

# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

---

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea Triennale in Fisica

## L'algebra di Heisenberg-Weyl nella soluzione di problemi quantistici

**RELATORE:**  
Prof. Lorenzo Fortunato

**LAUREANDO:**  
Nicola Dragoni

---

Anno Accademico 2015/2016

# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>3</b>
<b>1 Algebra di Heisenberg-Weyl</b>	<b>4</b>
1.1 Spazio di Fock . . . . .	5
1.2 Oscillatore armonico unidimensionale . . . . .	6
<b>2 Studio di potenziali polinomiali</b>	<b>7</b>
2.1 Analisi del potenziale $V(x) = ax^2 + bx^4$ . . . . .	7
2.1.1 Dipendenza degli autovalori dalla dimensione delle matrici	9
2.1.2 Dipendenza degli autovalori da $b$ . . . . .	11
2.2 Analisi del potenziale $V(x) = \frac{1}{2}(1-b)x^2 + bx^4$ . . . . .	13
<b>3 Applicazioni</b>	<b>15</b>
3.1 Molecola di ammoniaca $\text{NH}_3$ . . . . .	15
3.2 Transizioni di fase di forma nel modello collettivo . . . . .	16
<b>Conclusione</b>	<b>18</b>

## Introduzione

L'obiettivo di questo lavoro è lo studio dell'algebra di Heisenberg e dei metodi su di essa basati volti ad ottenere lo spettro di operatori hamiltoniani (*Spectrum Generating Algebra*, si veda [1]) e la sua applicazione a problemi di natura quantistica. Questo approccio ai sistemi quantomeccanici permette di risolvere in maniera algebrica l'equazione di Schrödinger nel caso di potenziali polinomiali in  $\hat{X}$  e  $\hat{P}$ , tramite l'introduzione degli operatori di seconda quantizzazione  $\hat{A}$  e  $\hat{A}^\dagger$ , detti rispettivamente operatori di distruzione e creazione.

L'approccio algebrico risulta preferibile poiché grazie ad esso non è necessaria la risoluzione analitica dell'equazione di Schrödinger: autostati e autovalori verranno infatti determinati a partire dagli elementi di matrice della funzione hamiltoniana calcolata sui vettori di base dello spazio di Fock, costruito proprio a partire dall'azione degli operatori  $\hat{A}$  e  $\hat{A}^\dagger$ .

Il primo capitolo verterà quindi sulla definizione formale di algebra di Heisenberg: verranno presentate e dimostrate alcune proprietà utili e gli oggetti che formano questa struttura. Verrà inoltre applicato il formalismo algebrico ad un problema semplice di meccanica quantistica, l'oscillatore armonico unidimensionale. In questa sede si vedrà la potenza del formalismo di seconda quantizzazione nella soluzione di sistemi fisici.

Nel secondo capitolo, partendo dallo spazio generato dagli autostati dell'oscillatore armonico, verrà sviluppato un approccio matriciale allo studio di potenziali polinomiali dipendenti da alcuni parametri. Si analizzerà la stabilità degli autovalori in funzione della dimensione delle matrici rappresentanti gli operatori, e si analizzerà la variazione degli autovalori al variare dei parametri. In particolare si studieranno due tipi di potenziali utili nelle applicazioni a sistemi fisici.

Nel terzo capitolo verranno brevemente presentate un paio di applicazioni. Nel campo della fisica molecolare, lo studio della molecola di ammoniaca e del suo spettro di inversione; nel campo della fisica nucleare, nello studio delle transizioni di fase di forma, nell'ambito del modello collettivo del nucleo.

# 1 Algebra di Heisenberg-Weyl

Si definisce algebra di Heisenberg-Weyl l'algebra di Lie [2] formata da una terna di operatori, detti **generatori**,  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$  e  $\hat{Z}$  per i quali valgano le seguenti regole di commutazione :

$$[\hat{X}, \hat{Y}] = \hat{Z} \quad [\hat{X}, \hat{Z}] = 0 \quad [\hat{Y}, \hat{Z}] = 0 \quad (1.0.1)$$

Questa algebra presenta tre importanti rappresentazioni [3], una in termini di di matrici reali 3x3 :

$$\hat{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{Y} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{Z} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (1.0.2)$$

E una in termini di operatori differenziali  $C^\infty(\mathbb{R}^3) \rightarrow C^\infty(\mathbb{R}^3)$  definiti nel seguente modo:

$$\hat{X} = \partial_x - \frac{1}{2}y\partial_z \quad \hat{Y} = \partial_y + \frac{1}{2}x\partial_z \quad \hat{Z} = \partial_z \quad (1.0.3)$$

La terza rappresentazione verrà introdotta e approfondita in un secondo momento.

L'algebra di Heisenberg gode di svariate proprietà, le quali possono essere dimostrate sia a partire dalle relazioni di commutazione, sia tramite le rappresentazioni sopra fornite. Fra le varie proprietà ne dimostreremo due molto importanti, perché riguardano le **deformazioni** dell'algebra, ovvero l'estensione delle relazioni di commutazione canoniche a potenze e altre funzioni. Valutiamo i seguenti commutatori:

$$\text{I : } [\hat{X}, \hat{Y}^n] = n\hat{Z}\hat{Y}^{n-1}$$

$$\text{II : } [\hat{Y}, \hat{X}^n] = -n\hat{Z}\hat{X}^{n-1}$$

**Dimostrazione:** Dimostriamo la prima proprietà:

$$[\hat{X}, \hat{Y}^n] = [\hat{X}, \hat{Y}\hat{Y}^{n-1}] = [\hat{X}, \hat{Y}]\hat{Y}^{n-1} + \hat{Y}[\hat{X}, \hat{Y}^{n-1}] = \hat{Z}\hat{Y}^{n-1} + \hat{Y}[\hat{X}, \hat{Y}^{n-1}] \quad (1.0.4)$$

Sviluppando ulteriormente il secondo commutatore si giunge all'espressione:

$$[\hat{X}, \hat{Y}^n] = \hat{Z}\hat{Y}^{n-1} + \hat{Y}\hat{Z}\hat{Y}^{n-2} + \hat{Y}^2[\hat{X}, \hat{Y}^{n-2}] \quad (1.0.5)$$

Consideriamo ora il secondo termine al secondo membro con l'intenzione di dimostrare che esso sia equivalente a  $\hat{Z}\hat{Y}^{n-2}$  :

$$\hat{Y}\hat{Z}\hat{Y}^{n-2} - \hat{Z}\hat{Y}^{n-1} = \hat{Y}\hat{Z}\hat{Y}^{n-2} - \hat{Z}\hat{Y}\hat{Y}^{n-2} = [\hat{Y}, \hat{Z}]\hat{Y}^{n-2} = 0 \quad (1.0.6)$$

Riscrivendo quindi l'espressione iniziale si ottiene:

$$[\hat{X}, \hat{Y}^n] = 2\hat{Z}\hat{Y}^{n-1} + \hat{Y}^2[\hat{X}, \hat{Y}^{n-2}] \quad (1.0.7)$$

Procedendo per induzione su  $n$ , si ottiene il risultato finale:

$$[\hat{X}, \hat{Y}^n] = n\hat{Z}\hat{Y}^{n-1} \quad (1.0.8)$$

La seconda proprietà è dimostrabile in maniera assolutamente analoga.

## 1.1 Spazio di Fock

Un oggetto interessante che si può costruire a partire dai generatori dell'algebra di Heisenberg è l'operatore  $\hat{N}$ :

$$\hat{N} = \hat{Y}\hat{X} \quad (1.1.1)$$

Valgono alcune proprietà di commutazione elementari

$$[\hat{N}, \hat{Y}] = \hat{Y}\hat{Z} \quad [\hat{N}, \hat{X}] = -\hat{Z}\hat{X} \quad (1.1.2)$$

A partire da questi operatori è possibile costruire uno spazio vettoriale di dimensione infinita. Supponiamo infatti che esista un vettore  $\nu_0$ , chiamato **vettore dello stato di vuoto**, tale che:

$$\hat{X}\nu_0 = 0 \quad (1.1.3)$$

Allora, a partire da esso, è possibile costruire mediante applicazione successiva dell'operatore  $\hat{Y}$  una famiglia di vettori  $\nu_n$ , definiti come:

$$\nu_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{Y}^n\nu_0 \quad (1.1.4)$$

Questi stati verranno, nel seguito, indicati tramite la notazione bra-ket di Dirac:

$$\nu_n = |n\rangle$$

Dalle proprietà generali dell'algebra di Heisenberg-Weyl è immediato dimostrare le seguenti relazioni:

$$\hat{Y}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (1.1.5)$$

$$\hat{X}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (1.1.6)$$

Di conseguenza, è immediato provare che:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad (1.1.7)$$

Ossia, gli stati introdotti nell'equazione (12) sono autostati dell'operatore  $\hat{N}$ , relativi all'autovalore  $n$ .

Supponiamo ora che  $\hat{Y}$  e  $\hat{Z}$  non siano operatori generici, ma valga che:

$$\hat{Y} = \hat{X}^\dagger$$

$$\hat{Z} = \hat{I}$$

E' questa la terza rappresentazione dell'algebra di Heisenberg-Weyl.

In questa situazione si definisce dunque **spazio di Fock** lo spazio vettoriale

$$\text{span}\{\nu_n \mid n \geq 0\}$$

L'operatore  $\hat{X}$  prende il nome di **operatore di distruzione**, l'operatore  $\hat{Y}$  **operatore di creazione** e l'operatore  $\hat{N}$  **operatore numero**.

I vettori di base dello spazio di Fock  $|n\rangle$  sono vettori ortonormali, ossia :

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$$

Questa relazione permette di calcolare rapidamente gli elementi di matrice relativi agli operatori di creazione e distruzione:

$$\langle m|\hat{X}|n\rangle = \langle m|\sqrt{n}|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1} \quad (1.1.8)$$

$$\langle m|\hat{Y}|n\rangle = \langle m|\sqrt{n+1}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \quad (1.1.9)$$

## 1.2 Oscillatore armonico unidimensionale

Per esemplificare i concetti espressi fino ad ora, andiamo ad analizzare un sistema fisico semplice, l'**oscillatore armonico quantistico unidimensionale**. Consideriamo quindi una particella di massa  $m$  richiamata verso l'origine da una molla di costante elastica  $k$  e sia  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ . La hamiltoniana di tale sistema sarà dunque:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2 \quad (1.2.1)$$

Dove gli operatori  $\hat{X}$  e  $\hat{P}$  sono gli usuali operatori posizione e impulso, per i quali vale  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ .

Introduciamo quindi gli operatori  $\hat{A}$  e  $\hat{A}^\dagger$ , analoghi agli operatori  $\hat{X}$  e  $\hat{Y}$  sopra definiti:

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{P}\right)$$

$$\hat{A}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} - i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{P}\right)$$

In questi termini, l'hamiltoniana del sistema può essere riscritta come [4]:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{A}^\dagger\hat{A} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \quad (1.2.2)$$

Di conseguenza, usando gli autovalori dell'operatore numero sugli stati della base, lo spettro della hamiltoniana è:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Inoltre, nel caso dell'oscillatore armonico, gli autovettori di  $\hat{H}$ , ossia i vettori che diagonalizzano la hamiltoniana, sono proprio i vettori di base dello spazio di Fock,  $|n\rangle$ :

$$\langle m|\hat{H}|n\rangle = \langle m|\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\delta_{m,n} \quad (1.2.3)$$

## 2 Studio di potenziali polinomiali

Nel precedente capitolo abbiamo visto come sia possibile, tramite l'introduzione degli operatori di creazione e distruzione, riscrivere una hamiltoniana, funzione di  $\hat{X}$  e  $\hat{P}$ . Nel caso dell'oscillatore armonico, inoltre, la nuova forma è particolarmente semplice, essendo infatti proporzionale all'operatore numero; pertanto gli autostati saranno quelli del suddetto operatore, ossia i vettori di base dello spazio di Fock.

In casi realistici, tuttavia, questo difficilmente accade: il potenziale di interazione di una particella può essere arbitrariamente complesso e le modificazioni possono cambiare lo spettro in maniera significativa. Tuttavia, in molti casi di interesse fisico, il potenziale nell'intorno di un minimo può essere approssimato da un oscillatore armonico e in ciò risiede il carattere fondamentale di questo caso analitico. Pertanto, in questa sede, analizzeremo un metodo matriciale che, per sua natura, si traduce facilmente in una procedura computazionale, che nel nostro caso abbiamo implementato tramite software *Mathematica*, per studiare hamiltoniane che non siano diagonali nella base degli autostati dell'operatore  $\hat{N}$ . Questo approccio è basato sul considerare uno spazio di Fock troncato e determinare autovalori e autovettori della hamiltoniana in matrici finite. Ripetendo il procedimento per diverse dimensioni della base si può stabilire se, per un dato autostato, vi sia buona convergenza. In questo capitolo analizzeremo due potenziali che si presentano nello studio di sistemi molecolari e nucleari.

### 2.1 Analisi del potenziale $V(x) = ax^2 + bx^4$

La hamiltoniana che andremo ad analizzare ha la forma seguente:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2} + a\hat{X}^2 + b\hat{X}^4 \quad (2.1.1)$$

A seconda del segno dei due coefficienti  $a$  e  $b$  il potenziale assumerà forme diverse (si veda Fig. 1 per un esempio). La configurazione che verrà analizzata in dettaglio è quella in cui  $a = -1$  e  $b > 0$ .

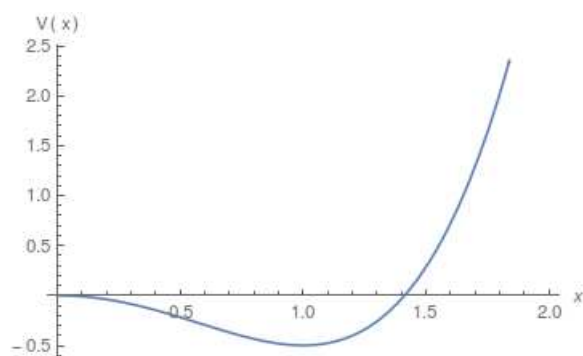


Figura 1: Esempio:  $a = -1$  e  $b = 0.5$ .

Il motivo di questa scelta è che questa forma di potenziale ha applicazioni pratiche che verranno approfondite nei successivi capitoli. Per poter studiare questo

potenziale nello spazio di Fock è necessario trovare una procedura per determinare la forma degli elementi di matrice di  $\hat{X}^2$ ,  $\hat{X}^4$  e  $\hat{P}^2$ . Per farlo possiamo procedere in due direzioni:

**Tramite calcolo diretto.** Si usa la definizione di  $\hat{X}^2$  in termini degli operatori di distruzione e creazione, come segue:

$$\hat{X}^2 = \frac{1}{2}(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)^2 = \frac{1}{2}(\hat{A}^2 + (\hat{A}^\dagger)^2 + \hat{A}\hat{A}^\dagger + \hat{A}^\dagger\hat{A})$$

Si può poi applicare l'operatore ottenuto ad uno stato con fissato numero di quanti di vibrazione, ottenendo:

$$\hat{X}^2 |n\rangle = \frac{1}{2}(\sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle + (2n+1)|n\rangle + \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle)$$

Per poi concludere, ricordando che  $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$ :

$$\langle m|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{1}{2}(\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} + (2n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2})$$

In modo analogo si può valutare  $\hat{P}^2$ :

$$\langle m|\hat{P}^2|n\rangle = -\frac{1}{2}(\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} - (2n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2})$$

Nell'analisi successiva, gli operatori  $\hat{X}^2$  e  $\hat{P}^2$  sono stati calcolati in questo modo. Tuttavia nel caso di  $\hat{X}^4$  questa procedura non è agevole.

**Calcolo degli elementi di matrice di  $\hat{X}^4$  tramite le relazioni di completezza.** Ricordando che vale la relazione di completezza, ossia  $\sum_{k=0}^{\infty} |k\rangle\langle k| = 1$ , possiamo scrivere:

$$\langle m|\hat{X}^4|n\rangle = \langle m|\hat{X}^2 * 1 * \hat{X}^2|n\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} (\langle m|\hat{X}^2|k\rangle\langle k|\hat{X}^2|n\rangle)$$

Questa relazione corrisponde all'infinito prodotto righe per colonne degli elementi di matrice di  $\hat{X}^2$  sui vettori di base. Questa espressione, che risulta più immediata nel computo di  $\hat{X}^4$ , non può essere processata da un calcolatore.

Si è reso quindi necessario studiare la dipendenza degli autovalori della hamiltoniana (6) dall'ordine delle matrici coinvolte nell'approssimazione.



### 2.1.1 Dipendenza degli autovalori dalla dimensione delle matrici

A rigore, lo spazio vettoriale in cui si opera in questo tipo di problemi, e di conseguenza le matrici che corrispondono agli operatori, hanno dimensione infinita. Di conseguenza, nel calcolo pratico di autovalori e autovettori è necessario scegliere un numero  $N$  come dimensione dello spazio su cui si lavora. Le matrici che descrivono gli operatori saranno quindi  $N * N$ .

La scelta di  $N$  è delicata. Prendendolo troppo piccolo si rischia che gli inevitabili errori di arrotondamento e troncamento abbiano un peso considerevole: infatti la parte affetta da errore nelle matrici è, in questo caso, l'ultima riga e l'ultima colonna. Combinando le grandezze tramite prodotti matriciali, questi errori si diffondono sulle altre entrate della matrice, creando errori nella determinazione degli autovalori e degli autovettori. Proprio per questo motivo, gli operatori  $\hat{P}^2$  e  $\hat{X}^2$  sono stati determinati tramite calcolo diretto. In questo modo, infatti, l'errore introdotto riguarda solo le entrate più esterne della matrice.

E' quindi importante prendere  $N$  sufficientemente grande, in modo da minimizzare l'errore su un sottoinsieme ristretto comprendente gli autovalori più bassi. Se, per esempio, si è interessati ai primi 4 autovalori, allora  $N \gg 4$ . La dimensione adeguata delle matrici è anche influenzata dal numero di prodotti matriciali necessari per ottenere le grandezze di interesse: maggiore questo numero, maggiore dovrà essere  $N$ .

D'altra parte però, scegliere  $N$  troppo grande provoca un aumento del tempo di elaborazione. Si è reso quindi necessario uno studio degli autovalori in funzione di  $N$ .

In vista dell'analisi della dipendenza degli autovalori dal valore del parametro  $b$ , si è realizzato il calcolo dei primi quattro autovalori in corrispondenza di tre valori distinti di  $b$ :

$$b < |a|$$

$$b \sim |a|$$

$$b > |a|$$

I risultati di questa analisi sono stati sintetizzati in Fig. 2, Fig. 3, Fig. 4

$b=0.2$

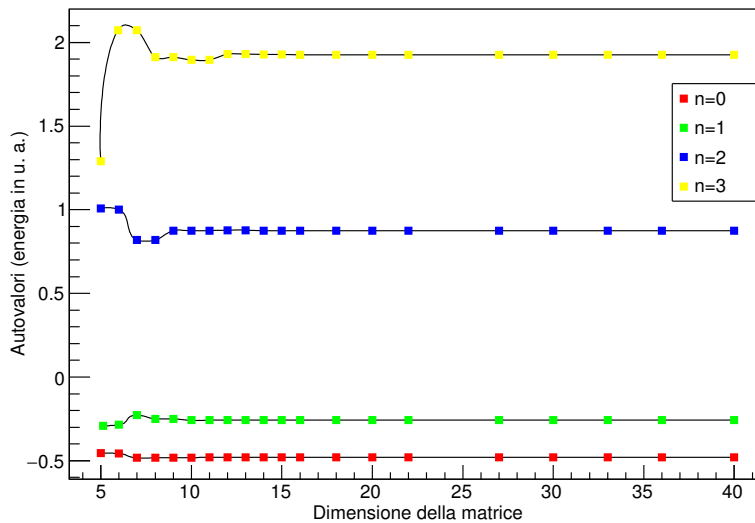


Figura 2: Dipendenza degli autovalori da  $N$  per  $b = 0.2$ .  
 $b=0.9$

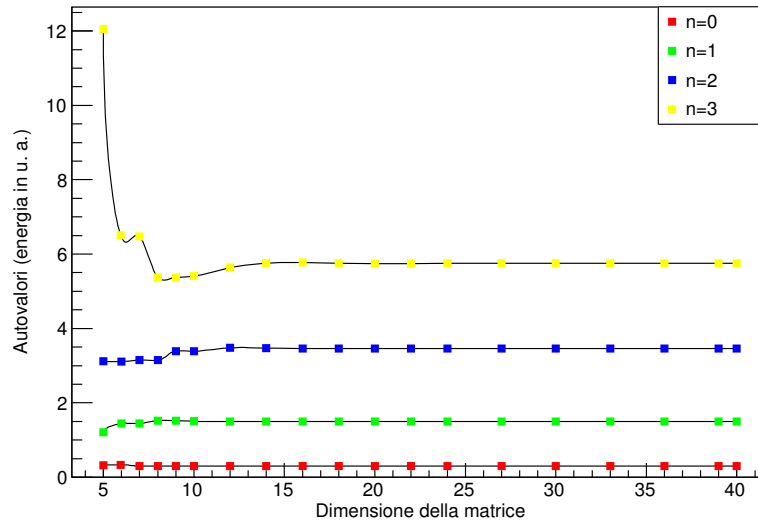


Figura 3: Dipendenza degli autovalori da  $N$  per  $b = 0.9$ .  
 $b=1.5$

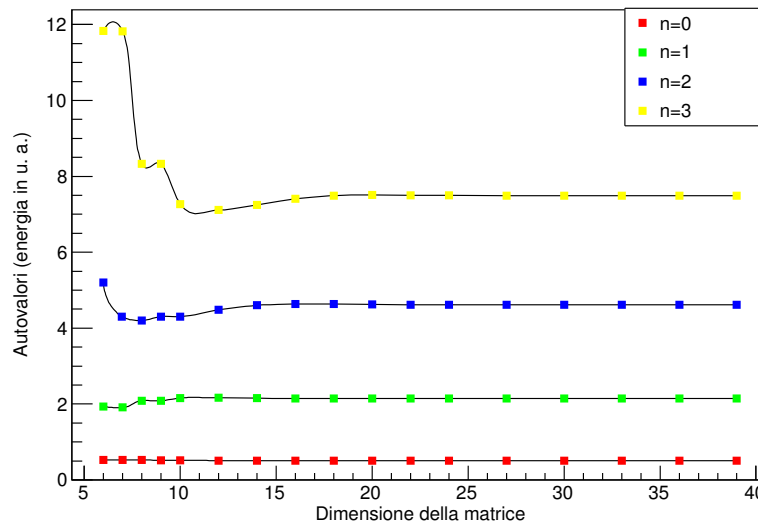


Figura 4: Dipendenza degli autovalori da  $N$  per  $b = 1.5$ .

Da questi grafici si possono trarre alcune osservazioni interessanti.

Per iniziare, come era stato anticipato, per  $N$  piccoli ( $5 < N < 10$ ) gli autovalori sono molto irregolari e differiscono parecchio dal valore stabilizzato.

Si può inoltre vedere come gli autovalori più bassi in energia fluttuino meno degli autovalori successivi.

L'osservazione più importante per il prosieguo è, però, il fatto che, nel nostro caso specifico i primi autovalori della matrice associata alla hamiltoniana si stabilizzano per  $N \sim 40$ . E' dunque questa la dimensione delle matrici appropriata per studiare, per esempio, la dipendenza degli autovalori dal parametro  $b$ .

### 2.1.2 Dipendenza degli autovalori da $b$

In questa sezione ci concentriamo sulla variazione dei primi livelli energetici in funzione di  $b$ . Per prima cosa facciamo alcune supposizioni su quello che ci si aspetta, dato il potenziale  $V(x) = -x^2 + bx^4$ .

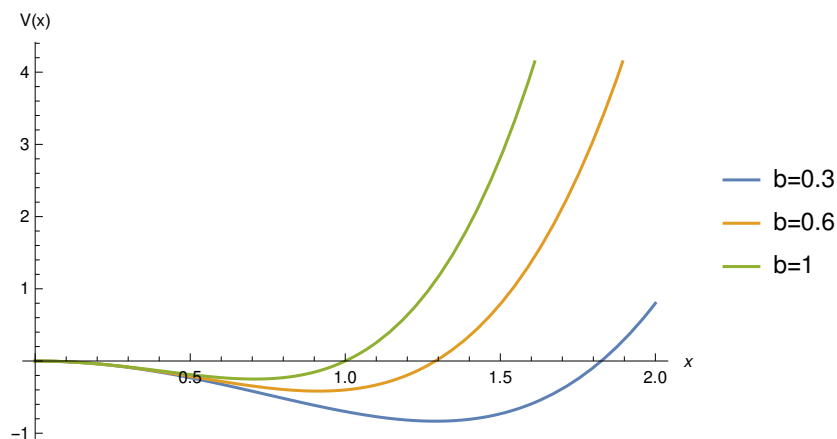


Figura 5: Dipendenza del potenziale da  $b$ .

Andiamo ad analizzare la dipendenza del minimo della funzione dal parametro:

$$V'(x) = -2x + 4bx^3 = 0 \rightarrow x = 0 \vee x = \pm \frac{1}{\sqrt{2b}}$$

Chiamiamo questa seconda coppia di radici  $x_{min}$ .

Ai fini del calcolo dell'altezza della buca, è giustificato considerare questi valori come analoghi, vista la simmetria del potenziale.

$$V(x_{min}) = -\frac{1}{2b} + \frac{b}{4b^2} = -\frac{1}{4b}$$

Si può vedere quindi che, all'aumentare di  $b$ , la profondità del minimo deformato diminuisce (cfr. Fig. 5).

Ci si aspetta dunque che, all'aumentare del parametro, il numero di stati ad energia negativa diminuisca, fino a sparire.

Andiamo dunque a presentare i risultati ottenuti tramite calcolo numerico:

Variazione dei livelli energetici in funzione di  $b$

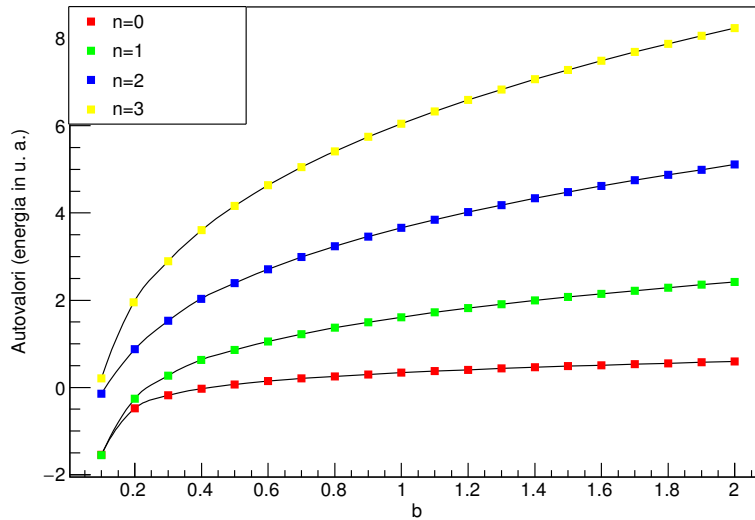


Figura 6: Variazione dei livelli energetici in funzione di  $b$ .

Dal grafico in Fig. 6 si può immediatamente leggere che la predizione sugli stati ad energia negativa era corretta: per  $b \sim 0.2$  la profondità della buca non è più sufficiente a permettere l'esistenza di autovalori ad energia negativa. Comunque, essendo il potenziale infinito per  $x \rightarrow \infty$ , lo spettro è completamente discreto. Si può vedere inoltre che per  $0 < b < 0.5$  c'è una più spiccata dipendenza dal valore del parametro stesso. Questa differenza va poi diminuendo all'aumentare del parametro fino a raggiungere, nel caso dello stato ad energia più bassa, un valore pressochè costante. Questo comportamento può essere dovuto al fatto che questo stato, essendo il più basso, risenta meno del termine  $bx^4$ .

Il comportamento dello stato fondamentale non si ripresenta poi in quelli eccitati, che aumentano all'aumentare di  $b$ .

## 2.2 Analisi del potenziale $V(x) = \frac{1}{2}(1 - b)x^2 + bx^4$

Il principale motivo di interesse di questo tipo di potenziale risiede nella possibilità di studiare transizioni di fase quantistiche. Variando il parametro  $b$  fra 0 e 1, estremi inclusi, si passa infatti da un potenziale di oscillatore armonico unidimensionale ad un potenziale  $V(x) = x^4$ , con combinazioni lineari intermedie. Il potenziale quartico rappresenta il punto critico fra un comportamento "sferico" ed uno "deformato", che si ottiene per valori di  $b > 1$ , come si può vedere in Fig. 7 .

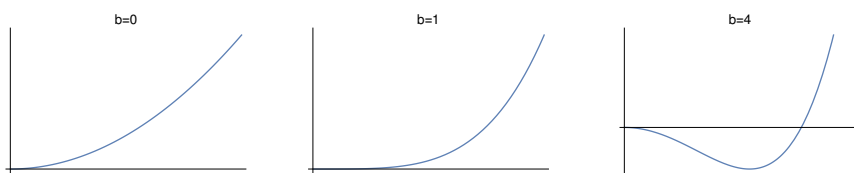


Figura 7: Per  $b = 0$ , nucleo sferico. Per  $b = 1$ , nucleo al punto critico. Per  $b = 4$ , nucleo deformato.

Questo comportamento si ritroverà, per esempio, nello studio delle oscillazioni della superficie nucleare, modellizzata come una goccia di fluido quantistico. In questo caso non verrà riportato lo studio della stabilità degli autovallori in funzione della dimensione delle matrici che rappresentano gli operatori, dal momento che esso ha prodotto risultati identici al caso precedentemente analizzato.

Infatti la dimensione minima per avere stabilità dipende principalmente dal numero di moltiplicazioni matriciali compiute e questo, a sua volta, dipende dalla massima potenza in termini di  $\hat{X}$  e  $\hat{P}$  degli operatori che compongono la hamiltoniana. Questo modello non comporta conti aggiuntivi in questo senso. Riportiamo in Fig. 8 i risultati inerenti lo spettro in energia, in funzione di  $b$ :

Variazione dei livelli energetici in funzione di  $b$

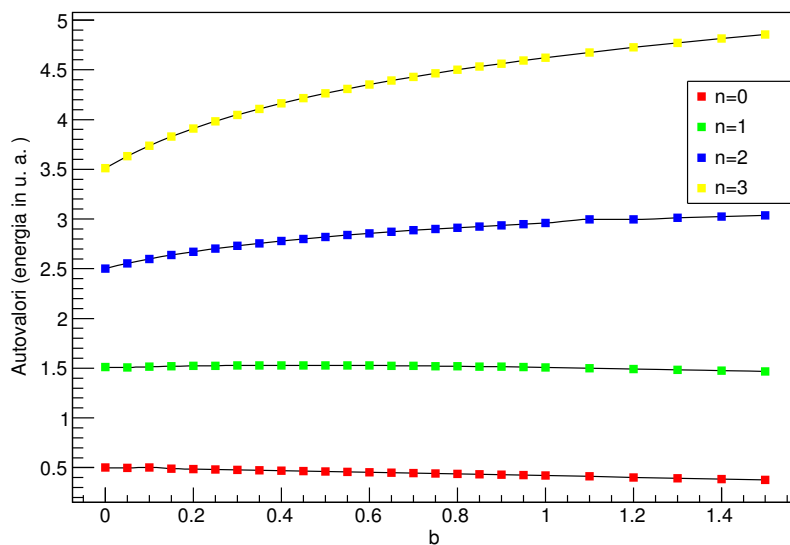


Figura 8: Dipendenza dei primi livelli energetici da  $b$ .

Come si può vedere dal grafico, l'energia dello stato fondamentale diminuisce nel passaggio da un potenziale armonico ad uno del tipo  $V(x) = x^4$ . Questo comportamento può essere spiegato pensando al fatto che, al variare di  $b$ , il potenziale diventi più appiattito per  $x < 1$  e più ripido per  $x > 1$  e ciò provoca la diminuzione dell'energia dello stato fondamentale.

Un altro aspetto interessante in questo studio è osservare la variazione di composizione dello stato fondamentale rispetto alla base di autostati dell'oscillatore armonico. Il seguente grafico presenta la composizione dello stato fondamentale:

Composizione dello stato fondamentale

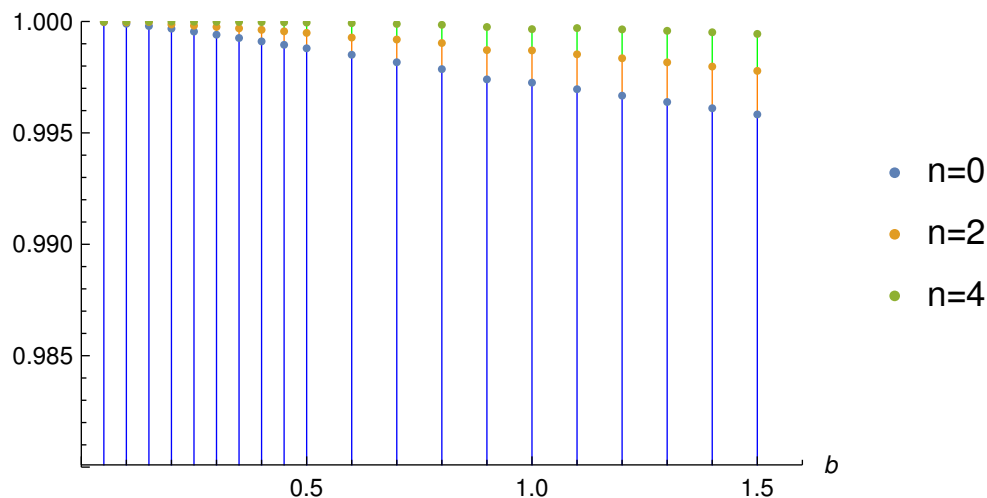


Figura 9: Composizione dello stato fondamentale al variare del parametro  $b$ , in termini dei primi autostati della base. Notare la scala verticale.

Come si può vedere in Fig. 9, il contributo dominante viene dallo stato fondamentale dell'oscillatore armonico che vale ancora il 99,5% per  $b \sim 1.5$ . Come era prevedibile, il contributo di un dato  $n$  diminuisce all'aumentare di  $n$  stesso.

Inoltre si può vedere come solo gli stati con  $n$  pari contribuiscano allo stato fondamentale. Questo fatto può essere spiegato pensando alla parità caratteristica di un dato  $n$ : lo stato fondamentale è pari e anche il potenziale di perturbazione  $V(x) = bx^4$  è pari, di conseguenza esso collegherà lo stato con  $n = 0$  con altri stati pari.

### 3 Applicazioni

In questo capitolo si accenneranno brevemente, senza entrare nei dettagli, alcune applicazioni delle tecniche studiate a sistemi quantistici, sia molecolari che nucleari.

#### 3.1 Molecola di ammoniaca $\text{NH}_3$

La molecola di ammoniaca presenta una struttura piramidale, rappresentata in Fig. 10, con i tre atomi di idrogeno che formano la base.

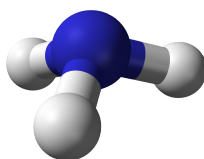


Figura 10: Modello Ball and Stick dell'ammoniaca.

Ai fini della costruzione di un modello, possiamo in prima approssimazione trascurare la repulsione fra gli atomi di idrogeno e la deviazione degli stessi da una configurazione planare; trascureremo inoltre il moto rotazionale della molecola.

Con queste ipotesi si può schematizzare il sistema con un modello unidimensionale dipendente dalla distanza dell'atomo di azoto dal piano formato dagli idrogeni; chiameremo questa coordinata  $z$ . E' naturale supporre che il potenziale di cui risente l'azoto sia simmetrico rispetto al piano ( $z = 0$ ). Un potenziale che è stato suggerito [5] per modellizzare questo sistema è mostrato in Fig. 11

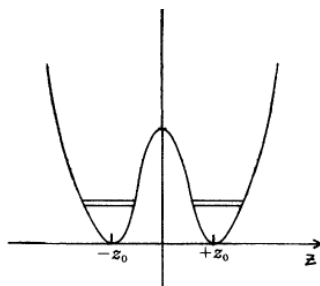


Figura 11: Potenziale schematico cui è sottoposto l'atomo N nella molecola di ammoniaca. Si possono vedere i due livelli energetici distinti, corrispondenti a  $\psi_s$  e  $\psi_a$

La forma di questo potenziale è dovuta principalmente all'interazione coulombiana fra l'azoto e i protoni e elettroni degli atomi di idrogeno e, come si può vedere, è analogo al potenziale del tipo  $V(x) = ax^2 + bx^4$ , precedentemente discusso. Risolvendo l'equazione di Schrödinger, concentrandoci sullo stato fondamentale, è possibile determinare soluzioni che localizzino l'atomo di azoto nella regione  $z > 0$  o  $z < 0$ . Queste funzioni, dette  $\psi_{up}$  e  $\psi_{down}$ , hanno la stessa

energia, ma non hanno parità ben definita. Si può quindi prendere una coppia di combinazioni lineari così definite:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{up} + \psi_{down}) \quad \psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{up} - \psi_{down}) \quad (3.1.1)$$

rispettivamente simmetrica ed antisimmetrica rispetto al cambio di segno della coordinata  $z$ . Tramite queste funzioni viene rimossa la degenerazione in energia: in particolare  $\psi_s$  rappresenta uno stato ad energia inferiore rispetto a  $\psi_a$ . Questo fatto è alla base dello **spettro di inversione dell'ammoniaca**, osservabile qualora un gas di ammoniaca fosse sottoposto a radiazione elettromagnetica nella gamma delle microonde [6].

Risolvere l'equazione di Schrödinger per il potenziale mostrato in figura 10, tuttavia, è impossibile dal punto di vista analitico. E' quindi chiara l'importanza dei metodi di soluzione tramite i ben più semplici autostati dell'oscillatore armonico.

### 3.2 Transizioni di fase di forma nel modello collettivo

Il modello collettivo schematizza il nucleo come una goccia di liquido quantistico capace di vibrare. Conseguentemente si considerano le deformazioni da una condizione di sfericità in termini di uno sviluppo in armoniche sferiche:

$$R(\theta, \phi) = R_0 \left( 1 + \alpha_{00} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right) \quad (3.2.1)$$

Dove  $R_0$  rappresenta il raggio della sfera nella condizione di riposo e  $Y_{\lambda\mu}$  sono le armoniche sferiche. Il grado di libertà più importante è quello che si ottiene per  $\lambda = 2$ , ossia un termine quadrupolare, per cui ci limiteremo ad esso [7]. Le

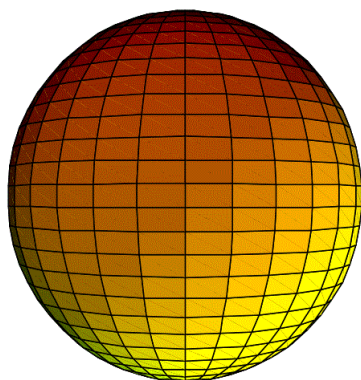


Figura 12: Nucleo sferico,  $\beta = 0$ .

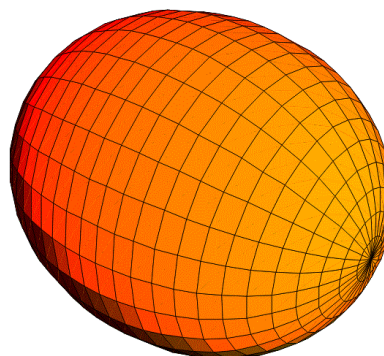


Figura 13: Nucleo deformato,  $\beta > 0$  (ellissoide prolato).

cinque variabili  $\alpha_{2\mu}$ , che descrivono la forma di un nucleo deformato, generano uno spazio a cinque dimensioni e tramite una trasformazione di variabili possono essere messe in relazione con un secondo insieme di variabili. Di questo fanno parte i 3 angoli di Eulero, che descrivono l'orientazione dei tre assi principali del



nucleo (sistema intrinseco) rispetto al sistema di riferimento del laboratorio, e due parametri chiamati  $\beta$  e  $\gamma$ , che racchiudono informazioni circa le deformazioni di quadrupolo.

Il primo,  $\beta$ , rappresenta il grado di deformazione e può essere pensato come il raggio in un appropriato sistema di riferimento polare,  $\gamma$ , invece, varia fra 0 e  $2\pi$  e rappresenta il grado di asimmetria rispetto ad un dato asse. Le Figure 12 e 13 rappresentano un nucleo sferico ( $\beta = 0$ ) e un nucleo prolato ( $\beta > 0$ ).

Un aspetto molto interessante della fenomenologia dei nuclei che può essere interpretato in questo modello è quello delle transizioni di fase di forma (in inglese *Shape-phase transitions*): particolari transizioni di fase in cui il potenziale che descrive la superficie nucleare presenta un minimo per un valore di  $\beta$  diverso da 0, ossia per una configurazione deformata rispetto ad una forma sferica. In particolare, un potenziale dipendente da parametri che schematizza questo fenomeno, è il seguente, indipendente da  $\gamma$ :

$$V(\beta) = a\beta^2 + b\beta^4 \quad (3.2.2)$$

All'interno della hamiltoniana di Bohr

$$\hat{H}_B = \hat{T} + \hat{V}(\beta, \gamma) \quad (3.2.3)$$

che corrisponde all'equazione di Schrödinger nello spazio 5D delle variabili collettive di quadrupolo, il potenziale (3.2.2) non è risolubile analiticamente. Un approccio per fornire una soluzione analitica al punto critico, ossia quando  $a = 0$ , è quello di approssimare il potenziale quartico con una buca infinita [8]. Questo corrisponde alla famosa soluzione E(5) della hamiltoniana di Bohr. Tuttavia, la strada di un approccio numerico del tipo di quello discusso in questa tesi, è stata tentata in maniera fruttuosa in Ref. [9] e si evincono differenze quantitative rispetto al modello a buca quadra (anche se nella sostanza sono qualitativamente equivalenti).

Si vede quindi, ancora una volta, l'importanza di metodi di soluzione numerica in problemi di natura quantistica. Noi non ci addentreremo nel tentare calcoli in questo settore a causa delle complicazioni che si presenterebbero per risolvere il problema in 5D (cfr. ad esempio [10]).

## Conclusione

La motivazione dietro questo lavoro è stata elaborare una procedura che permettesse la comprensione e la modellizzazione di sistemi quantistici nel caso in cui l'equazione di Schrödinger associata a tali sistemi non fosse risolvibile analiticamente. Per arrivare a tale risultato è stato necessario approfondire l'approccio algebrico alla meccanica quantistica, in particolare l'algebra di Heisenberg-Weyl. Questo ha permesso di elaborare una procedura matriciale in grado di studiare in maniera numerica autostati e autovalori di hamiltoniane polinomiali in  $\hat{P}$  e  $\hat{X}$ . La parte di calcolo numerica, in particolare, ha evidenziato alcuni aspetti importanti di queste tecniche, come ad esempio l'importanza di minimizzare gli errori di arrotondamento e troncamento. Il metodo è stato applicato a due casi di meccanica quantistica, la molecola di ammoniaca in fisica molecolare e le vibrazioni della superficie nucleare vista come goccia di fluido per quanto riguarda la fisica nucleare.

## Riferimenti bibliografici

- [1] F. Iachello, *Lie Algebras and Applications*, 163-164, Springer (2006)
- [2] R. Gilmore, *Lie Groups, Physics, and Geometry: An introduction for physicist, Engineers and Chemists*, Cambridge University Press (2006)
- [3] Notes on Heisenberg Algebra,  
<http://infohost.nmt.edu/~iavramid/notes/heisenberg.pdf>
- [4] L. Infeld, T. E. Hull *The Factorization Method*. Rev. Mod. Phys.,23,1,21-68,1951.
- [5] B. H. Bransden, C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, seconda edizione, 564-568, Pearson Education (2003)
- [6] Inversion Spectrum of Ammonia,  
[http://courses.washington.edu/phys432/NH3/ammonia\\_inversion.pdf](http://courses.washington.edu/phys432/NH3/ammonia_inversion.pdf)
- [7] J. M. Eisenberg and W. Greiner, *Nuclear Theory*, North-Holland Publishing Company (1976)
- [8] F. Iachello, *Phys.Rev.Lett.* **85**, 3580 (2000).
- [9] J. M. Arias, C. E. Alonso, A. Vitturi, J.E. Garcia-Ramos, J.Dukelsky and A. Frank, *Phys.Rev.* **C68**, 041302 (2003)
- [10] L. Fortunato , *Eur.J.Phys.* **26**,01 (2005)