

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI
FEDERICO II

FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E
NATURALI

ANNO ACCADEMICO 2003/2004

TESI DI LAUREA IN FISICA

**Operatori non limitati in Meccanica Quantistica
ovvero l'importanza di esser Autoaggiunti**

Candidato:
Fabio Baruffa
matr. 567/03

Relatore:
Prof. Fedele Lizzi

Indice

0.1	Introduzione	5
1	Paradossi del formalismo matriciale	6
1.1	Buca di potenziale infinita	6
1.1.1	Sorgere delle contraddizioni	7
1.2	Semplici indizi per la comprensione del paradosso	9
1.3	Operatori di creazione e di distruzione per l'oscillatore armonico unidimensionale	10
1.3.1	Una semplice contraddizione	11
1.4	Tracce su spazi finiti ed infiniti	12
1.4.1	Passaggio da $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ a l_2	14
2	Formalismo degli Operatori Lineari	16
2.1	Operatore Lineare	16
2.2	Operatori Limitati	18
2.2.1	Proprietà degli Operatori Limitati	18
2.2.2	Teorema di rappresentazione	19
2.3	Operatore aggiunto per operatori limitati	21
2.4	Operatore aggiunto per operatori non limitati	22
2.4.1	L'operatore momento su un intervallo limitato	23
3	Osservabili e spettro	25
3.1	Osservabili ed Operatori Autoaggiunti	25
3.2	Autofunzioni ed Autovalori	26
3.2.1	Autofunzioni proprie	26
3.2.2	Autofunzioni improprie	27
3.2.3	Autofunzioni generalizzate	28
3.3	Criterio di Autoaggiuntezza	29
3.4	Spettro residuo per l'operatore momento	31
A		33
A.1	Calcolo della serie $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{(2n-1)^4}$	33
A.2	Calcolo degli elementi di matrice degli operatori a e a^\dagger	36

*Il senso comune è quello strato di pregiudizi depositatisi
nella mente umana prima dei diciotto anni.*

Albert Einstein.

0.1 Introduzione

Ancora ci devo pensare

Capitolo 1

Paradossi del formalismo matriciale

Il seguente capitolo vuole illustrare come un'analisi superficiale di un problema fisico può condurre a dei risultati contraddittori, poichè spesso trascuriamo di trattarlo con sufficiente rigore matematico. Queste sorprese possono essere spiegate ricorrendo ad una più profonda attenzione agli osservabili coinvolti e quindi adoperando opportuni *operatori autoaggiunti*.

1.1 Buca di potenziale infinita

Consideriamo il problema di una particella di massa m in una buca di potenziale unidimensionale infinitamente profonda di larghezza L come limite di una buca finita, con condizioni al contorno che permettono l'annullamento della funzione d'onda agli estremi dell'intervallo di ampiezza L , in modo da garantire la continuità della stessa.

L'operatore Hamiltoniano per una particella libera all'interno della buca è:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

con dominio di definizione:

$$D(H) = \left\{ \phi \in L^2\left(-\frac{L}{2}, +\frac{L}{2}\right) \mid H\phi \in L^2\left(-\frac{L}{2}, +\frac{L}{2}\right), \phi\left(\pm\frac{L}{2}\right) = 0 \right\}. \quad (1.1)$$

Risolviamo l'equazione di Schrödinger agli autovalori per trovare gli stati stazionari del sistema:

$$H\phi(x) = E\phi(x). \quad (1.2)$$

La soluzione generale dell'equazione (1.2) è una combinazione lineare delle seguenti funzioni:

$$\text{per } n \text{ pari} \quad \Phi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (1.3)$$

$$\text{per } n \text{ dispari} \quad \Phi'_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \quad (1.4)$$

Gli autovalori dell'energia sono:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2L^2} n^2 \quad (1.5)$$

Il fatto che le autofunzioni hanno parità definita è dovuto dall'invarianza per parità del potenziale $V(x)$, essendo $V(x) = V(-x)$. Inoltre esse sono continue in $x = \pm \frac{L}{2}$.

1.1.1 Sorgere delle contraddizioni

Prima di discutere il problema dell'autoaggiuntezza dell'operatore Hamiltoniano H e quali siano le relative conseguenze matematiche sullo studio del moto di questo sistema fisico, cerchiamo di mettere in evidenza in che modo possono sorgere delle incoerenze nei risultati di alcune misure.

Supponiamo che la particella si trovi in uno stato definito dalla funzione d'onda :

$$\Psi(x) = -\sqrt{\frac{30}{L^5}} \left(x^2 - \frac{L^2}{4}\right), \quad |x| < \frac{L}{2}; \quad \Psi(x) = 0, \quad |x| \geq \frac{L}{2} \quad (1.6)$$

ed ora calcoliamo il valor medio dell'energia e lo scarto quadratico medio nello stato (1.6).

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} |b_n|^2 E_n \quad (1.7)$$

Dove i coefficienti b_n sono

$$b_n = \langle \Phi_n | \Psi \rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \overline{\Phi_n} \Psi(x) dx = -\frac{2\sqrt{15}}{L^3} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \left(x^2 - \frac{L^2}{4}\right) dx = 0$$

poichè si è fatta un'integrazione di una funzione dispari su un intervallo pari. Solo il seguente prodotto scalare con le autofunzioni di tipo Φ'_n risulta diverso da zero :

$$\begin{aligned} b_n = \langle \Phi'_n | \Psi \rangle &= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \overline{\Phi'_n} \Psi(x) dx = -\frac{2\sqrt{15}}{L^3} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \left(x^2 - \frac{L^2}{4}\right) dx \\ &= -\frac{4\sqrt{15}(n\pi \cos(\frac{n\pi}{2}) - 2 \sin(\frac{n\pi}{2}))}{n^3 \pi^3} \end{aligned}$$

sostituendo nell'equazione precedente la condizione che i numeri n possono assumere solo valori dispari, a causa della scelta delle autofunzioni di tipo Φ'_n , si ottiene quanto segue:

$$b_n = \frac{(-1)^{n-1} 8\sqrt{15}}{(2n-1)^3 \pi^3} \quad (1.8)$$

mentre per gli autovalori dell'energia abbiamo $E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{(2n-1)\pi}{L}\right)^2$ ($n \in N$). Quindi il valor medio $\langle E \rangle$ vale ¹:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_{n=1}^{+\infty} |b_n|^2 E_n = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{960}{(2n-1)^6 \pi^6} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(2n-1)^2 \pi^2}{L^2} = \\ &= \frac{480\hbar^2}{m\pi^4 L^2} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = \\ &= \frac{5\hbar^2}{mL^2}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Il valor medio dell'energia può essere ottenuto anche nel seguente modo :

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \langle \Psi | H \Psi \rangle = \\ &= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left(-\sqrt{\frac{30}{L^5}} \left(x^2 - \frac{L^2}{4}\right) \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \left(-\sqrt{\frac{30}{L^5}} \left(x^2 - \frac{L^2}{4}\right) \right) \right) dx = \\ &= -\frac{30\hbar^2}{mL^5} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left[x^2 - \frac{L^2}{4}\right] dx = \frac{5\hbar^2}{mL^2} \end{aligned} \quad (1.10)$$

Come si può notare i due risultati precedentemente ottenuti nei due modi differenti sono coerenti.

Le cose sono differenti nel momento in cui andiamo a calcolare lo scarto quadratico medio. Infatti :

$$\langle E^2 \rangle = \sum_{n=1}^{+\infty} |b_n|^2 (E_n)^2 = \frac{240\hbar^4}{m^2 \pi^2 L^4} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{(2n-1)^2} = \frac{30\hbar^4}{m^2 L^4} \quad (1.11)$$

e quindi

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \sqrt{5} \frac{\hbar^2}{mL^2} \quad (1.12)$$

ma possiamo anche scrivere che

¹Ricordando che $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = \frac{\pi^4}{96}$ (Per il calcolo completo vedere l'Appendice A.1).

$$\langle E^2 \rangle = \langle \Psi | H^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | H | H \Psi \rangle = 0. \quad (1.13)$$

l'ultimo termine si annulla perchè nel momento in cui agisce l'operatore H sulla funzione (1.6) si ottiene una costante che derivata ancora una volta (a causa della presenza dell'operatore H che agisce su $H\Psi$) mi da valore nullo.

Come è possibile che il seguente valore risulta essere diverso dal valore calcolato nel punto (1.11) ? Qual'è l'origine di tale paradosso?

1.2 Semplici indizi per la comprensione del paradosso

Il modo migliore per capire quali siano state le cause di queste semplici incongruenze è valutare l'azione degli operatori in gioco sulle rispettive funzioni.

La probabilità che il nostro sistema si trovi in un autostato Φ_n dell'Hamiltoniana di energia pari ad E_n è data dal $|\langle \Phi_n | \Psi \rangle|^2$; di conseguenza si ottiene

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \sum_{n=1}^{+\infty} E_n^2 |\langle \Phi'_n | \Psi \rangle|^2 = \sum_{n=1}^{+\infty} E_n^2 \langle \Phi'_n | \Psi \rangle \langle \Psi | \Phi'_n \rangle = \\ &= \sum_{n=1}^{+\infty} \langle H \Phi'_n | \Psi \rangle \langle \Psi | H \Phi'_n \rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

dove è stata usate la proprietà di realtà degli autovalori di H . Dal momento che H nel dominio (1.1) è autoaggiunto, dovremmo ottenere (con l'aiuto della relazione di chiusura

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\Phi'_n \rangle \langle \Phi'_n| = 1)$$

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} \langle \Phi'_n | H \Psi \rangle \langle H \Psi | \Phi'_n \rangle = \langle H \Psi | H \Psi \rangle = \\ &= \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^2 \left\langle \frac{d}{dx} \Psi(x) \middle| \frac{d}{dx} \Psi(x) \right\rangle = \frac{30\hbar^4}{m^2 L^4} \end{aligned} \quad (1.15)$$

che in accordo con il calcolo effettuato al punto (1.11). Ma se usiamo ancora una volta la proprietà di autoaggiuntezza dell'operatore H , noi potremo ottenere

$$\langle E^2 \rangle = \langle H \Psi | H \Psi \rangle = \langle \Psi | H^2 \Psi \rangle = 0 \quad (1.16)$$

che è un risultato necessariamente sbagliato. Infatti nel calcolo (1.15) noi abbiamo usato l'autoaggiuntezza di H quando esso agisce su un insieme di funzioni che vanno a zero agli estremi ($\Psi(\pm \frac{L}{2}) = 0$) e che quindi appartengono al suo dominio (vedi (1.1)). Invece nel calcolo eseguito al punto (1.16) la funzione $H\Psi$ non appartiene al dominio di H e quindi succede che

$$\langle H\Psi|H\Psi\rangle \neq \langle \Psi|H^2\Psi\rangle. \quad (1.17)$$

Per determinare il dominio di autoaggiuntezza di H^2 , eseguiamo più volte una integrazione per parti:

$$\begin{aligned} \langle \phi|H^2\psi\rangle &= \frac{\hbar^4}{4m^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \overline{\phi(x)}\psi''''(x) dx \\ &= \frac{\hbar^4}{4m^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \overline{\phi''''(x)}\psi(x) dx + \frac{\hbar^4}{4m^2} [\overline{\phi}\psi'''' - \overline{\phi}'\psi'' + \overline{\phi}''\psi' - \overline{\phi}'''\psi]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \end{aligned}$$

la condizione al contorno $\psi(\pm\frac{L}{2}) = \phi(\pm\frac{L}{2}) = 0$ data dal problema della buca infinita fa annullare il primo e l'ultimo contributo del termine di superficie. Ci sono differenti possibilità per annullare gli altri termini; scegliamo $\psi''(\pm\frac{L}{2}) = \phi''(\pm\frac{L}{2}) = 0$. Il dominio di H^2 è:

$$D(H^2) = \left\{ \phi \in L^2\left(-\frac{L}{2}, +\frac{L}{2}\right) \mid H^2\phi \in L^2\left(-\frac{L}{2}, +\frac{L}{2}\right); \phi\left(\pm\frac{L}{2}\right) = 0, \phi''\left(\pm\frac{L}{2}\right) = 0 \right\}.$$

Quindi l'operatore $\frac{\hbar^4}{4m^2} \frac{d^4}{dx^4}$ con il dominio sopra indicato è autoaggiunto.

La funzione del nostro esempio (1.6) non soddisfa la condizione $\Psi''(\pm\frac{L}{2}) = 0$ e quindi non appartiene al dominio di H^2 ; di conseguenza l'espressione $\langle \Psi|H^2\Psi\rangle$ non è definita.

Questi semplici calcoli mostrano che il problema sorge nel momento in cui si vuole definire l'azione dell'operatore H sulle funzioni di tipo $H\Psi(x)$ che non si annullano agli estremi. In maniera più generale possono sorgere seri problemi quando si vuole far agire un operatore su una funzione senza controllarne l'appartenenza al dominio.

1.3 Operatori di creazione e di distruzione per l'oscillatore armonico unidimensionale

Il secondo esempio che vogliamo illustrare è quello di una particella di massa m soggetta ad un potenziale unidimensionale di tipo armonico con frequenza angolare ω :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

Il relativo problema quantistico è quello di trovare le autofunzioni e gli autovalori di una Hamiltoniana del tipo:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2.$$

L'equazione di Schrödinger stazionaria:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (1.18)$$

conduce come soluzione i polinomi di Hermite. Per risolvere questo problema si può utilizzare anche il metodo algebrico che consiste nell'introduzione di due nuovi operatori detti operatori di distruzione a ed operatore di costruzione a^\dagger (l'uno l'aggiunto dell'altro):

$$a = \frac{\omega mx + ip}{\sqrt{2\omega m\hbar}} \quad a^\dagger = \frac{\omega mx - ip}{\sqrt{2\omega m\hbar}} \quad (1.19)$$

i quali agiscono sulle autofunzioni dell'Hamiltoniana come segue:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

Si può inoltre dimostrare (vedi Appendice A.2) che l'Hamiltoniana assume la forma $H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$ e che vale:

$$[a, a^\dagger] = \hat{1} \quad (1.20)$$

(dove con $\hat{1}$ si è indicato l'operatore identità).

1.3.1 Una semplice contraddizione

Per la soluzione del problema dell'oscillatore armonico con l'introduzione di a e a^\dagger otteniamo:

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n |0\rangle}{\sqrt{n!}} \quad a|0\rangle = 0$$

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

La rappresentazione matriciale degli operatori a e a^\dagger ² nella base delle autofunzioni dell'Hamiltoniana è:

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

²Vedi Appendice A.2 per il conto esplicito delle matrici.

Per un operatore lineare su uno spazio di Hilbert, data una base ortonormale $|n\rangle$, si può definire un'applicazione lineare da \mathcal{H} in \mathcal{C} detta *traccia* tale che:

$$Tr\mathcal{A} = \sum_n \langle n|\mathcal{A}|n\rangle \quad (1.23)$$

Questa applicazione gode della proprietà:

$$Tr(\mathcal{A}\mathcal{B}) = Tr(\mathcal{B}\mathcal{A}) \quad (1.24)$$

e poichè l'applicazione è lineare possiamo concludere che la traccia del commutatore tra due operatori è sempre nulla; quindi

$$Tr[a, a^\dagger] = 0. \quad (1.25)$$

Ma questo risultato è inaccettabile in quanto considerando la relazione (1.20) la traccia di entrambi i membri dovrebbe coincidere, mentre la traccia dell'operatore $\hat{1}$ è diversa da zero.

Come è possibile risolvere questa contraddizione?

1.4 Tracce su spazi finiti ed infiniti

La prima cosa da fare è specificare in maniera esatta l'applicazione *traccia* e dimostrarne le proprietà essenziali alla comprensione del paradosso.

Definizione 1 *Dato un operatore lineare su uno spazio di Hilbert ed una sua base ortonormale $|n\rangle$, si definisce traccia un funzionale lineare $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{C}$ che ha la seguente prescrizione:*

$$Tr\mathcal{A} = \sum_n \langle n|\mathcal{A}|n\rangle$$

Inoltre valgono le seguenti proprietà: (le dimostrazioni seguono da una successiva applicazione dell'operatore identità $\sum |n\rangle\langle n| = \hat{1}$).

1. $Tr\mathcal{A}^\dagger = \overline{Tr\mathcal{A}}$

Prova:

$$Tr\mathcal{A}^\dagger = \sum_n \langle n|\mathcal{A}^\dagger|n\rangle = \sum_n (\langle n|\mathcal{A}|n\rangle)^* = \overline{Tr\mathcal{A}}$$

(è stato sfruttato il fatto che $\langle n|\mathcal{A}|m\rangle = (\langle m|\mathcal{A}^\dagger|n\rangle)^*$)

2. L'applicazione così definita è indipendente dalla particolare scelta della base ortonormale usata per calcolarla.

Prova: Prendiamo due basi ortonormali in \mathcal{H} dette $|n\rangle$ e $|m\rangle$

$$\begin{aligned} \sum_n \langle n|\mathcal{A}|n\rangle &= \sum_n \sum_{m,m'} \langle n|m\rangle \langle m|\mathcal{A}|m'\rangle \langle m'|n\rangle = \\ &= \sum_{m,m'} \langle m|\mathcal{A}|m'\rangle \sum_n \langle m'|n\rangle \langle n|m\rangle = \\ &= \sum_{m,m'} \langle m|\mathcal{A}|m'\rangle \langle m'|m\rangle = \sum_m \langle m|\mathcal{A}|m\rangle. \end{aligned}$$

$$3. \text{Tr}(\mathcal{A}\mathcal{B}) = \text{Tr}(\mathcal{B}\mathcal{A})$$

Prova:

$$\begin{aligned} \sum_n \langle n | \mathcal{A}\mathcal{B} | n \rangle &= \sum_n \sum_m \langle n | \mathcal{A} | m \rangle \langle m | \mathcal{B} | n \rangle = \\ &= \sum_{n,m} \langle m | \mathcal{B} | n \rangle \langle n | \mathcal{A} | m \rangle = \sum_m \langle m | \mathcal{B}\mathcal{A} | m \rangle \end{aligned}$$

sfruttando la proprietà precedente, si perviene alla dimostrazione.

La traccia di un operatore è quindi una generalizzazione del concetto della somma degli elementi diagonale di una matrice. Inoltre l'applicazione traccia, e le relative sue proprietà, sono ben definite solo per operatori in un numero finito di dimensioni. Volendo estendere la definizione in uno spazio infinito dimensionale dovremo sostituire la sommatoria con una serie e tenere in considerazione i relativi problemi dovuti alla convergenza. Inoltre potrebbero non essere più valide le manipolazioni effettuate per dimostrare le sue proprietà. Così la traccia non è definita per tutti gli operatori ed in particolare per l'operatore identità $\hat{1}$.

Tornando al nostro esempio, possiamo vedere che nemmeno la traccia dell'operatore $[a, a^\dagger]$ è ben definita in quanto non risulta limitata. Moltiplicando semplicemente le matrici (1.21) ed (1.22) otteniamo

$$aa^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.26)$$

$$a^\dagger a = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

$$aa^\dagger - a^\dagger a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.28)$$

e quindi possiamo osservare che $\text{Tr}([a, a^\dagger])$ non è definita. Si dice quindi che tale operatore *non* è di *classe traccia*. Intendendo per operatore di classe traccia un operatore per cui vale :

$$\text{Tr}(\mathcal{A}) = \sum_n \langle n | \mathcal{A} | n \rangle < \infty .$$

Definizione 2 Un operatore \mathcal{A} in uno spazio di Hilbert è detto di Hilbert-Schmidt se e solo se $\text{Tr}\mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger < \infty$.

Gli operatori a e a^\dagger precedentemente esaminati non sono di Hilbert-Schmidt.

1.4.1 Passaggio da $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ a l_2

L'introduzione dei due operatori (1.19) permette di trasportare il problema dallo spazio delle funzioni d'onda $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ allo spazio l_2 delle successioni di numeri complessi tali che:

$$l_2 = \{\vec{c} = (c_0, c_1, \dots)\} : c_n \in \mathcal{C}, \quad \sum_{n=0}^{+\infty} |c_n|^2 < \infty$$

con il prodotto scalare:

$$\langle \vec{c}, \vec{c}' \rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \bar{c}_n c'_n \quad \forall \vec{c}, \vec{c}' \in l_2.$$

Gli operatori lineari in l_2 sono delle matrici quadrate di ordine infinito. Questo tipo di formulazione è nota come *meccanica matriciale*.

Esiste una corrispondenza biunivoca tra la meccanica ondulatoria ($\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$) e la meccanica matriciale (l_2). Per precisare meglio la relazione esistente tra questi due spazi di Hilbert, abbiamo bisogno di introdurre il concetto di isomorfismo tra spazi lineari.

Definizione 3 Dati due spazi di Hilbert \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 essi sono detti isomorfi se esiste una corrispondenza biunivoca $U : \mathcal{H}_1 \longrightarrow \mathcal{H}_2$ che soddisfa la relazione:

$$U(\alpha f + \beta g) = \alpha U(f) + \beta U(g)$$

ed inoltre:

$$\langle Uf, Ug \rangle = \langle f, g \rangle \quad \forall f, g \in \mathcal{H}_1$$

e quindi scriveremo $\mathcal{H}_1 \simeq \mathcal{H}_2$.

Teorema 1 Gli spazi di Hilbert \mathcal{L}^2 e l_2 sono separabili³ ed infinito dimensionali. Ogni spazio di Hilbert infinito dimensionale è isomorfo ad l_2 . Quindi:

$$\mathcal{H} \simeq \mathcal{L}^2 \simeq l_2.$$

La corrispondenza tra \mathcal{L}^2 e l_2 si ottiene considerando una base ortonormale $\{|n\rangle\}_{n \in \mathcal{N}}$ di \mathcal{H} ed associando ad ogni $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ l'insieme dei suoi coefficienti di Fourier rispetto a quella base:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \langle n|\psi\rangle \quad \forall n \in \mathcal{N} \longrightarrow c_n, \vec{\psi} = (c_0, c_1, \dots) \in l_2$$

³Uno spazio di Hilbert è separabile se contiene un insieme numerabile ovunque denso nello spazio. Inoltre ogni spazio separabile ammette una base ortonormale numerabile.

ed associando il prodotto scalare:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\longrightarrow \langle\psi|\psi'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \bar{\psi}(x)\psi'(x) \longrightarrow \\ &\longrightarrow \langle\psi, \psi'\rangle = \sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi'\rangle = \sum_n \overline{\langle n|\psi\rangle}\langle n|\psi'\rangle = \sum_n \bar{c}_n c'_n \end{aligned}$$

Di conseguenza per gli operatori lineari, siccome trattiamo con spazi di Hilbert separabili, abbiamo che:

$$\mathcal{A} \longrightarrow \langle n|\mathcal{A}|n'\rangle$$

che risulta essere una matrice.

Capitolo 2

Formalismo degli Operatori Lineari

In questo capitolo forniremo la corretta definizione di operatore e del suo aggiunto (l'operatore Hermitiano coniugato) come pure quella di *operatore autoaggiunto* che risulta intimamente connessa con la definizione di *osservabile* in Meccanica Quantistica. Inoltre vedremo come le proprietà dello spettro risultano intimamente connesse con le caratteristiche matematiche dell'operatore e delle sue autofunzioni.

2.1 Operatore Lineare

Cosideriamo uno spazio di Hilbert \mathcal{H} la cui dimensionalità è legata alla natura del sistema fisico in considerazione.

Definizione 4 Si definisce *Operatore Lineare in \mathcal{H}* una corrispondenza \mathcal{A} definita in un sottoinsieme $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ ¹ di uno spazio di Hilbert H ed a valori in un altro sottoinsieme $\Delta(\mathcal{A})$ di uno spazio di Hilbert H' .

$$\begin{aligned} \mathcal{A} : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset \mathcal{H} &\longrightarrow \mathcal{H} \\ \psi &\longrightarrow \mathcal{A}\psi \end{aligned} \quad (2.1)$$

che soddisfa la condizione:

$$\mathcal{A}(\alpha\psi + \beta\phi) = \alpha\mathcal{A}\psi + \beta\mathcal{A}\phi \quad \forall \psi \text{ e } \phi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \quad (2.2)$$

Il sottoinsieme $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ è chiamato *Dominio* dell'operatore, mentre il sottoinsieme $\Delta(\mathcal{A})$ è chiamato *codominio*. Quindi in maniera rigorosa possiamo affermare

¹Naturalmente questo sottoinsieme deve essere una varietà lineare, cioè un insieme di elementi che a loro volta costituiscono uno spazio lineare. $\psi, \phi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ e $\forall \alpha \in \mathbb{C} \Rightarrow \psi + \phi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ e $\alpha\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$

che un operatore in uno spazio di Hilbert è una coppia $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ che consiste in una prescrizione di una operazione su \mathcal{H} e di un particolare sottospazio di Hilbert su cui questa operazione è ben definita.

Definizione 5 *Dati $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ e $(\mathcal{B}, \mathcal{D}(\mathcal{B}))$, questi due operatori sono identici se oltre le rispettive prescrizioni coincidono anche i domini. Cioè :*

$$\mathcal{A}\psi = \mathcal{B}\psi \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{B}) \quad (2.3)$$

Dato un operatore \mathcal{B} se il suo dominio di definizione è tale da essere contenuto nel dominio $\mathcal{D}(\mathcal{A})$, cioè se $\mathcal{D}(\mathcal{B}) \subset \mathcal{D}(\mathcal{A})$, ed inoltre se accade che $\mathcal{A}\psi = \mathcal{B}\psi$ per ogni $\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{B})$, allora si dice che l'operatore \mathcal{A} è una *estensione* dell'operatore \mathcal{B} e quindi possiamo scrivere che $\mathcal{B} \subset \mathcal{A}$.

Definizione 6 *Un operatore $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ è detto chiuso se per ogni successione di funzioni $\{\psi_n\}$ contenute nel dominio $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ tali che $\psi_n \rightarrow \psi$ e $\mathcal{A}\psi_n \rightarrow \phi$ implica che $\mathcal{A}\psi = \phi$ con $\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$.*

Nello stesso modo in cui si definisce una funzione continua, possiamo definire la *continuità di un operatore* come segue:

Definizione 7 *Dato un operatore $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$, esso si dice continuo in un punto $\psi_0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ se:*

$$\lim_{\psi \rightarrow \psi_0} \mathcal{A}\psi = \mathcal{A}\psi_0 \quad (\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})) \quad (2.4)$$

Una condizione equivalente è che $\forall \epsilon > 0, \exists \delta = \delta(\epsilon) > 0$ tale che se ψ soddisfa la disuguaglianza:

$$\|\psi - \psi_0\| < \delta, \quad \psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}),$$

allora:

$$\|\mathcal{A}\psi - \mathcal{A}\psi_0\| < \epsilon.$$

Se l'elemento ψ_0 a cui tende la nostra funzione ψ non appartiene al dominio $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ del nostro operatore, ma esiste il $\lim_{\psi \rightarrow \psi_0} \mathcal{A}\psi$ con $\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ ed è uguale ad un certo elemento ϕ_0 , allora l'operatore \mathcal{A} può essere definito per ψ_0 imponendo la condizione che $\mathcal{A}\psi_0 = \phi_0$. Procedendo nello stesso modo per tutti gli elementi di tipo ψ_0 , si arriva alla *estensione per continuità* di un operatore \mathcal{A} .

Ora vogliamo definire il *prodotto tra operatori*. Questa definizione è molto importante in quanto essa è legata alla possibilità di costruire il *commutatore* tra due operatori.

Definizione 8 *Dati due operatori $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ e $(\mathcal{B}, \mathcal{D}(\mathcal{B}))$ tali che il codominio di \mathcal{A} (indicato con $\Delta(\mathcal{A})$) abbia intersezione non nulla con il dominio dell'operatore \mathcal{B} , cioè $\Delta(\mathcal{A}) \cap \mathcal{D}(\mathcal{B}) \neq 0$. In questo caso definiremo il prodotto $\mathcal{B}\mathcal{A}$ tra i due operatori nel seguente modo:*

$$\mathcal{B}\mathcal{A}\psi = \mathcal{B}(\mathcal{A}\psi)$$

su tutti gli elementi ψ nel suo dominio, che è definito come l'insieme delle funzioni $\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ per le quali $\mathcal{A}\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{B})$.

Il prodotto \mathcal{AB} è definito in modo analogo sempre che valga $\Delta(\mathcal{B}) \cap \mathcal{D}(\mathcal{A}) \neq \emptyset$.

Da questa definizione è chiaro che i due prodotti \mathcal{BA} e \mathcal{AB} non sono equivalenti perchè i loro domini potrebbero essere differenti; inoltre anche se un elemento ϕ appartenesse ad entrambi i domini potrebbe succedere che

$$\mathcal{BA}\phi \neq \mathcal{AB}\phi.$$

E' chiaro quindi che possono sorgere delle difficoltà nel momento in cui si vuole definire il *commutatore* tra due operatori $[\mathcal{A}, \mathcal{B}] = \mathcal{AB} - \mathcal{BA}$ in quanto i domini non sono in generale i medesimi. Per ovviare a questo problema si può fare l'ipotesi che i due operatori \mathcal{A} e \mathcal{B} siano definiti in un sottospazio denso di \mathcal{H} . Quindi il dominio del commutatore è definito come l'insieme delle funzione per cui

$$\mathcal{D}(\mathcal{AB}) \cap \mathcal{D}(\mathcal{BA}) \neq \emptyset$$

Nota 1 I problemi sulla definizione del commutatore nascono per gli operatori che non sono limitati, perchè come vedremo essi non possono essere definiti sull'intero spazio di Hilbert, a differenza di quelli limitati.

2.2 Operatori Limitati

Una classe di operatori molto interessante è quella degli *operatori limitati*. La limitatezza di un operatore gioca un ruolo importante nella definizione dell'aggiunto e sull'estensione del dominio a tutto lo spazio di Hilbert.

Definizione 9 Un operatore $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ è limitato se accade che :

$$\sup_{\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})} \frac{\|\mathcal{A}\psi\|}{\|\psi\|} < \infty \quad (2.5)$$

In questo caso si definisce la norma dell'operatore come :

$$\|\mathcal{A}\| = \sup_{\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})} \frac{\|\mathcal{A}\psi\|}{\|\psi\|} \quad (2.6)$$

2.2.1 Proprietà degli Operatori Limitati

Valgono molte proprietà importanti per gli operatori limitati, le quali le più importanti possono essere riassunte come segue:

1. Un operatore lineare limitato è continuo.

Prova:

$$\|\mathcal{A}\psi - \mathcal{A}\psi_0\| \leq \|\mathcal{A}\| \|\psi - \psi_0\| \leq \|\mathcal{A}\| \delta$$

che vale per $\|\psi - \psi_0\| < \delta$ e ponendo $\epsilon = \|\mathcal{A}\| \delta$

2. Se un operatore lineare è continuo in un punto è limitato.

Prova:

Se $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ è continuo in ψ_0 , allora $\forall \epsilon > 0 \exists \delta$ tale che: $\forall \psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$
 $\|\psi - \psi_0\| < \delta \Rightarrow \|\mathcal{A}\psi - \mathcal{A}\psi_0\| < \epsilon$. Se $\phi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ allora:

$$\mathcal{A}\phi = \frac{2\|\phi\|}{\delta} \left[\frac{\delta}{2\|\phi\|} \mathcal{A}\phi + \mathcal{A}\psi_0 - \mathcal{A}\psi_0 \right] = \frac{2\|\phi\|}{\delta} \left[\mathcal{A} \left(\psi_0 + \frac{\phi}{2\|\phi\|} \delta \right) - \mathcal{A}\psi_0 \right]$$

ora ponendo $\psi = \frac{\phi}{2\|\phi\|} \delta + \psi_0$ abbiamo che $\|\psi - \psi_0\| = \|\frac{\phi}{2\|\phi\|} \delta\| = \frac{\delta}{2}$ si ha che:

$$\mathcal{A}\phi = \frac{2\|\phi\|}{\delta} \left[\mathcal{A}\psi - \mathcal{A}\psi_0 \right] = \frac{2\|\phi\|}{\delta} \left[\mathcal{A}(\psi - \psi_0) \right]$$

per cui

$$\|\mathcal{A}\phi\| = \left\| \frac{2\|\phi\|}{\delta} \right\| \|\mathcal{A}(\psi - \psi_0)\| \leq \frac{2\|\phi\|}{\delta} \epsilon$$

poichè \mathcal{A} è continuo in ψ_0 e quindi $\|\mathcal{A}\psi - \mathcal{A}\psi_0\| < \epsilon$, otteniamo:

$$\frac{\mathcal{A}\phi}{\phi} < \frac{2\epsilon}{\delta}$$

3. La norma di un operatore limitato può essere definita equivalentemente come

$$\|\mathcal{A}\| = \sup_{\psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}), \|\psi\|=1} \|\mathcal{A}\psi\|.$$

Un'ultima proprietà, di cui ometteremo la prova, afferma che:

Ogni operatore lineare limitato \mathcal{A} può essere esteso per continuità alla chiusura di $\mathcal{D}(\mathcal{A})$; questo porta ad un operatore che ha la stessa norma dell'operatore originale.

Quindi il dominio di un operatore lineare limitato può sempre essere definito su un sottospazio chiuso di un spazio di Hilbert. Di conseguenza tutte le successioni di funzioni $\{\psi_n\}$ che convergono allo stesso elemento, generano $\{\mathcal{A}\psi_n\}$ convergenti allo stesso elemento che appartiene allo stesso spazio. Allora per gli operatori lineari e limitati è solo raramente rilevanti porsi il problema del dominio di definizione in quanto, essendo definiti (per estensione continua) su un sottospazio chiuso, tale dominio conterrà tutti i suoi punti di accumulazione. Naturalmente ciò non si verifica per un operatore non limitato, in quanto esso, per le proprietà (1) e (2), non è continuo in nessun punto e quindi non può essere esteso per continuità.

2.2.2 Teorema di rappresentazione

In questa sezione vogliamo enunciare il **Teorema di Riesz** che consente la rappresentazione di un qualunque funzionale lineare e limitato mediante un particolare prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Questo consente di dare una definizione più precisa all'*operatore aggiunto*.

Cominciamo con definire un funzionale lineare limitato:

Definizione 10 *Indicato con \mathcal{H} uno spazio di Hilbert, si definisce funzionale lineare un'applicazione $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{C}$ e la si indica con $\Phi(\psi)$ con $\psi \in \mathcal{D}(\Phi) \subset \mathcal{H}$, avendo indicato con $\mathcal{D}(\Phi)$ il dominio del funzionale $\Phi(\psi)$; inoltre deve godere della proprietà di linearità:*

$$\forall \psi, \phi \in \mathcal{D}(\Phi) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathcal{C} \quad \Phi(\alpha\psi + \beta\phi) = \alpha\Phi(\psi) + \beta\Phi(\phi)$$

Naturalmente occorre che $\mathcal{D}(\Phi)$ sia una varietà lineare, ossia che contenga tutte le possibili combinazioni lineari finite degli elementi dello spazio $\mathcal{D}(\Phi)$.

Un funzionale per cui vale la proprietà:

$$\sup_{\psi \in \mathcal{D}(\Phi)} \frac{|\Phi(\psi)|}{\|\psi\|} < \infty$$

è detto limitato. In questo caso si definisce la *norma* del funzionale come:

$$\|\Phi\| = \sup_{\psi \in \mathcal{D}(\Phi)} \frac{|\Phi(\psi)|}{\|\psi\|}$$

L'applicazione $\Phi(\psi)$ può essere definita anche considerando solo uno spazio lineare su un campo \mathcal{K} generico. Nel nostro caso, in cui gli elementi ψ sono configurazioni di un sistema fisico, è necessario che sia definito su \mathcal{H} , perchè uno spazio di Hilbert ha delle proprietà essenziali a cui non vogliamo rinunciare; esso infatti è uno spazio euclideo ² completo³.

Per i funzionali lineari limitati, si possono dimostrare le stesse proprietà che abbiamo visto per gli operatori limitati; e quindi possiamo dire che:

1. Un funzionale lineare limitato è continuo, cioè: $\forall \epsilon > 0, \exists \delta = \delta(\epsilon) > 0$ tale che $\|\psi - \psi_0\| < \delta$ comporta che $|\Phi(\psi) - \Phi(\psi_0)| < \epsilon$.
2. Un funzionale lineare continuo in un punto è limitato e quindi continuo ovunque.
3. Un funzionale lineare limitato, definito su una varietà lineare densa in \mathcal{H} , può essere esteso a tutto \mathcal{H} per continuità.

Teorema 2 (di Riesz) *Ogni funzionale lineare e limitato definito in \mathcal{H} può essere espresso nella forma:*

$$\Phi(\psi) = \langle g, \psi \rangle$$

dove g è un elemento di \mathcal{H} il quale è univocamente determinato dal funzionale Φ ; inoltre risulta che $\|\Phi\| = \|g\|$.

²Ricordiamo che si intende per euclideo uno spazio lineare X in cui è definita una corrispondenza $X \times X \rightarrow \mathcal{C}$ che è un prodotto scalare. In particolare in \mathcal{L}^2 il prodotto scalare è $\langle \psi, \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\phi(x)dx$

³Uno spazio è completo se ogni successione di Cauchy dello spazio ammette limite nello spazio.

Un ultimo teorema che vogliamo enunciare, legato al dominio di un operatore non limitato, è il seguente:

Teorema 3 (di Hellinger e Toeplitz) *Dato un operatore \mathcal{A} definito ovunque in \mathcal{H} e tale da soddisfare la condizione di hermiticità*

$$\langle \mathcal{A}\phi, \psi \rangle = \langle \phi, \mathcal{A}\psi \rangle \quad \forall \psi, \phi \in \mathcal{H} \quad (2.7)$$

allora l'operatore \mathcal{A} è limitato.

In Meccanica Quantistica spesso trattiamo con operatori, come per esempio quello di posizione, di momento o di energia, che esaudiscono la condizione di hermiticità sul loro dominio di definizione, ma essi risultano non limitati. Il precedente teorema indica che non è possibile definire questi operatori Hermitiani sull'intero spazio di Hilbert \mathcal{H} e che il loro dominio necessariamente rappresenta un sottospazio proprio di \mathcal{H} . Tra tutte le scelte possibili dal punto di vista matematico, si prendono in considerazione quelle inerenti il nostro problema fisico.

2.3 Operatore aggiunto per operatori limitati

Consideriamo un operatore limitato \mathcal{A} definito sullo spazio \mathcal{H} . L'espressione:

$$\Phi(\psi) = \langle f, \mathcal{A}\psi \rangle, \quad f \in \mathcal{H} \quad (2.8)$$

definisce un funzionale lineare e limitato su \mathcal{H} di norma pari a $\|\mathcal{A}\|$. Infatti abbiamo che:

$$|\Phi(\psi)| = |\langle f, \mathcal{A}\psi \rangle| \leq \|\mathcal{A}\psi\| \|f\| \leq \|\mathcal{A}\| \|f\| \|\psi\| \Rightarrow \|\Phi\| \leq \|\mathcal{A}\| \|f\|. \quad (2.9)$$

Quindi essendo $\Phi(\psi)$ limitato, per il Teorema di Riesz possiamo dire che esiste un unico elemento, che chiameremo f^* , tale che:

$$\langle f, \mathcal{A}\psi \rangle = \langle f^*, \psi \rangle. \quad (2.10)$$

L'elemento f^* è determinato da f e dall'operatore \mathcal{A} . Quindi esisterà una applicazione che chiameremo operatore *aggiunto* e che indicheremo con \mathcal{A}^\dagger che mi determinerà univocamente l'elemento f^* : $\mathcal{A}^\dagger f = f^*$. Il dominio di tale operatore è \mathcal{H} . Infine possiamo scrivere che:

$$\langle f, \mathcal{A}\psi \rangle = \langle f^*, \psi \rangle = \langle \mathcal{A}^\dagger f, \psi \rangle. \quad (2.11)$$

Si può inoltre verificare facilmente che la norma dell'operatore e del suo aggiunto sono uguali:

$$\begin{aligned}
\|\mathcal{A}^\dagger f\| &= \langle \mathcal{A}^\dagger f, \mathcal{A}^\dagger f \rangle = \langle \mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger f, f \rangle \leq \|\mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger f\| \|f\| \leq \|\mathcal{A}\| \|\mathcal{A}^\dagger f\| \|f\| \\
&\text{quindi } \frac{\|\mathcal{A}^\dagger f\|}{\|f\|} \leq \|\mathcal{A}\| \Rightarrow \|\mathcal{A}^\dagger\| \leq \|\mathcal{A}\| \\
\|\mathcal{A}f\| &= \langle \mathcal{A}f, \mathcal{A}f \rangle = \langle f, \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A}f \rangle \leq \|f\| \|\mathcal{A}^\dagger \mathcal{A}f\| \leq \|f\| \|\mathcal{A}^\dagger\| \|\mathcal{A}f\| \\
&\text{quindi } \frac{\|\mathcal{A}f\|}{\|f\|} \leq \|\mathcal{A}^\dagger\| \Rightarrow \|\mathcal{A}\| \leq \|\mathcal{A}^\dagger\|
\end{aligned}$$

confrontando le due diseguaglianze ottenute, possiamo concludere che:

$$\|\mathcal{A}^\dagger\| = \|\mathcal{A}\|.$$

Si può anche considerare l'operatore $\mathcal{A}^{\dagger\dagger}$ il quale non è altra che l'aggiunto dell'aggiunto. Quest'ultimo coincide con l'operatore $m\mathcal{A}$.

Dati due operatori \mathcal{A} e \mathcal{B} , risulta:

$$\langle f, \mathcal{A}\mathcal{B}\psi \rangle = \langle \mathcal{A}^\dagger f, \mathcal{B}\psi \rangle = \langle \mathcal{B}^\dagger \mathcal{A}^\dagger f, \psi \rangle \Rightarrow (\mathcal{A}\mathcal{B})^\dagger = \mathcal{B}^\dagger \mathcal{A}^\dagger.$$

2.4 Operatore aggiunto per operatori non limitati

Per gli operatori non limitati, l'operatore aggiunto si può definire allo stesso modo del caso precedentemente trattato. La differenza con il caso precedente è che la corrispondenza tra l'elemento f e l'elemento f^* non è unica. Questo, come vedremo, comporterà ad una restrizione per il dominio dell'operatore in modo tale che esso risulti densamente definito in \mathcal{H} .

Dato un operatore $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ introduciamo il funzionale $\Phi(\psi) = \langle f, \mathcal{A}\psi \rangle$ con $f \in \mathcal{H}$ e $\mathcal{D}(\Phi) = \mathcal{D}(\mathcal{A})$. Essendo l'operatore non limitato, non sarà più verificata la condizione (2.9) e quindi il funzionale non risulta limitato e non è più possibile applicare il Teorema di Riesz. Quindi per ogni elemento f si avrà un funzionale che potrebbe essere differente. Supponiamo che l'elemento f prescelto sia in grado da fornire un funzionale limitato. Essendo un funzionale lineare e limitato continuo, lo si può sempre estendere per continuità alla chiusura della varietà che corrisponde al dominio $\mathcal{D}(\Phi)$. In questo caso lo spazio di Hilbert \mathcal{H} sarà decomposto come:

$$\mathcal{H} = \overline{\mathcal{D}(\Phi)} \oplus \mathcal{M}$$

con $\mathcal{M} \neq 0$ che corrisponde al complemento ortogonale di $\overline{\mathcal{D}(\Phi)}$ rispetto ad \mathcal{H} . Di conseguenza in $\overline{\mathcal{D}(\Phi)}$ esisterà un unico f^* tale che:

$$\langle f, \mathcal{A}\psi \rangle = \langle f^*, \psi \rangle.$$

L'elemento f^* è unico in $\overline{\mathcal{D}(\Phi)}$ ma non lo è sull'intero spazio \mathcal{H} , in quanto otteniamo lo stesso valore per il funzionale (2.8) quando all'elemento f^* si aggiunge un elemento m^* che appartiene ad \mathcal{M} .

$$\langle f, \mathcal{A}\psi \rangle = \langle f^*, \psi \rangle = \langle f^* + m^*, \psi \rangle = \langle f^*, \psi \rangle \langle m^*, \psi \rangle = \langle f^*, \psi \rangle$$

Quindi possiamo concludere che in \mathcal{H} l'operatore non ha l'aggiunto. *Condizione necessaria affinché esista l'operatore aggiunto è che \mathcal{A} sia un operatore densamente definito*, in modo tale che $\mathcal{H} = \overline{\mathcal{D}(\Phi)}$. Il suo dominio è definito come segue: $f \in \mathcal{D}^\dagger(\mathcal{A})$ se e solo se esiste un elemento f^* tale che (2.10) è soddisfatta per $f \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$. Per questi elementi vale la relazione che $\mathcal{A}^\dagger f = f^*$. Inoltre possiamo dire che $\mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$.

2.4.1 L'operatore momento su un intervallo limitato

Facciamo il semplice esempio dell'operatore momento P definito sullo spazio di Hilbert $\mathcal{L}^2[0, 1]$. In questo caso il dominio di P è:

$$\mathcal{D}(P) = \{\psi \in \mathcal{H} : \psi' \in \mathcal{H}, \psi(0) = 0 = \psi(1)\}. \quad (2.12)$$

L'operatore aggiunto P^\dagger è determinato dalla relazione

$$\langle \phi, P\psi \rangle = \langle P^\dagger \phi, \psi \rangle \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(P)$$

la quale con una semplice integrazione per parti:

$$\int_0^1 dx \left(\bar{\phi} P\psi - \left(\frac{\hbar d\bar{\phi}}{i dx} \right) \psi \right) (x) = \frac{\hbar}{i} [\bar{\phi}(1)\psi(1) - \bar{\phi}(0)\psi(0)] = 0.$$

Possiamo notare che le semplici condizioni al contorno sulle funzioni ψ sono sufficienti ad annullare il termine finito dell'integrazione precedente senza ulteriori condizioni sulle funzioni ϕ . Pertanto possiamo concludere che l'operatore aggiunto P^\dagger agisce nello stesso modo di P ma ha un dominio più ampio:

$$P^\dagger = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, \quad \mathcal{D}(P^\dagger) = \{\phi \in \mathcal{H} : \phi' \in \mathcal{H}\}.$$

Vediamo ora come l'operatore impulso P definito su l'intervallo limitato $[0, 1]$ non è un operatore limitato. Prendiamo la successione di funzioni:

$$f_n = \sqrt{2} \sin n\pi x \quad (2.13)$$

appartenente al dominio $\mathcal{D}(P)$ dell'operatore (come si può facilmente verificare) tali che $\|f_n\| = 1$.

$$P(f_n) = in\pi\sqrt{2} \cos n\pi x \quad (2.14)$$

Ora calcoliamo la norma dell'operatore sulle funzioni $\{f_n\}$

$$\|P(f_n)\|^2 = \int_0^1 2n^2\pi^2 \cos^2(n\pi x) dx = 2n^2\pi^2 \int_0^1 \cos^2(n\pi x) dx = n^2\pi^2 \quad (2.15)$$

per cui

$$\|P(f_n)\| = n\pi \tag{2.16}$$

che per n molto grande va diverge. Sono riuscito a trovare delle funzioni appartenenti al dominio per cui la norma dell'operatore non è finita e quindi posso concludere che l'operatore non è limitato. Per il teorema di Hellinger e Toeplitz posso definire P solo su un sottospazio proprio dello spazio di Hilbert.

Capitolo 3

Osservabili e spettro

In Meccanica Quantistica, è esperienza comune imbattersi in operatori non limitati. In questo capitolo si vogliono introdurre le definizioni ed i teoremi necessari alla trattazione di questo tipo di operatori. Il teorema di Hellinger e Toeplitz dice che un operatore definito ovunque in \mathcal{H} e per il quale vale la condizione di hermiticità è necessariamente limitato. Questo ci suggerisce che in generale un operatore non limitato non può essere definito ovunque ma solo su un sottospazio. Quest'ultimo dovrà essere denso in modo da garantire l'esistenza del operatore aggiunto. Supporremo sempre quindi che gli operatori in questione abbiano un dominio $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ denso in \mathcal{H} , a meno di specificarlo esplicitamente.

3.1 Osservabili ed Operatori Autoaggiunti

Uno dei postulati principali della Meccanica Quantistica è quello di associare ad ogni osservabile un operatore autoaggiunto. Lo studio del suo spettro porta ad identificare i suoi valori come quelli effettivamente misurati per la grandezza fisica in gioco.

Molto spesso è facile imbattersi in errore in quanto i termini Hermitiano ed autoaggiunto sono usati come sinonimi. Esiste una sottile differenza tra i due quando si trattano operatori non limitati. E' solo per gli operatori *autoaggiunti* che vale il teorema spettrale ed è solo per essi che si può definire la forma esponenziata che ci da un gruppo unitario ad un parametro.

Definizione 11 *Un operatore $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ è detto Hermitiano (o simmetrico) se $\mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$, e*

$$\langle \phi, \mathcal{A}\psi \rangle = \langle \mathcal{A}\phi, \psi \rangle \quad \forall \phi, \psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \quad (3.1)$$

cioè $\mathcal{A}^\dagger\phi = \mathcal{A}\phi$ per ogni $\phi \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$. In altre parole \mathcal{A} è Hermitiano se il suo aggiunto agisce nello stesso modo su tutte le funzioni appartenenti a $\mathcal{D}(\mathcal{A})$, sebbene \mathcal{A}^\dagger è definito su un sottospazio più ampio di $\mathcal{D}(\mathcal{A})$.

Definizione 12 Un operatore $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ è detto *Autoaggiunto* se esso coincide con \mathcal{A}^\dagger , cioè

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger) \quad e \quad \mathcal{A}^\dagger \phi = \mathcal{A} \phi \quad \forall \phi, \psi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}). \quad (3.2)$$

Di conseguenza ogni operatore autoaggiunto è Hermitiano, ma non vale necessariamente il contrario. Un esempio è stato mostrato nel capitolo (2) in cui noi abbiamo trovato l'aggiunto dell'operatore P . Gli operatori P e P^\dagger agiscono nello stesso modo, ma il dominio di P^\dagger è più ampio del dominio di P . Quindi concludiamo che P con il dominio (2.12) è Hermitiano ma non autoaggiunto. Per gli operatori limitati, un operatore Hermitiano ed autoaggiunto hanno lo stesso significato perchè per essi, abbiamo visto, è irrilevante porsi il problema del dominio di definizione e quindi $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$.

3.2 Autofunzioni ed Autovalori

Uno dei problemi fondamentali della Meccanica Quantistica è quello della ricerca delle *autofunzioni* e degli *autovalori* di un operatore autoaggiunto in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} . In particolare la ricerca di tali grandezze per l'operatore Hamiltoniano è essenziale per la costruzione delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger in termini di sviluppi secondo le proprie autofunzioni, poichè questi elementi costituiscono un sistema completo in \mathcal{H} . Per ottenere la proprietà di completezza è inoltre necessario considerare oltre a questi elementi, un serie di *autofunzioni improprie* che appartengono ad uno spazio più ampio dell'originale spazio di Hilbert.

3.2.1 Autofunzioni proprie

Dato un operatore \mathcal{A} , si intende per autofunzione un elemento del dominio $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ che viene trasformato dall'operatore parallelamente a se stesso; quindi

$$\mathcal{A}\psi = a\psi \quad (3.3)$$

indicando con a un generico numero complesso. L'elemento a per cui vale l'equazione (3.3) viene chiamato *autovalore* dell'operatore \mathcal{A} .

Ora vogliamo dimostrare alcune semplici ma fondamentali proprietà che valgono per l'equazione (3.3) quando trattiamo con operatori Hermitiani.

Per $(\mathcal{A}, \mathcal{D}(\mathcal{A}))$ Hermitiano, (supponendo autofunzioni normalizzate all'unità) abbiamo:

1. Gli autovalori sono tutti reali.

Prova:

Detto ψ' una seconda autofunzione con autovalore a' , si ha:

$$0 = \langle \psi' | \mathcal{A} \psi \rangle - \langle \mathcal{A} \psi' | \psi \rangle = (a - \bar{a}') \langle \psi' | \psi \rangle$$

quindi per $\psi' = \psi$ segue

$$a = \bar{a}.$$

2. Autofunzioni relativi ad autovalori distinti sono tra loro ortogonali.

Prova:

considerando le relazioni scritte al punto (1), si ottiene per $a \neq \bar{a}$

$$\langle \psi' | \psi \rangle = 0 .$$

L'insieme delle autofunzioni corrispondente ad un dato autovalore costituisce un sottospazio \mathcal{H}_a detto *autospazio*. In base alla dimensione di tale autospazio si classificano gli autovalori semplici ($\dim \mathcal{H}_a = 1$) e gli autovalori degeneri ($\dim \mathcal{H}_a > 1$). Naturalmente tali sottospazi saranno tra loro ortogonali. Volendo trattare solo con spazi di Hilbert separabili, un insieme di sottospazi mutuamente ortogonali è al più numerabile e quindi l'insieme degli autovalori di \mathcal{A} sarà numerabile. Tale insieme è detto *spettro discreto*.

3.2.2 Autofunzioni improprie

Dato un operatore lineare chiuso \mathcal{A} definito su un dominio $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ denso in \mathcal{H} , denotiamo con λ un parametro che può assumere un qualsiasi valore complesso e consideriamo la seguente equazione:

$$\mathcal{A}\psi - \lambda\psi = \phi . \quad (3.4)$$

Lo studio di questa equazione ci porta ad investigare una varietà lineare $\Delta(\lambda)$ che consiste dell'insieme dei vettori $(\mathcal{A} - \lambda\hat{1})\psi$ in cui ψ appartiene al dominio $\mathcal{D}(\mathcal{A})$. Così $\Delta(\lambda)$ non è altro che l'immagine dell'operatore $(\mathcal{A} - \lambda\hat{1})$, ($\Delta(\lambda) = (\mathcal{A} - \lambda\hat{1})\mathcal{D}(\mathcal{A})$). L'operatore $(\mathcal{A} - \lambda\hat{1}) = \mathcal{A}_\lambda$ definisce una corrispondenza (non necessariamente uno a uno) tra $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ e $\Delta(\lambda)$. Se la corrispondenza è uno a uno l'operatore $\mathcal{A} - \lambda\hat{1}$ ammette inverso che indichiamo con $(\mathcal{A} - \lambda\hat{1})^{-1}$.

Definizione 13 *Se $(\mathcal{A} - \lambda\hat{1})^{-1}$ esiste ed è un operatore limitato definito ovunque in \mathcal{H} , allora la quantità λ è detta punto regolare dell'operatore \mathcal{A} . Quindi i punti di tipo regolare sono tali che esiste una costante M per cui*

$$\sup_{f \in \mathcal{D}(\mathcal{A}_\lambda)} \frac{\| \mathcal{A}_\lambda^{-1} f \|}{\| f \|} < M .$$

Nel paragrafo precedente abbiamo visto come gli operatori sono legati ai propri autovalori. In algebra lineare noi sappiamo che lo spettro consiste solo negli autovalori delle rispettive matrici. Ma più in generale, l'insieme degli autovalori non esaurisce completamente lo spettro. Richiamiamo qui un notevole teorema che ci permette di caratterizzare lo spettro discreto di un operatore.

Teorema 4 *La corrispondenza tra $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ e $\Delta(\lambda)$, determinata dall'operatore \mathcal{A}_λ , è uno a uno se e solo se λ non è un autovalore dell'operatore \mathcal{A} .*

Quindi lo spettro discreto è legato all'invertibilità o meno dell'operatore \mathcal{A}_λ . Se quest'ultimo non è invertibile, allora i λ appartengono allo spettro discreto.

L'invertibilità di un operatore è associata all'esistenza dell'autovalore nullo: se esiste non è invertibile e viceversa. Di conseguenza se l'operatore:

$$\mathcal{A}_\lambda = \mathcal{A} - \lambda \hat{1} \quad (3.5)$$

ammette autovalore nullo, allora i λ appartengono allo spettro discreto.

Nota 2 *Si può facilmente vedere come l'invertibilità di un operatore è connessa all'esistenza dell'autovalore nullo. Infatti presi due diversi elementi f_1 ed f_2 tali che $\mathcal{A}f_1 = \mathcal{A}f_2$ se l'operatore \mathcal{A} non è invertibile, allora $\mathcal{A}(f_1 - f_2) = 0$ e quindi ho trovato un elemento non nullo che ha autovalore zero. Inversamente presa una f_0 autofunzione di \mathcal{A} con autovalore nullo, allora gli elementi f e $f + f_0$ vengono trasportati da \mathcal{A} nello stesso elemento e quindi l'operatore non è invertibile.*

Definizione 14 *Fanno parte dello spettro continuo quei punti λ per cui l'operatore \mathcal{A}_λ è invertibile e l'operatore inverso non è limitato, cioè il codominio $\Delta(\lambda)$ è denso in \mathcal{H} ma non coincide con esso.*

Dalle definizioni che abbiamo dato possiamo concludere che lo spettro discreto e quello continuo non fanno parte dell'insieme dei punti di tipo regolare che viene chiamato *campo di regolarità*.

Nello studio degli osservabili in Meccanica Quantistica, appaiono delle complicazioni legate alla non limitatezza degli operatori e all'esistenza di una parte dello spettro che non è prevista nello studio dell'algebra lineare che corrisponde allo spettro continuo. I corrispettivi autovettori non appartengono ad \mathcal{H} ma ad uno spazio più ampio che ora andremo ad investigare.

3.2.3 Autofunzioni generalizzate

Quando abbiamo discusso l'operatore momento abbiamo visto che esso non è definito sull'intero spazio di Hilbert ma su un sottospazio proprio, poichè non è limitato. Possiamo scegliere fra questi sottospazi quello che ci fa più comodo per il nostro sistema fisico. Un dominio molto utile è lo *spazio di Schwartz* $S(\mathcal{R})$ delle funzioni rapidamente decrescenti. Una funzione $\psi : \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{C}$ appartiene a $S(\mathcal{R})$ se è differenziabile un numero infinito di volte e se la funzione, come tutte le sue derivate, decrescono più rapidamente all'infinito dell'inverso di un polinomio; cioè

$$\forall p, q \in \mathcal{R} \quad \exists C_{p,q} : |x^p \psi^q(x)| \leq C_{p,q} .$$

Lo spazio di Schwartz rappresenta un dominio invariante per l'operatore momento P , cioè $P : S(\mathcal{R}) \rightarrow S(\mathcal{R})$.

L'operatore momento definito su $S(\mathcal{R})$ ha autovettori associati allo spettro continuo che non appartengono allo spazio di Hilbert. Infatti l'equazione agli autovalori

$$P\psi_P(x) = p\psi_p \quad (p \in \mathcal{R}, \psi_p \in S(\mathcal{R}), \psi_p \neq 0) \quad (3.6)$$

ha come soluzione la funzione normalizzata $\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \frac{ipx}{\hbar}$ che però non appartiene a $S(\mathcal{R})$ e quindi P non ammette nessun autovalore. In realtà l'operatore P ammette una soluzione in senso debole che corrisponde ad una distribuzione h_p :

$$\begin{aligned} h_p : S(\mathcal{R}) &\longrightarrow \mathcal{C} \\ \phi &\longrightarrow h_p(\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_p(x)} \phi(x) dx = \mathcal{F}\phi(p) \end{aligned}$$

dove $\mathcal{F}(\phi)$ denota la trasformata di Fourier. La distribuzione h_p rappresenta una soluzione dell'equazione agli autovalori $Ph_p = ph_p$ poichè per le regole di calcolo delle distribuzioni abbiamo che

$$Ph_p(\phi) = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{dh_p}{dx}(\phi) \right) = h_p \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\phi}{dx} \right) = \left(\mathcal{F} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\phi}{dx} \right) \right)(p) = p(\mathcal{F}\phi)(p) = ph_p \quad (3.7)$$

da questo segue che lo spettro di P è puramente continuo.

3.3 Criterio di Autoaggiuntezza

Dato un operatore \mathcal{A} vogliamo far vedere che se esso è autoaggiunto non può ammettere come autovalori $\pm i$. Supponiamo che per \mathcal{A} autoaggiunto esista un elemento $\phi \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$ tale che $\mathcal{A}^\dagger \phi = i\phi$. Di conseguenza vale anche che $\mathcal{A}\phi = i\phi$ e quindi:

$$-i\langle \phi, \phi \rangle = \langle i\phi, \phi \rangle = \langle \mathcal{A}\phi, \phi \rangle = \langle \phi, \mathcal{A}\phi \rangle = i\langle \phi, \phi \rangle$$

che comporta $\phi = 0$. Quindi un operatore autoaggiunto non ha come autovalori $\pm i$ perchè questi dovrebbero avere autofunzione nulla la quale non è compresa nella definizione di spettro discreto. Una simile prova può essere fatta per $\mathcal{A}^\dagger \phi = -i\phi$ la quale conduce alla stessa conclusione. Quindi per un operatore per il quale $\mathcal{A}^\dagger \phi = \pm i\phi$ non ammette soluzione possiamo dire che risulta autoaggiunto. Chiamiamo *indici di difetto* le dimensioni dei seguenti sottospazi:

$$n_-(\mathcal{A}) \equiv \dim \text{Ker}(\mathcal{A}^\dagger + i\hat{1}) \quad (3.8)$$

$$n_+(\mathcal{A}) \equiv \dim \text{Ker}(\mathcal{A}^\dagger - i\hat{1}) \quad (3.9)$$

Teorema 5 (Criterio di Autoaggiuntezza) *Dato un operatore Hermitiano \mathcal{A} con indici di difetto n_- ed n_+ :*

1. \mathcal{A} è autoaggiunto se e solo se $n_- = n_+ = 0$.
2. \mathcal{A} ammette una estensione autoaggiunta (cioè è possibile rendere \mathcal{A} autoaggiunto ampliando il dominio di definizione) se e solo se $n_- = n_+$.

3. Se invece $n_- = 0 \neq n_+$ o $n_+ = 0 \neq n_-$, l'operatore \mathcal{A} non ammette estensioni autoaggiunte.

Possiamo applicare questo criterio all'operatore P esaminato in precedenza per vedere se ammette estensioni autoaggiunte e quali sono. Abbiamo già esaminato che tale operatore risulta essere Hermitiano. La prima cosa da fare è valutare quali sono gli indici di difetto. Risolviamo le seguenti equazioni:

$$\begin{aligned} P^\dagger \phi = -i\phi &\longrightarrow \hbar \frac{d}{dx} \phi = \phi \\ P^\dagger \phi = i\phi &\longrightarrow \hbar \frac{d}{dx} \phi = -\phi \end{aligned}$$

le soluzioni si ottengono semplicemente per separazione delle variabili; quindi:

$$\phi(x) = e^{\frac{x}{\hbar}} \quad (3.10)$$

$$\phi(x) = e^{-\frac{x}{\hbar}}; \quad (3.11)$$

gli indici di difetto valgono:

$$\begin{aligned} n_- &= 1 \\ n_+ &= 1. \end{aligned}$$

Per il criterio (5), possiamo quindi ottenere una estensione autoaggiunta sotto condizioni meno restrittive per il dominio di definizione. Non conoscendo ancora la condizione da imporre, torniamo indietro e ripetiamo l'integrazione per parti che ci ha consentito di dimostrare l'Hermiticità di P .

$$\begin{aligned} \langle \phi, P\psi \rangle &= \int_0^1 dx \bar{\phi} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi = \frac{\hbar}{i} [\bar{\phi}(1)\psi(1) - \bar{\phi}(0)\psi(0)] + \int_0^1 dx \frac{\hbar}{i} \frac{d\bar{\phi}}{dx} \psi = \\ &= \frac{\hbar}{i} [\bar{\phi}(1)\psi(1) - \bar{\phi}(0)\psi(0)] + \langle P\phi, \psi \rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Affinchè sia Hermitiano, occorre che si annulli il termine finito dell'integrazione per parti che prima era garantito dall'appartenenza al dominio $D(\mathcal{A})$ delle $\psi(x)$. Volendo condizioni meno restrittive sul dominio, supponiamo che esista (in questo nuovo dominio denominato con $\mathcal{D}(\hat{P})$) una funzione $\hat{\psi}$ tale che $\hat{\psi}(1) \neq 0$. Allora da

$$\overline{\phi(1)}\hat{\psi}(1) = \overline{\phi(0)}\hat{\psi}(0) \quad \phi \in \mathcal{D}(\hat{P})$$

possiamo ricavare:

$$\bar{\phi}(1) = \bar{\phi}(0) \frac{\hat{\psi}(0)}{\hat{\psi}(1)}.$$

In particolare questa condizione deve valere anche per $\phi = \hat{\psi}$. ne segue che:

$$\bar{\hat{\psi}}(1) = \frac{\hat{\psi}(0)\bar{\hat{\psi}}(0)}{\hat{\psi}(1)} \Rightarrow |\theta|^2 = 1$$

cioè θ è un numero complesso di modulo unitario. Quindi possiamo scrivere $\theta = e^{(i\alpha)}$ con $\alpha \in [0, 2\pi]$. Come estensione autoaggiunta possiamo porre:

$$\psi(1) = \psi(0)e^{(i\alpha)} \quad \alpha \in [0, 2\pi].$$

L'esplicita espressione dell'estensione autoaggiunta dell'operatore P è la seguente:

$$P_\alpha = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, \quad \mathcal{D}(P_\alpha) = \{\psi \in \mathcal{H} : \psi' \in \mathcal{H} \text{ e vale } \psi(0) = \psi(1)e^{(i\alpha)}\}. \quad (3.13)$$

3.4 Spettro residuo per l'operatore momento

Abbiamo visto nel capitolo (2) come ottenere una estensione autoaggiunta per l'operatore P su un intervallo limitato. Ora vogliamo discutere lo spettro di tale operatore nel dominio $\mathcal{D}(P) = \{\psi \in \mathcal{H} : \psi' \in \mathcal{H}, \psi(0) = 0 = \psi(1)\}$, in modo tale da mettere meglio in evidenza la differenza tra operatore Hermitiani ed Autoaggiunto. Per prima cosa cerchiamo di risolvere l'equazione agli autovalori

$$P\psi_n = \lambda\psi_n. \quad (3.14)$$

Poichè abbiamo visto che in $\mathcal{D}(P)$ l'operatore è Hermitiano, allora i suoi autovalori λ devono essere reali. L'equazione (3.14) è risolta da funzioni del tipo $\psi_\lambda = c_\lambda \exp \frac{i}{\hbar} \lambda x$ con $c_\lambda \in \mathcal{C} - \{0\}$. La condizione al contorno $\psi_\lambda(0) = 0$ implica che $\psi_\lambda = 0$ e P non ammette nessun autovalore. Quindi non possiamo identificare P come un'osservabile fisicamente accettabile, poichè l'equazione agli autovalori non ci da alcuna soluzione, volendo identificare con gli autovalori di una osservabile le quantità misurabili. Allora qual'è lo spettro dell'operatore P ?

In generale lo spettro di un operatore contiene una parte nota come *spettro residuo* che corrisponde a tutti i valori $\lambda \in \mathcal{C}$ che non sono autovalori dell'operatore, ma per i quali $\bar{\lambda}$ sono autovalori dell'aggiunto. Nell'esempio dell'operatore momento, il dominio P^\dagger non avendo la condizione di annullamento della funzione ψ agli estremi dell'intervallo, possiamo identificare con $\psi_\lambda = \exp \frac{i}{\hbar} \lambda x$ le soluzioni dell'equazione agli autovalori per l'operatore P^\dagger ,

$$P^\dagger \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda \quad (\psi_\lambda \in \mathcal{D}(P^\dagger), \psi_\lambda \neq 0) \quad (3.15)$$

e quindi tutti i valori del piano complesso sono autovalori dell'aggiunto di P . Lo spettro residuo di P è \mathcal{C} . Poichè l'operatore P nel dominio precedentemente menzionato non è autoaggiunto, il suo spettro non ammette una diretta interpretazione fisica.

Definizione 15 *Fanno parte dello spettro residuo i valori di λ per cui l'operatore \mathcal{A}_λ è invertibile ma il codominio $\Delta(\lambda)$ non è denso in \mathcal{H} .*

Consideriamo un punto $\hat{\lambda}$ in cui $\Delta(\lambda)$ non è denso in \mathcal{H} , allora:

$$\mathcal{H} = \overline{\Delta(\lambda)} \oplus M$$

dove M è il complemento ortogonale di $\overline{\Delta(\lambda)}$ rispetto ad \mathcal{H} . Prendendo un elemento $h \in M$ ed un elemento $f \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ possiamo scrivere:

$$(h, (\mathcal{A} - \hat{\lambda} \hat{1}f)) = 0$$

$$(h, \mathcal{A}f) = (h, \hat{\lambda}) = (\overline{\hat{\lambda}}h, f) \Rightarrow h \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^\dagger)$$

per cui $\mathcal{A}^\dagger h = \overline{\hat{\lambda}}$. M è l'autospazio relativo all'autovalore $\overline{\hat{\lambda}}$ di \mathcal{A}^\dagger . Se $\Delta(\lambda)$ non è denso in \mathcal{H} , il complemento ortogonale di $\overline{\Delta(\lambda)}$ rispetto ad \mathcal{H} è l'autospazio relativo all'autovalore $\overline{\hat{\lambda}}$ di \mathcal{A}^\dagger .

Per un operatore autoaggiunto per cui $\mathcal{A} = \mathcal{A}^\dagger$ si verifica che lo spettro residuo è vuoto. Infatti se $\Delta(\lambda)$ per un autovalore $\hat{\lambda}$ non è denso in \mathcal{H} , allora $\hat{\lambda}$ è autovalore di \mathcal{A} e il complemento ortogonale $\overline{\Delta(\lambda)}$ è l'autospazio relativo.

Appendice A

A.1 Calcolo della serie $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{(2n-1)^4}$

Nel problema della buca di potenziale infinita, abbiamo visto che per ottenere il risultato del valor medio dell'energia è necessario conoscere la somma della serie $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{(2n-1)^4}$. Vedremo che il risultato è facilmente ottenibile mediante la serie di Fourier della funzione $f(x) = x$ con $0 < x < 2$. Prima di effettuare il calcolo, richiamiamo le nozioni fondamentali riguardanti la serie di Fourier.

Sia $f(x)$ definita nell'intervallo $(-L, L)$ e determinata al di fuori di questo intervallo dalla relazione di periodicità $f(x+2L) = f(x)$, si suppone cioè che la $f(x)$ abbia periodo $2L$. La *serie di Fourier* associata ad $f(x)$ è per definizione:

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{L} + b_n \sin \frac{n\pi x}{L} \right) \quad (\text{A.1})$$

in cui i *coefficienti di Fourier* a_n e b_n sono

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx \quad (\text{A.2})$$

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx \quad (\text{A.3})$$

con $n = 0, 1, 2, \dots$; ed inoltre

$$\frac{a_0}{2} = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) dx \quad (\text{A.4})$$

che corrisponde al valor medio di $f(x)$ su un periodo.

Si deve inoltre sottolineare che la serie (A.1) associata ad $f(x)$ non è detto che converga e neppure, se nel caso fosse convergente, che converga ad $f(x)$. Esiste un criterio di convergenza della serie che porta il nome di *Criterio di Dirichlet* che permette di esaminare quali sono le condizioni affinché la serie converga ad $f(x)$.

Teorema 6 Si supponga che $f(x)$ sia definita e ad un sol valore, tranne eventualmente in un numero finito di punti, nell'intervallo $(-L, L)$; $f(x)$ sia periodica di periodo $2L$; $f(x)$ ed $f'(x)$ siano continue in $(-L, L)$. Allora la serie (A.1) con coefficienti (A.2) e (A.3) converge a:

1. $f(x)$ se x è un punto di continuità;
2. $\frac{f(x+0)+f(x-0)}{2}$ se x è un punto di discontinuità.

Le condizioni sopra enunciate sono sufficienti ma non necessarie, cioè se le condizioni di Dirichlet sono soddisfatte la convergenza è garantita, Tuttavia se esse non sono soddisfatte, la serie può convergere oppure no.

Vale inoltre una notevole uguaglianza nota come *uguaglianza di Parsval* che è la seguente:

$$\frac{1}{L} \int_{-L}^L \{f(x)\}^2 dx = \frac{a_0^2}{2} + \sum_{n=1}^{+\infty} (a_n^2 + b_n^2) \quad (\text{A.5})$$

dove a_n e b_n sono i coefficienti di Fourier associati ad $f(x)$ e se per $f(x)$ vale il criterio di Dirichlet.

Per applicare i risultati noti della serie di Fourier alla funzione $f(x) = x$ con $0 < x < 2$, dobbiamo fare in modo che la nostra funzioni risulti periodica. Quindi estendiamo $f(x)$ per periodicità in modo tale che risulti pari con un periodo pari a 4. In questo modo la serie di Fourier conterrà solo i termini in coseno. Calcoliamo a questo punto i coefficienti di Fourier:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{2}{2} \int_0^2 x \cos \frac{n\pi x}{L} dx = \left\{ \frac{2x}{\pi n} \sin \frac{n\pi x}{2} \right\}_0^2 + \\ &- \frac{2}{\pi n} \int_0^2 \sin \frac{n\pi x}{2} dx = -\frac{4}{n^2 \pi^2} \left\{ -\cos \frac{n\pi x}{2} \right\}_0^2 \\ &= -\frac{4}{n^2 \pi^2} [\cos n\pi - 1] \quad n \neq 0 \end{aligned}$$

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{1}{2} \int_{-2}^2 x \sin \frac{n\pi x}{L} dx = 0$$

perchè l'integrando è una funzione dispari e l'integrale è fatto su un intervallo pari.

$$\frac{a_0}{2} = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) dx = \frac{1}{2} \int_0^2 x dx = 1$$

Quindi:

$$f(x) = 1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{4}{n^2\pi^2} [\cos n\pi - 1] \cos \frac{n\pi x}{2}$$

che può anche essere scritta come

$$f(x) = 1 - \frac{8}{\pi^2} \left(\cos \frac{\pi x}{2} + \frac{1}{3^2} \cos \frac{3\pi x}{2} + \frac{1}{5^2} \cos \frac{5\pi x}{2} + \dots \right) \quad (\text{A.6})$$

Questa serie rappresenta $f(x)$ nell'intervallo $0 < x < 2$ ed inoltre si può vedere che converge a causa della presenza del termine $\frac{1}{n^2}$.

Applicando ora la (A.5) possiamo scrivere che:

$$\frac{1}{2} \int_{-2}^2 x^2 dx = \frac{(2)^2}{2} + \frac{16}{n^4\pi^4} (\cos n\pi - 1)^2 \quad (\text{A.7})$$

che conduce a:

$$\frac{8}{3} = 2 + \frac{64}{\pi^4} \left(\frac{1}{1^4} + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \frac{1}{7^4} + \dots \right) = + \frac{64}{\pi^4} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{(2n-1)^4}. \quad (\text{A.8})$$

L'espressione (A.8) ci conduce al risultato:

$$\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = \frac{\pi^4}{96} \quad (\text{A.9})$$

che è quello che volevamo ottenere.

A.2 Calcolo degli elementi di matrice degli operatori a e a^\dagger

Abbiamo visto nel capitolo 1 come sono stati definiti gli operatori di creazione e distruzione per il problema dell'oscillatore armonico unidimensionale (eqn.1.19). In questa sezione vogliamo dimostrare che vale la relazione di commutazione

$$[a, a^\dagger] = \hat{1}. \quad (\text{A.10})$$

e che l'Hamiltoniana può essere scritta come:

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right). \quad (\text{A.11})$$

Per dimostrare la relazione (A.10) ricordiamo che il commutatore tra gli operatori di posizione e momento vale $[x, p] = i\hbar$; quindi:

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2\omega m \hbar} [\omega m x + ip, \omega m x - ip] = \\ &= \frac{1}{2\omega m \hbar} \{ [\omega m x, \omega m x] + [\omega m x, -ip] + [ip, \omega m x] + [ip, -i] \} = \\ &= \frac{1}{2\hbar} \{ [x, -ip] + [ip, x] \} = \frac{1}{2\hbar} 2[ip, x] = 1. \end{aligned}$$

Prima di scrivere l'Hamiltoniana in funzione di a e a^\dagger (A.11), ricaviamo dalle (1.19) come si ottengono gli operatori p ed x . Invertendo le relazioni e con semplici passaggi algebrici otteniamo:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(a + a^\dagger) \quad p = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(a - a^\dagger)$$

Quindi:

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 = \left(-i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}\right)^2 \frac{(a - a^\dagger)^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}\right)^2 (a + a^\dagger)^2 = \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4}(a^2 + (a^\dagger)^2 - aa^\dagger - a^\dagger a) + \frac{\hbar\omega}{4}(a^2 + (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a) = \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a) = \frac{\hbar\omega}{2}(1 + a^\dagger a + a^\dagger a) = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right). \end{aligned}$$

Per il calcolo degli elementi di matrice occorre sfruttare le relazioni

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (\text{A.12})$$

che ora dimostreremo. Definendo con \hat{N} l'operatore numero di occupazione come $a^\dagger a$ che corrisponde all'operatore Hamiltoniana a meno di costanti ed indicando con $|n\rangle$ le autofunzioni di \hat{N}

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

possiamo dimostrare le (A.12).

Gli elementi definiti come $a^\dagger|n\rangle$ e $a|n\rangle$ sono autofunzioni di \hat{N} con autovalore rispettivamente $n + 1$ ed $n - 1$.

$$\begin{aligned}\hat{N}a^\dagger|n\rangle &= (a^\dagger\hat{N} + a^\dagger)|n\rangle = (a^\dagger n + a^\dagger)|n\rangle = (n + 1)a^\dagger|n\rangle \\ \hat{N}a|n\rangle &= (a\hat{N} - a)|n\rangle = (an - a)|n\rangle = (n - 1)a|n\rangle\end{aligned}$$

prendendo ket normalizzati ho:

$$\begin{aligned}\|a^\dagger|n\rangle\| &= (a^\dagger|n\rangle, a^\dagger|n\rangle) = (|n\rangle, aa^\dagger|n\rangle) = (|n\rangle, (a^\dagger a + 1)|n\rangle) = \\ &= (n + 1)\| |n\rangle\| = n + 1 \\ \|a|n\rangle\| &= (a|n\rangle, a|n\rangle) = (|n\rangle, a^\dagger a|n\rangle) = n\| |n\rangle\| = n\end{aligned}$$

di conseguenza siccome le uniche autofunzioni dell'operatore \hat{N} con autovalori $n + 1$ ed $n - 1$ sono rispettivamente $|n + 1\rangle$ ed $|n - 1\rangle$, $a^\dagger|n\rangle$ e $a|n\rangle$ devono essere proporzionali ad $|n + 1\rangle$ ed $|n - 1\rangle$. Poichè vogliamo ket normalizzati abbiamo:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle \quad (\text{A.13})$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle. \quad (\text{A.14})$$

Ora siamo in grado di calcolare le rappresentazioni matriciali degli operatori di creazione e distruzione:

$$\langle n|a|m\rangle = \sqrt{m}\langle n|m - 1\rangle = \sqrt{m}\delta_{n,m-1} \quad (\text{A.15})$$

$$\langle n|a^\dagger|m\rangle = \sqrt{m + 1}\langle n|m + 1\rangle = \sqrt{m + 1}\delta_{n,m+1} \quad (\text{A.16})$$

Bibliografia

- [1] F. Gieres, "Mathematical surprises and Dirac's formalism in Quantum Mechanics"
arXiv:quant-ph/9907069 v2 21Dec 2001.
- [2] G. Bonneau, J. Faraut, "Self-adjoint extensions of operators and teaching of quantum mechanics"
arXiv:quant-ph/0103153 v1 28 Mar 2001
- [3] G. Cosenza, "Lezioni di metodi matematici della Fisica, Vol.2" , Bollati Boringhieri.
- [4] Caldirola, "Introduzione alla fisica teorica", Utet.
- [5] J. J. Sakurai, "Meccanica quantistica moderna", Zanichelli.
- [6] G. Esposito, G. Marmo e G. Sudarshan, "From classical to quantum mechanics", Cambridge University Press, 2004.
- [7] N.I. Akhiezer, I.M. Glazman, "Theory of linear operators in Hilbert space", Frederick Ungar Publishing co.
- [8] M. Reed, B.Simon "Methods of Modern Mathematical Physics, Vol.1 - Functional Analysis" , Academic Press, New York 1980.