dal valore assoluto del parametro. Questo ci porta a supporre che esista una simmetria tra gli autovalori calcolati prendendo valori positivi e negativi di  $\alpha$ .

Quindi, avendo assunto le ipotesi di convergenza espresse nel paragrafo precedente, siamo andati a vedere l'andamento degli autovalori al variare di  $-4 \leq \alpha \leq 4$

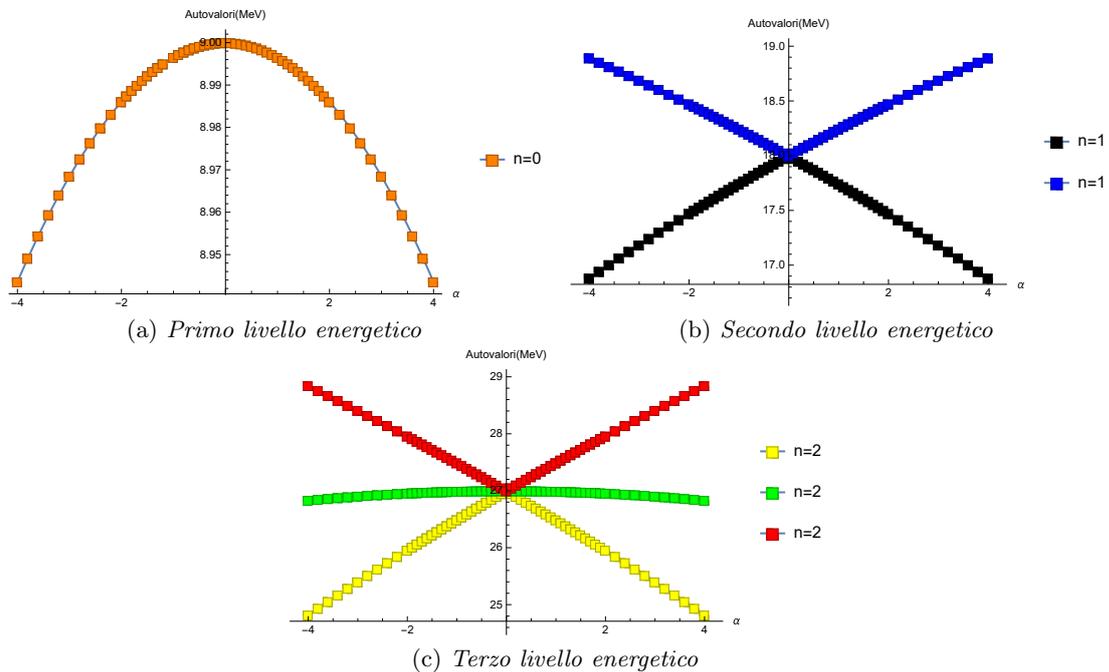


Figura 3.7: Variazione autovalori in funzione di  $\alpha$

Dai grafici possiamo confermare l'andamento simmetrico degli autovalori rispetto ad  $\alpha$ ; inoltre, come evidenziato nel paragrafo precedente, vediamo che al crescere del parametro di deformazione lo splitting tra gli autovalori aumenta regolarmente.

### 3.4 Autofunzioni

Dalle conoscenze sull'oscillatore armonico unidimensionale [4] sappiamo che le autofunzioni hanno la forma:

$$\phi_{n_x}(q_x) = N_{n_x} H_{n_x}(q_x) e^{-\frac{1}{2}q_x^2}, \quad (3.9)$$

dove  $N_{n_x}$  è la costante di normalizzazione e  $H_{n_x}(q_x)$  sono i polinomi di Hermite. Quindi nel caso bidimensionale possiamo scriverle come:

$$\psi_{n_x, n_y}(q_x, q_y) = \phi_{n_x}(q_x) \phi_{n_y}(q_y) = N_{n_x} N_{n_y} H_{n_x}(q_x) H_{n_y}(q_y) e^{-\frac{1}{2}q_x^2} e^{-\frac{1}{2}q_y^2}. \quad (3.10)$$

In generale queste saranno le autofunzioni che rappresentano gli stati di base del nostro spazio vettoriale.

Di conseguenza, considerando l'Hamiltoniana 3.1, possiamo scrivere l'autofunzione relativa allo stato  $j$ -esimo nel seguente modo:

$$\psi^j(q_x, q_y) = \sum_{i=1}^{k_{tot}} c_i^j \phi_{n_x}^i(q_x) \phi_{n_y}^i(q_y), \quad (3.11)$$

dove  $c_i^j$  sono i coefficienti della scomposizione. Poiché la somma è fatta su tutti gli stati di base, la somma del modulo quadro di questi coefficienti deve dare l'unità.

È interessante analizzare l'autofunzione relativa allo stato fondamentale al variare del parametro. Quando  $\alpha = 0$  essa si ridurrà semplicemente a quella dell'oscillatore armonico bidimensionale perché tutti i coefficienti  $c_i^0$  saranno nulli tranne quello relativo a  $n = 0$ . Quindi, come possiamo vedere in Figura 3.8, la  $\psi^0$  sarà descritta da una forma gaussiana:

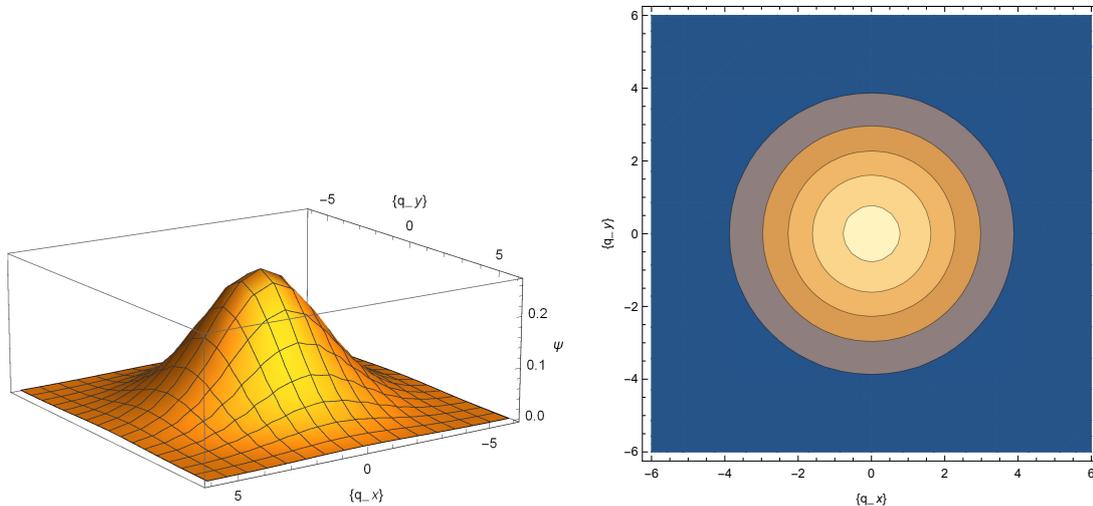


Figura 3.8: Autofunzione dello stato fondamentale, con  $\alpha = 0$ .

Per  $\alpha \neq 0$  e, in particolare,  $\alpha > 2$  la perturbazione diventa rilevante e di conseguenza gli stati del sistema vengono “mischiati”. Perciò i coefficienti potranno essere diversi da zero e ognuno di essi, moltiplicato per la relativa autofunzione di base, darà un contributo più o meno rilevante alla  $\psi^0$  modificandone la forma iniziale, come si evince dai grafici 3.9.

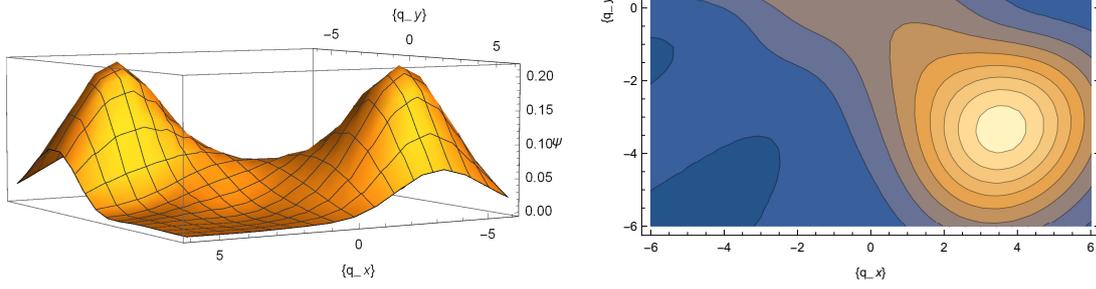


Figura 3.9: Autofunzione dello stato fondamentale, con  $\alpha > 2$ .

# Capitolo 4

## Applicazioni

In questo capitolo andremo a discutere brevemente alcuni esempi di sistemi fisici, uno relativo alla Fisica nucleare e l'altro relativo alla Fisica della materia, in cui i modelli principali si possono scrivere in termini dell'oscillatore armonico.

### 4.1 Modello di Nilsson per nuclei deformati

Il Modello a Shell, in fisica nucleare, funziona bene quando il termine potenziale ha simmetria sferica, ossia dipende solo dal raggio, situazione che si verifica quando siamo vicini alle shell chiuse, ovvero completamente riempite da nucleoni. Se ci allontaniamo da queste le interazioni tra i nucleoni di valenza possono portare alla deformazione del nucleo e il modello non offre più predizioni soddisfacenti [5].

Per questo motivo, nel 1955, S.G. Nilsson ha introdotto una versione modificata del modello a shell che fornisce una descrizione del moto di singola particella in un potenziale non sferico.

L'Hamiltoniana del modello per un nucleo deformato con asse  $z$  di simmetria ha la seguente forma:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m[\omega_x(\vec{x}^2 + \vec{y}^2) + \omega_z\vec{z}^2] + C\vec{l} \cdot \vec{s} + D\vec{l}^2, \quad (4.1)$$

dove  $\omega_x$ ,  $\omega_y$  e  $\omega_z$  sono le frequenze dell'oscillatore armonico nelle direzioni  $x, y$  e  $z$ . I termini  $\vec{l}^2$ , detto di orbita-orbita, e quello di spin-orbita  $\vec{l} \cdot \vec{s}$  servono ad aggiustare gli stati con diverso momento angolare e sono termini perturbativi del sistema.

Se trascuriamo, inizialmente, tali perturbazioni notiamo che l'Hamiltoniana è quella dell'oscillatore armonico tridimensionale, isotropo nelle direzioni  $x, y$  e anisotropo rispetto a  $z$ .

Quindi prendendo tre copie dell'algebra di Heisenberg-Weyl:

$$[q_x, p_x] = i\hbar, \quad [q_y, p_y] = i\hbar, \quad [q_z, p_z] = i\hbar, \quad (4.2)$$

e utilizzando la terza rappresentazione descritta nel primo capitolo, possiamo costruire uno spazio vettoriale formato dalle terne  $(n_x, n_y, n_z)$  tali che  $N = n_x + n_y + n_z$ .

Quindi utilizzando gli operatori,  $a_i$  e  $a_i^\dagger$ , per  $i = x, y, z$ , definiti nelle relazioni 2.4, possiamo ricavare gli autovalori del sistema che avranno la forma seguente:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left[ \hbar\omega_x(n_x + n_y + 1) + \hbar\omega_z\left(n_z + \frac{1}{2}\right) \right]. \quad (4.3)$$

Quando consideriamo le perturbazioni i metodi visti precedentemente restano validi. Tuttavia, mentre il momento angolare  $l$  può essere espresso per mezzo di coordinate cartesiane e quindi analizzato tramite gli operatori di creazione e distruzione, la stessa cosa non vale per lo spin. Questo problema si può risolvere prendendo l'algebra in cui esso è definito e, a partire da questa, costruendo una nuova base dello spazio vettoriale degli stati del sistema. Di conseguenza possiamo definire degli operatori di innalzamento e abbassamento e utilizzarli per analizzare gli elementi di matrice della parte perturbativa relativa allo spin. Pertanto si vede come il modello precedentemente discusso, si può adattare facilmente a questo caso.

## 4.2 Quantum Dots

Un quantum dot è formato da un certo numero di elettroni, generalmente compreso tra una decina e poche centinaia, confinati all'interno di un materiale, in una regione spaziale cava dell'ordine di  $100nm$ , che viene ottenuta con tecniche di litografia su un substrato, [8]. In questa struttura gli elettroni possono occupare solo stati a energie discrete, similmente agli atomi in una buca di potenziale, calcolabili in accordo alle leggi della meccanica quantistica.

Esso può lavorare in tre diversi regimi dinamici [7]:

- Il regime atomico;
- Il regime caotico;
- Il regime Wigner-Crystallization;

Nel primo regime l'energia cinetica, causata dal potenziale di confinamento, domina sull'energia Coulombiana. Il regime caotico risulta molto interessante dal punto di vista fisico poiché entrambe le interazioni sono compatibili. Nel terzo regime l'interazione tra gli elettroni è superiore a quella del potenziale di confinamento dando luogo a una struttura cristallina di stati quantici.

Tutti questi regimi possono essere descritti computazionalmente facendo un certo numero di approssimazioni che dipendono, principalmente, dal numero di elettroni che consideriamo: per pochi di essi, possiamo utilizzare la teoria delle matrici casuali poiché è possibile diagonalizzarle esattamente. Per un numero più grande di particelle possiamo chiamare in causa teorie di campo medio che ci permettono di utilizzare il metodo di Hartree-Fock. Infine quando abbiamo a che fare con numeri di particelle ancora maggiori possiamo utilizzare la teoria del funzionale della densità.

Cambiando le caratteristiche del potenziale di confinamento tutti i regimi possono essere analizzati sperimentalmente. Per far questo, per esempio, sono stati realizzati quantum dots 2-dimensionali, ciò è possibile quando il potenziale di confinamento è più forte in una direzione, l'asse  $z$ , rispetto alle altre due rimanenti. A causa della grande spaziatura tra i livelli energetici in questa direzione, lo  $z$ -stato più basso è occupato da tutti gli elettroni nel dot; in questa situazione i contributi nella  $z$ -direzione possono essere trascurati rispetto la fisica del sistema e il modello assume una struttura bidimensionale.[6]

Per esempio possiamo prendere un potenziale formato dall'oscillatore armonico bidimensionale sommato ad un termine di tipo Coulombiano che deriva dalla repulsione tra gli elettroni. Considerando  $N$  particelle l'Hamiltoniana si può scrivere come:

$$H = \sum_{i \leq N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r_i^2 + \sum_{i < j \leq N} \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|r_i - r_j|}, \quad (4.4)$$

dove  $r = (x, y)$  e  $\omega$  è la frequenza dell'oscillatore.

Quest'ultima può essere scomposta in una parte imperturbata e una parte perturbativa. Per studiare la prima parte, similmente a quanto spiegato nel modello di Nilsson, possiamo utilizzare i metodi descritti nei precedenti capitoli.

Per analizzare la perturbazione invece serve conoscere gli elementi di matrice del termine  $\frac{1}{|r_i - r_j|}$ . Senza addentrarci nei calcoli possiamo dire che un modo per fare questo è riscrivere il termine utilizzando gli operatori di creazione e distruzione e, successivamente, sfruttare relazioni algebriche.

Anche in questo caso si vede come le tecniche apprese in questa tesi, si possono utilizzare come base per calcoli più complessi volti ad una descrizione realistica del sistema in esame.



## Capitolo 5

# Conclusioni

Questo lavoro ha permesso di analizzare in modo dettagliato il modello dell'oscillatore armonico bidimensionale, quando viene aggiunto al potenziale un termine perturbativo della forma 2.17.

Per fare questo si sono approfonditi aspetti teorici relativi alla definizione e alle caratteristiche dell'algebra di Heisenberg-Weyl, grazie ai quali abbiamo potuto costruire lo spazio vettoriale degli stati del nostro sistema quantistico.

Successivamente, utilizzando tali concetti si è potuto realizzare un metodo di calcolo computazionale, basato su una procedura matriciale, che ha permesso di ricavare e analizzare gli autovalori e gli autovettori dell'Hamiltoniana al variare della perturbazione. Tale procedura ha mostrato anche i limiti dell'approccio numerico, evidenziando i possibili errori di arrotondamento e troncamento da cui sono affette le matrici considerate. I risultati ottenuti sono coerenti con le previsioni teoriche fatte a priori, quindi li riteniamo più che soddisfacenti.

Infine, senza entrare nei dettagli, abbiamo cercato delle applicazioni pratiche di fisica nucleare e della materia che utilizzassero il sistema quantistico da noi descritto, trovando analogie con il modello nucleare di Nilsson e con i Quantum dots.

Concludendo si potrebbe pensare di utilizzare il metodo di calcolo da noi sviluppato per studiare altri tipi di potenziali, per i quali non si riesce a trovare una soluzione analitica all'equazione di Schrödinger, e verificare se le soluzioni che si ottengono sono consistenti con i modelli e le applicazioni fisiche già studiate.



# Bibliografia

- [1] F. Iachello, *Lie Algebras and Applications*, 2015.
- [2] Notes on Heisenberg Algebras,  
<http://infohost.nmt.edu/~iavramid/notes/heisenberg.pdf>
- [3] Oscillatore armonico bidimensionale,  
<http://people.na.infn.it/~pq-qp/notes/sciarrino/Osc2dim.pdf>
- [4] S. Flugge, *Practical Quantum Mechanics*, 1994.
- [5] R.F.Casten, *Nuclear Structure From A Simple Perspective*, 1990.
- [6] B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek, *Electron-electron correlation in quantum dots*, Physica E, 2000.
- [7] T. Vorrath, R. Blumel, *Electronic structure of three-dimensional quantum dots*, The European Physical Journal B, 2003.
- [8] F. Duan, J. Guojun, *Introduction to Condensed Matter Physics Volume 1*, 2005.