Esercizio 1 (Regola d'oro di Fermi) *Determinare la probabilità di transizione per unità di tempo da uno stato $|a\rangle$ ad uno stato $|b\rangle$ al primo ordine perturbativo di un sistema per cui si suppone di aver risolto l'equazione agli autovalori per l'hamiltoniana del sistema non perturbato, avente $|a\rangle$ e $|b\rangle$ come autostati.*

SOLUZIONE.
I tipici problemi in cui bisogna valutare la probabilità di transizione per unità di tempo tra due stati sono quelli di scattering. Per descrivere un processo di scattering, si considera una parte incidente (solitamente un fascio di particelle oppure un'onda elettromagnetica) che interagisce con un sistema "bersaglio" che viene diffuso. L'elemento base per la descrizione di processi di questo tipo è la probabilità di transizione dallo stato del sistema bersaglio prima dell'urto a quello dopo l'urto. Poiché è possibile supporre che all'inizio del processo la parte incidente sia molto lontana dal bersaglio, allora l'hamiltoniana per tale parte incidente sarà quella libera nel continuo. Siccome inoltre gli stati iniziali e finali sono nel continuo, bisognerebbe considerare dei pacchetti d'onde per descrivere la diffusione. Per evitare le difficoltà di calcolo che questo metodo porterebbe, tuttavia, si utilizza l'*estensione adiabatica della carica*.

Sia H_0 l'hamiltoniana del sistema imperturbato; supponiamo risolta l'equazione agli autovalori

$$H_0|E\rangle = E|E\rangle \tag{1}$$

e supponiamo che il sistema sia inizalmente nello stato $|a\rangle$. Tenendo conto dell'interazione con la parte incidente, l'hamiltoniana del sistema diventa

$$H = H_0 + V\,.$$

L'estensione adiabatica della carica consiste nel porre[1]

$$V(t) = \begin{cases} V & t_i \le t \le t_f \\ 0 & \text{altrove} \end{cases} \tag{2}$$

e nel far tendere $t_i \to -\infty$ e $t_f \to +\infty$ al risultato ottenuto. Questo porta al risultato corretto (al primo ordine perturbativo), la Regola d'oro di Fermi.

Calcoliamo la probabilità di transizione $W_{a\to b}$ al primo ordine nelle perturbazioni. Questo significa che, nello sviluppo dell'operatore di evoluzione temporale

$$u(t,t_0) = u_0(t,t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} u^{(n)}(t,t_0) \tag{3}$$

[1] si ometterà, per semplicità di notazione, di scrivere la dipendenza del potenziale dalle coordinate.

si considera solamente il primo termine:

$$u^{(1)}(t,t_0) = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, u_0(t,t_1)\, V(t_1)\, u_0(t_1,t_0)\,, \tag{4}$$

dove $t_0 \leq t_i \leq t_1 \leq t_f \leq t$. Allora si deve calcolare

$$W_{a\to b}(t,t_0) = \left|\langle b|u^{(1)}(t,t_0)|a\rangle\right|^2 \;; \tag{5}$$

dal confronto di (4) e di (5) si osserva che bisogna calcolare la quantità

$$\begin{aligned}\langle b|u_0(t,t_1)\, V(t_1)\, u_0(t_1,t_0)|a\rangle &= \langle b|e^{-i\frac{(t-t_1)}{\hbar}E_b}\, V(t_1)\, e^{-i\frac{(t_1-t_0)}{\hbar}E_a}|a\rangle = \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}t_0\, E_a} e^{-\frac{i}{\hbar}t\, E_b} e^{-i\frac{(E_b-E_a)}{\hbar}t_1}\langle b|V|a\rangle\end{aligned}$$

con $\langle b|V|a\rangle \neq 0$ solo se $t_i \leq t \leq t_f$; dunque l'integrale in (4) deve essere eseguito solamente tra t_i e t_f.

Poniamo $\tau \equiv t_f - t_i$ e

$$\omega_{ba} \equiv \frac{E_b - E_a}{\hbar}\,. \tag{6}$$

Allora possiamo scrivere

$$\begin{aligned}W_{a\to b}(t,t_0) &= \left|\frac{1}{i\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}t_0\, E_a}\, e^{-\frac{i}{\hbar}t\, E_b}\int_{t_i}^{t_f} dt_1\, e^{-i\frac{(E_b-E_a)}{\hbar}t_1}\langle b|V|a\rangle\right|^2 = \\ &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle b|V|a\rangle\right|^2\left|\frac{e^{-i\omega_{ba}t_f} - e^{-i\omega_{ba}t_i}}{-2i\frac{\omega_{ba}}{2}}\right|^2 = \\ &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle b|V|a\rangle\right|^2\left|e^{-i\omega_{ba}\frac{(t_f+t_i)}{2}}\,\frac{e^{i\omega_{ba}\frac{\tau}{2}} - e^{-i\omega_{ba}\frac{\tau}{2}}}{2i\frac{\omega_{ba}}{2}}\right|^2 = \\ &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle b|V|a\rangle\right|^2\left|e^{-i\omega_{ba}\,\frac{(t_f+t_i)}{2}}\,\frac{\sin\left(\omega_{ba}\frac{\tau}{2}\right)}{\frac{\omega_{ba}}{2}}\right|^2 = \\ &= \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle b|V|a\rangle\right|^2\,\frac{\sin^2\left(\omega_{ba}\frac{\tau}{2}\right)}{\left(\frac{\omega_{ba}}{2}\right)^2}\end{aligned}$$

Per calcolare la probabilità di transizione per unità di tempo $w_{a\to b}$, bisogna eseguire il limite

$$t_i \to -\infty \quad t_f \to +\infty$$

in modo da recuperare V costante $\forall\, t \in \mathbb{R}$ ("spegniamo la carica"). Allora si ha

$$w_{a\to b} = \lim_{\tau\to\infty}\frac{W_{a\to b}(\tau)}{\tau}\,. \tag{7}$$

Lemma 1
$$\tilde{\mathcal{S}} - \lim_{\tau\to\infty} \frac{\sin^2(x\tau)}{x^2\tau} = \pi\,\delta(x) \tag{8}$$
dove il limite si intende eseguito nel senso delle distribuzioni[2].

Dimostrazione.
Per eseguire il limite nel senso delle distribuzioni, bisogna applicare una funzione di prova $f \in \mathcal{S}$ a (8):

$$\lim_{\tau\to\infty} \int dx\, \frac{\sin^2(x\tau)}{x^2\tau}\, f(x) \tag{9}$$

e bisogna mostrare che questo è uguale a $\pi\, f(0)$. Posto $y = x\tau$, l'espressione precedente diventa

$$\lim_{\tau\to\infty} \int dy\, \frac{\sin^2(y)}{y^2}\, f\left(\frac{y}{\tau}\right) = c\, f(0) \tag{10}$$

perché nel limite il supporto di f diventa l'origine. Bisogna dunque calcolare il valore della costante
$$c = \int dy\, \frac{\sin^2 y}{y^2}\,. \tag{11}$$
Per fare ciò, osserviamo che

$$\int_{-1}^{1} dp\, \frac{1}{2}\, e^{ipy} = \frac{1}{2iy}\left(e^{iy} - e^{-iy}\right) = \frac{\sin y}{y}$$

e analogamente

$$\int_{-1}^{1} dq\, \frac{1}{2}\, e^{-iqy} = -\frac{1}{2iy}\left(e^{-iy} - e^{iy}\right) = \frac{\sin y}{y}$$

di conseguenza

$$\begin{aligned} \int dy\, \frac{\sin^2 y}{y^2} &= \frac{1}{4}\int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-1}^{1} dp \int_{-1}^{1} dq\, e^{-i(p-q)y} = \\ &= \frac{1}{4}\int_{-1}^{1} dp \int_{-1}^{1} dq\, 2\pi\,\delta(p-q) = \\ &= \frac{1}{4}\cdot 2\cdot 2\pi = \pi \end{aligned}$$

da cui $c = \pi$.

[2]Osserviamo che, nel nostro caso, $x = \omega_{ba}/2$

$\square$

A questo punto possiamo scrivere

$$w_{a\to b} = \frac{\pi}{\hbar^2}|\langle b|V|a\rangle|^2\,\delta\left(\frac{\omega_{ba}}{2}\right) \tag{12}$$

ossia, ricordando che $\delta\left(\frac{\omega_{ba}}{2}\right) = \delta\left(\frac{E_b - E_a}{2\hbar}\right) = 2\hbar\,\delta(E_b - E_a)$ [3],

$$w_{a\to b} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle b|V|a\rangle|^2\,\delta\left(E_b - E_a\right)\ , \tag{13}$$

che è la *Regola d'oro di Fermi*. Osserviamo che la $\delta\left(E_b - E_a\right)$ rappresenta la densità della degenerazione in energia: nel limite $\tau \to 0$, per la conservazione dell'energia non possono avvenire transizioni se $E_b \neq E_a$.

$\square$

Esempio 1 *Supponiamo di avere una perturbazione armonica per un sistema:*

$$H = H_0 + V(t) \tag{14}$$

con

$$V(t) = Be^{i\omega t} + B^\dagger e^{-i\omega t} \tag{15}$$

(si osserva che $V = V^\dagger$ è hermitiano). Calcolare la probabilità di transizione per unità di tempo tra lo stato iniziale $|a\rangle$ e lo stato $|b\rangle$.

Soluzione.
Supponiamo che $V(t)$ agisca nell'intervallo di tempo $0 \leq t \leq T$: ad esempio un'onda monocromatica che interagisce con il sistema nell'intervallo di tempo tra 0 e T. In tal caso la probabilità di transizione dallo stato $|a\rangle$ allo stato $|b\rangle$ è

$$\begin{aligned}
W_{a\to b} &= \left|\langle b|\frac{1}{i\hbar}\int_0^T dt\, e^{-i\frac{(T-t)}{\hbar}E_b}\, V(t)\, e^{-i\frac{E_a t}{\hbar}}\,|a\rangle\right|^2 = \\
&= \left|\langle b|\frac{1}{i\hbar}\int_0^T dt\, e^{i\frac{E_b t}{\hbar}}\, V(t)\, e^{-i\frac{E_a t}{\hbar}}\,|a\rangle\right|^2 = \\
&= \left|\frac{1}{i\hbar}\langle b|B|a\rangle\int_0^T dt\, e^{i(\omega_{ba}+\omega)t} + \frac{1}{i\hbar}\langle b|B^\dagger|a\rangle\int_0^T dt\, e^{i(\omega_{ba}-\omega)t}\right|^2 = \\
&= \left|\frac{1}{i\hbar}\langle b|B|a\rangle\frac{\left(e^{i(\omega_{ba}+\omega)T} - 1\right)}{2i\,\frac{(\omega_{ba}+\omega)}{2}} + \frac{1}{i\hbar}\langle b|B^\dagger|a\rangle\frac{\left(e^{i(\omega_{ba}-\omega)T} - 1\right)}{2i\,\frac{(\omega_{ba}-\omega)}{2}}\right|^2 =
\end{aligned}$$

[3] una delle proprieta della δ di Dirac è che $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$.

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{\hbar^2}\Bigg|\langle b|B|a\rangle e^{i(\omega_{ba}+\omega)\frac{T}{2}}\frac{\sin\left((\omega_{ba}+\omega)\frac{T}{2}\right)}{\frac{(\omega_{ba}+\omega)}{2}}+\\
&\quad +\langle b|B^{\dagger}|a\rangle e^{i(\omega_{ba}-\omega)\frac{T}{2}}\frac{\sin\left((\omega_{ba}-\omega)\frac{T}{2}\right)}{\frac{(\omega_{ba}-\omega)}{2}}\Bigg|^2
\end{aligned}
$$

Osserviamo che la funzione $\frac{\sin\left(\omega'\frac{T}{2}\right)}{\frac{\omega'}{2}}$ ha un massimo pronunciato quando $\omega' = 0$. Di conseguenza, nell'ultima espressione, il primo addendo costituisce il termine dominante quando $\omega_{ba} + \omega \simeq 0$, ossia quando $E_b - E_a + \hbar\omega \simeq 0$. Analogamente, il secondo addendo è il termine dominante quando $\omega_{ba} - \omega \simeq 0$, ossia quando $E_b - E_a - \hbar\omega \simeq 0$.
Se $V(t)$ rappresenta un'onda elettromagnetica, nel primo caso si ha l'*emissione stimolata* di un fotone di energia $\hbar\omega \simeq E_a - E_b$, mentre nel secondo caso si parla di *assorbimento* di un fotone di energia $\hbar\omega \simeq E_b - E_a$. Poiché le energie alle quali questi fenomeni avvengono con maggiore probabilità sono prossime a quelle del fotone assorbito od emesso, si parla, in questi casi, di *formule di risonanza*.

Siccome le due predominanze caratteristiche dei processi di assorbimento e di emissione sono ben distinte, allora, in prima approssimazione, è possibile trascurare i termini di interferenza per $W_{a\to b}$. Dunque l'espressione per la probabilità di transizione per unità di tempo diventa

$$
\begin{aligned}
w_{a\to b} &= \lim_{T\to 0}\frac{W_{a\to b}(T)}{T} =\\
&= \frac{1}{\hbar^2}\lim_{T\to 0}\left[|\langle b|B|a\rangle|^2\frac{\sin^2\left((\omega_{ba}+\omega)\frac{T}{2}\right)}{\left(\frac{(\omega_{ba}+\omega)}{2}\right)^2 T}\right]+\\
&\quad +\frac{1}{\hbar^2}\lim_{T\to 0}\left[|\langle b|B^{\dagger}|a\rangle|^2\frac{\sin^2\left((\omega_{ba}-\omega)\frac{T}{2}\right)}{\left(\frac{(\omega_{ba}-\omega)}{2}\right)^2 T}\right] =\\
&= \frac{2\pi}{\hbar}\left(|\langle b|B|a\rangle|^2\,\delta\left(E_b-E_a+\hbar\omega\right)+|\langle b|B^{\dagger}|a\rangle|^2\,\delta\left(E_b-E_a-\hbar\omega\right)\right)
\end{aligned}
$$

ossia

$$
w_{a\to b} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(|\langle b|B|a\rangle|^2\,\delta\left(E_b-E_a+\hbar\omega\right)+|\langle b|B^{\dagger}|a\rangle|^2\,\delta\left(E_b-E_a-\hbar\omega\right)\right) \tag{16}
$$

che è la regola d'oro di Fermi. Infatti, siccome, a seconda della ω, è possibile considerare solamente emissione od assorbimento, allora la regola d'oro per emissione coincide con il primo addendo di (16), mentre la regola d'oro per l'assorbimento coincide con il secondo addendo di tale espressione.

□