

ASPETTI MATEMATICI DELLE RISONANZE QUANTISTICHE

ANDRÉ MARTINEZ

Università di Bologna, Dipartimento di Matematica
Piazza di Porta San Donato, 40127 Bologna, Italy
andre.martinez@unibo.it

Seminario “Topics in Mathematics” dell’Università di Bologna

1 giugno 2011

1. IL RISONATORE DI HELMHOLTZ

Il risonatore di Helmholtz è un dispositivo fisico concepito da Hermann von Helmholtz nel 1860, con lo scopo di studiare la propagazione del suono e la sua percezione. Si tratta di un piccolo contenitore solido il cui interno (la cavità) è collegato all’esterno tramite un collo di forma cilindrica. Praticamente, è abbastanza simile a una bottiglia (ad esempio di vino). Del resto, ognuno sa bene che, soffiando con una certa forza nell’apertura di una bottiglia, viene fuori un suono più o meno profondo, e che dura più o meno a lungo, secondo la forma della bottiglia. Inoltre, la frequenza di questo suono non dipende del modo in cui si soffia, e il suono persiste sempre un po’ anche dopo che si è smesso di soffiare. È proprio l’insieme di questi due dati (la frequenza e la persistenza del suono) che costituisce quello che si chiama una risonanza (in questo caso, si parlerà di *risonanza di diffusione*).

Fisicamente, il fenomeno si spiega con il fatto che, soffiando nella bottiglia, aumenta la pressione dell’aria che contiene. Un po’ d’aria sarà quindi espulsa dal fatto della differenza di pressione con l’esterno. Quest’aria avendo però una certa massa, le sue proprietà d’inerzia faranno sì che, alla fine di tale espulsione, la pressione all’interna della bottiglia sarà diventata inferiore a quella esterna. Così, un po’ d’aria sarà di nuovo aspirato dalla bottiglia, e la sequenza si ripeta dall’inizio, innescando un processo vibrazionale che percepiamo come un suono.

Dal punto di vista matematico, la modellizzazione di questo esperimento parte da l’equazione delle onde,

$$(1.1) \quad (\partial_t^2 - \Delta)u = 0$$

dove $u = u(t, x)$ (oppure la sua parte reale, nel caso si consideri anche soluzioni complesse) rappresenta la pressione dell'aria nel punto $x \in \mathbb{R}^3$ al tempo t , e $\Delta := \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j}^2$ è l'operatore di Laplace in \mathbb{R}^3 . Nel nostro caso, l'equazione (1.1) deve essere soddisfatta nel complementario Ω del risonatore, e per semplicità si assume anche che u sia uguale a 0 sul bordo di Ω (pareti perfettamente riflettenti). In queste condizioni, la soluzione di (1.1) sarà determinata in modo unico dai dati iniziali:

$$(1.2) \quad u|_{t=0} = u_0 \quad ; \quad \partial_t u|_{t=0} = u_1.$$

Nel caso particolare in cui si possono prendere u_0 e u_1 in tale modo che si verifichi,

$$(1.3) \quad -\Delta u_0 = \omega^2 u_0 \quad ; \quad u_1 = -i\omega u_0,$$

per qualche $\omega \in \mathbb{R}$, allora si vede che la soluzione è data da,

$$(1.4) \quad u(t, x) = e^{-i\omega t} u_0(x).$$

In particolare, in questo caso, si ha $|u(t, x)| = |u_0(x)|$ per ogni tempo t , il che significa che l'intensità del suono rimane costante nel tempo. Questo significa che, se $u_0(x) \neq 0$, il suono percepito nella posizione x non si fermerà mai.

Come si può indovinare, però, questo non può avvenire se Ω è, come nel caso del risonatore di Helmholtz, il complementario di un sottoinsieme compatto di \mathbb{R}^3 . Come si vede (o piuttosto come si sente) nell'esperimento della bottiglia, il suono si attutisce e finisce sempre per scomparire, e quindi il modello precedente non si applica. Ciononostante, basandosi sui precedenti calcoli, esiste un modo formale per capire il fenomeno delle risonanze. Questo modo consiste a riprendere esattamente la stessa soluzione (1.4) che abbiamo trovato, ma questa volta con $\omega = \alpha - i\beta \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, $\beta > 0$. In questo caso viene,

$$|u(t, x)| = |e^{-i\omega t} u_0| = |e^{-i(\alpha - i\beta)t}| \cdot |u_0| = e^{-\beta t} |u_0|,$$

che tende a 0 quando t tende a $+\infty$, il che rende conto del fatto che il suono si attutisce. D'altro canto, anche se la convergenza è esponenziale, la quantità $e^{-\beta t}$ rimane dell'ordine di 1 finché t non supera l'ordine di $1/\beta$. Per questa ragione, la quantità $1/\beta$ sarà chiamata il *tempo di vita* del suono, mentre, la quantità α va interpretata come la *frequenza* del suono. Più sinteticamente, sarà la quantità complessa $\alpha - i\beta$ ad essere chiamata *risonanza*.

Rimane però il problema di giustificare l'esistenza di dati iniziali che soddisfino (1.3) con una ω complessa. Vedremo più avanti come si risolve.

2. RISONANZE QUANTISTICHE

Consideriamo adesso il problema delle risonanze nell'ambito della meccanica quantistica. Una particella quantistica è descritta da una funzione $\psi_t(x)$ (detta *funzione d'onda*, oppure *stato* della particella) che dipende sia dal

tempo t che della cosiddetta *variabile di posizione* $x \in \mathbb{R}^3$. Inoltre, questa funzione deve soddisfare,

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_t(x)|^2 dx = 1,$$

cosicché la quantità $|\psi_t(x)|^2$ non è altro che una densità di probabilità su \mathbb{R}^3 . Si tratta infatti della densità di probabilità di presenza della particella in x al tempo t . In altre parole, per ogni $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, la quantità $\int_{\Omega} |\psi_t(x)|^2 dx$ rappresenta la probabilità di trovare la particella in Ω al tempo t .

D'altro canto, l'analogo quantistico dell'equazione di Newton, che descrive l'evoluzione della particella quando viene immersa in un campo di forze conservativo $F = -\nabla V$, è la famosa *equazione di Schrödinger*:

$$(S) : \quad i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial t} = P_V \psi_t,$$

dove $P_V := -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$ è il cosiddetto *operatore di Schrödinger* (in questa equazione, $\hbar > 0$ designa la costante di Planck ridotta, che è molto piccola, e $m > 0$ la massa della particella).

Se ad esempio lo stato iniziale ψ_0 (cioè il valore di ψ_t a $t = 0$) è un'*autofunzione* di P , nel senso che si ha,

$$P_V \psi_0 = E \psi_0,$$

per qualche valore $E \in \mathbb{R}$ (l'*energia* della particella), allora si vede che l'unica ψ_t possibile, soluzione di (S), è data da,

$$\psi_t(x) = e^{-itE/\hbar} \psi_0(x).$$

In particolare, la probabilità di presenza della particella in qualsiasi regione dello spazio non cambia con il tempo:

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad \int_{\Omega} |\psi_t(x)|^2 dx = \int_{\Omega} |\psi_0(x)|^2 dx = \text{costante}.$$

All'opposto, si possono trovare degli stati ψ_0 (detti *stati di diffusione*), per i quali si verifica una *decrescenza locale dell'energia*, vale a dire la proprietà secondo la quale si ha,

$$\int_{\Omega} |\psi_t(x)|^2 dx \rightarrow 0 \quad \text{per } t \rightarrow \pm\infty,$$

per ogni $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ limitato (come prima, qui ψ_t sta per la soluzione di (S) con valore iniziale ψ_0). Fisicamente, questo significa che la particella uscirà con probabilità 1 di qualsiasi regione limitata di \mathbb{R}^3 , e dopo un certo tempo non ci tornerà mai più. Il problema rimane, però, di avere un'idea di quanto tempo ci vorrà perché questo accada.

Il fenomeno di risonanza nasce proprio nel caso in cui questo tempo è, in qualche senso, molto lungo'. Come nel caso del risonatore di Helmholtz, una possibile spiegazione formale consiste nel riscrivere i risultati precedenti nel caso di uno stato iniziale associato ad un'energia complessa $E = a - ib$, con $b > 0$ molto piccolo (diciamo, tipicamente, dell'ordine di $e^{-1/\hbar}$), ovvero uno

stato iniziale ψ_0 soluzione di $P_V\psi_0 = (a - ib)\psi_0$. In questo caso, la soluzione di (S) diventa,

$$\psi_t(x) = e^{-bt/\hbar} e^{-ita/\hbar} \psi_0(x),$$

e quindi,

$$\int_{\Omega} |\psi_t(x)|^2 dx = e^{-bt/\hbar} \int_{\Omega} |\psi_0(x)|^2 dx = \mathcal{O}(e^{-bt/\hbar}).$$

Di nuovo, ritroviamo il fatto che questa quantità rimane dell'ordine di 1 finché t non supera valori sufficientemente grandi, dell'ordine di $\hbar/b \approx \hbar e^{1/\hbar}$. In modo del tutto analogo al caso del risonatore di Helmholtz, la quantità $a - ib$ è chiamata risonanza quantistica, mentre il valore \hbar/b è chiamato il tempo di vita della particella.

Osservazione Esiste uno stretto legame fra il formalismo quantistico e l'equazione delle onde del capitolo precedente. Infatti, è facile vedere che l'equazione delle onde,

$$(\partial_t^2 - \Delta)u = 0$$

equivale all'equazione di tipo Schrödinger,

$$i\partial_t v = Pv,$$

dove abbiamo denotato:

$$v := \begin{pmatrix} u \\ \partial_t u \end{pmatrix} \quad ; \quad P := \begin{pmatrix} 0 & i \\ i\Delta & 0 \end{pmatrix}.$$

In particolare, l'operatore P è simmetrico per il prodotto scalare definito da:

$$\left\langle \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} \right\rangle := \int_{\mathbb{R}^3} v_2(x) \overline{w_2(x)} dx + \int_{\mathbb{R}^3} \nabla v_1(x) \overline{\nabla w_1(x)} dx.$$

Inoltre, la risolvente di P è collegata a quella di $-\Delta$ tramite la formula:

$$(P - \omega)^{-1} = (-\Delta - \omega^2)^{-1} \begin{pmatrix} \omega & i \\ i\Delta & \omega \end{pmatrix}.$$

Se ne può dedurre che ω^2 sarà un autovalore (o una risonanza) di $-\Delta$ se e solo se ω lo sarà per P .

3. TEORIA MATEMATICA

Adesso il problema è quello di cercare un quadro ben definito nel quale l'equazione $Pu = Eu$ abbia delle soluzioni non banali anche con (alcuni) valori complessi di E . Solo in questo modo si potrà sperare di potere giustificare gli argomenti formali sviluppati nelle sezioni precedenti.

Praticamente, esistono due punti di vista per farlo (che per fortuna si rivelano equivalenti). Uno consiste nella cosiddetta tecnica della 'distorsione analitica', l'altro nello studio dei poli della risolvente.

3.1. Distorsione analitica. Si tratta di una tecnica che risale all'inizio degli anni 70 (successivamente modificata e migliorata), e che è stata poi riscoperta recentemente nell'ambito dell'analisi numerica sotto il nome di 'perfectly matched layers' (PML).

Qui considereremo solo il caso dell'operatore di Schrödinger, ma si può chiaramente generalizzare a molti altri operatori autoaggiunti (in particolare quello dell'osservazione della sezione precedente). Inoltre, siccome la teoria può essere fatta in qualsiasi dimensione, sostituiamo \mathbb{R}^3 con \mathbb{R}^n , $n \geq 1$.

Questa tecnica consiste a fare agire l'operatore P , anziché su $L^2(\mathbb{R}^n)$, piuttosto sullo spazio $L^2(\Gamma_\theta)$; dove $\Gamma_\theta \subset \mathbb{C}^n$ è della forma,

$$\Gamma_\theta := \{(x + i\theta f(x); x \in \mathbb{R}^n)\},$$

con $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ un campo vettoriale C^∞ tale che,

- $f(x) = 0$ per $|x| \leq R$ ($R > 0$ arbitrariamente grande);
- $f(x) = x$ per $|x| \gg 1$,

e con $\theta > 0$ costante e sufficientemente piccolo.

Per ogni θ , l'applicazione $x \mapsto x + i\theta f(x)$ si chiama una *distorsione analitica*, e si supponga che il potenziale V sia analitico sull'unione delle immagini di queste applicazioni quando θ descrive un intervallo $[0, \theta_0]$. Se inoltre V tende a 0 all'infinito, allora si può dimostrare che lo spettro di P_V , visto come operatore su $L^2(\Gamma_\theta)$, è della forma:

$$\sigma(P_V |_{L^2(\Gamma_\theta)}) = \{\lambda_j; j \in \mathbb{N}\} \cup e^{-i\mu(\theta)}\mathbb{R}_+ \cup \{\rho_k; k \in \mathbb{N}\},$$

dove:

- I λ_j sono gli autovalori (reali negativi) di $P_V |_{L^2(\mathbb{R}^n)}$, e sono anche autovalori di $P_V |_{L^2(\Gamma_\theta)}$;
- $\mu(\theta) = 2 \arctan \theta > 0$ piccolo;
- I ρ_k sono gli autovalori complessi di $P_V |_{L^2(\Gamma_\theta)}$ che appartengono al settore:

$$S_\theta := \bigcup_{0 < \mu < \mu(\theta)} e^{-i\mu(\theta)}\mathbb{R}_+.$$

Il fatto sorprendente è che, questi numeri ρ_k , *non dipendono dalla scelta di θ* , nel senso che, per due valori diversi $0 < \theta_1 < \theta_2$ di θ , tali numeri saranno gli stessi nel settore più piccolo S_{θ_1} . Aumentando θ , allora aumenta anche il settore S_θ , e l'unica cosa che può succedere è che appaiono nuovi numeri complessi ρ_k nella nuova parte del settore, rimanendo fermi quelli già apparsi prima. Inoltre, si dimostra che anche la scelta del campo f non ha influenza sui valori dei ρ_k .

Sono proprio questi valori ρ_k ad essere chiamati *risonanze* di P_V .

3.2. Poli della risolvete. Siccome P_V (visto come operatore non limitati su $L^2(\mathbb{R}^n)$) è auto-aggiunto, il suo spettro è reale e quindi, per $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, la sua risolvete in z ,

$$R(z) := (P_V - z)^{-1}$$

è ben definita e dipende in modo olomorfo di z su $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \supset \{\text{Im } z > 0\}$. Se V possiede convenienti proprietà di analiticità e tende a 0 all'infinito, allora si può dimostrare che, per ogni funzione $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, l'operatore limitato,

$$\chi(P - z)^{-1}\chi$$

(in cui χ sta per l'operatore di moltiplicazione per la funzione χ) si può prolungare, a partire da $\{\text{Im } z > 0\}$, in una funzione meromorfa di z , a valore operatori limitati, in qualsiasi regione complessa del tipo,

$$\mathbb{C}_\mu := \mathbb{C} \setminus e^{-i\mu}\mathbb{R}_+,$$

con $\mu > 0$ abbastanza piccolo. Inoltre, i poli di questa funzione si suddividono in due parti:

$$\text{Poli}(\chi(P - z)^{-1}\chi) = \Lambda_1(\chi) \cup \Lambda_2(\chi)$$

con,

$$\Lambda_1(\chi) \subset \sigma_p(P_V) \quad ; \quad \Lambda_2(\chi) \subset \bigcup_{0 < \nu < \mu} e^{-i\nu}\mathbb{R}_+,$$

dove $\sigma_p(P_V)$ sta per l'insieme degli autovalori (reali negativi) di P_V . Anche qui, è da notare che gli insiemi $\Lambda_1(\chi)$ e $\Lambda_2(\chi)$ non dipendono realmente da χ , nel senso che quando si aumenta il supporto di χ , allora il numero di elementi di questi insiemi può eventualmente aumentare ma i loro valori non si spostano (in realtà, se il supporto di χ è preso sufficientemente grande, allora non dipendono più in nessun altro modo della scelta di χ).

In questo ambito, sono gli elementi di $\Lambda_2(\chi)$ ad essere chiamati risonanze di P_V , e si può dimostrare che coincidono con quelle definite tramite la distorsione analitica.

4. ALCUNI RISULTATI E PROSPETTIVE

Una volta definite le risonanze, rimane il problema sapere determinarle o, perlomeno, di saperne determinare alcune. Come abbiamo visto, tale determinazione fornisce informazioni sulla decrescenza dell'energia locale, nonché sulla stabilità del sistema e sul suo tempo di vita.

Ecco alcuni risultati che si applicano all'operatore di Schrödinger nel limite semiclassico (cioè per \hbar sufficientemente piccolo), e che per lo più sono stati ottenuti solo in questi ultimi anni. In modo generale, l'idea seguita da questi risultati è che la distribuzione delle risonanze nel piano complesso deve essere strettamente collegata alla geometria dell'evoluzione classica, ovvero al flusso Hamiltoniano $H_p := (\frac{1}{m}\xi, -\nabla V(x))$ dell'osservabile di energia $p(x, \xi) := \frac{1}{2m}\xi^2 + V(x)$.

Più precisamente, per $(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2n}$, denotiamo $\gamma(x, \xi) \subset \mathbb{R}^{2n}$ l'unica curva integrale massimale del campo H_p che contiene (x_0, ξ_0) (in particolare, il

teorema di conservazione dell'energia ci dice che la quantità $p(x, \xi)$ è costante lungo $\gamma(x_0, \xi_0)$. Per $E_0 \in \mathbb{R}$, si definisce il cosiddetto *insieme intrappolato* (in inglese *trapped set*) di energia E_0 ,

$$K(E_0) := \{(x_0, \xi_0) \in \mathbb{R}^{2n} ; \gamma(x_0, \xi_0) \text{ è limitata in } \mathbb{R}^{2n}\}.$$

Allora, esiste tutta una serie di risultati sulle risonanze di P_V vicine a E_0 , secondo la geometria di questo insieme $K(E_0)$. Eccone alcuni:

- Se $K(E_0) = \emptyset$, allora esiste un intorno di E_0 che non contiene risonanze;
- Se $K(E_0)$ consiste in un solo punto iperbolico, allora esistono risonanze intorno a E_0 , e la loro parte immaginaria è minore di $-\delta\hbar$ per qualche costante $\delta > 0$ indipendente di \hbar ;
- Se $K(E_0)$ consiste in un solo punto ellittico, allora esistono risonanze intorno a E_0 , e la loro parte immaginaria (negativa) è maggiore di $-Ce^{-S/\hbar}$ con delle costanti $C, S > 0$ indipendenti di \hbar (S ha anche un significato geometrico preciso);
- Se $K(E_0)$ consiste in una traiettoria di tipo iperbolico, allora esistono risonanze intorno a E_0 , e la loro parte immaginaria è minore di $-\delta\hbar$ per qualche costante $\delta > 0$ indipendente di \hbar ;

Ci sono inoltre altri risultati più complicati da descrivere, in cui $K(E_0)$ può essere molto meno regolare (addirittura frattale), e nei quali si riesce comunque ad avere informazioni abbastanza precise sulla posizione delle risonanze vicine a E_0 .

D'altra parte, la teoria non si limita allo studio dell'operatore di Schrödinger o del risonatore di Helmholtz, e può essere usata in altri contesti della fisica matematica. Ad esempio, alcuni risultati molto recenti riguardano lo studio dei buchi neri, che sono descritti tramite delle equazioni delle onde associate a metriche non convenzionali (Schwarzschild-de Sitter, Kerr-de Sitter, ...). In questo caso, le risonanze sono collegate a cosiddetti *quasi normal modes*, che corrispondono a frequenze di onde gravitazionali emesse dai buchi neri (aprendo così la possibilità di potere un giorno rilevare più facilmente tali buchi neri).

REFERENCES

- [FLM] Fujiie, S., Lahmar-Benbernou, A., Martinez, A., *Width of shape resonances for non globally analytic potentials*, to appear in Journal of the Mathematical Society of Japan (2011).
- [HeSj1] Helffer, B., Sjöstrand, J., *Multiple Wells in the Semiclassical Limit I*, Comm. in P.D.E. **9(4)** (1984), pp.337-408.
- [HeSj2] Helffer, B., Sjöstrand, J., *Résonances en limite semi-classique*, Bull. Soc. Math. France 114, Nos. 24-25 (1986)
- [KI] Klein, M., *On the mathematical theory of predissociation*, Annals of Physics, Vol. 178, No. 1, 48-73 (1987)
- [KMSW] Klein, M., Martinez, A., Seiler, R., Wang, X.P. *On the Born-Oppenheimer Expansion for Polyatomic Molecules*, Comm. Math. Physics 143, 607-639 (1992)

- [MaSo] Martinez, M., Sordani, V., *Twisted pseudodifferential calculus and application to the quantum evolution of molecules*, Memoirs of the AMS, No. 936 (2009)
- [Pe] Pettersson, P., *WKB expansions for systems of Schrödinger operators with crossing eigenvalues*, Asymptot. Anal. 14 (1997), no. 1, 1–48.