UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI

FEDERICO II



FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI

TESI DI LAUREA IN FISICA

Effetto Aharonov-Bohm e autoaggiuntezza

(Aharonov-Bohm effect and self-adjointness)

Relatore

Candidato

Prof. Fedele Lizzi

Valeria Della Rocca

matr. 567/517

ANNO ACCADEMICO 2009/2010

Indice

1	Effe	etto Aharonov-Bohm	6
	1.1	Interferenza	6
	1.2	La scelta della gauge	7
	1.3	La differenza di fase	9
	1.4	Un caso particolare	13
2	Dor	nini dell'operatore Hamiltoniano	14
	2.1	Particella libera	14
	2.2	Richiami matematici	15
		2.2.1 Operatori limitati	15
		2.2.2 Operatori non limitati	16
	2.3	Autoaggiuntezza di H	18
		2.3.1 Simmetria	19
		2.3.2 Indici di difetto	20
3	Aut	ofunzioni	22
	3.1	Caso generale	22
	3.2	Casi particolari	24

4

Conclusioni	26
A Giustificazione della scelta di A	27
Bibliografia	30

Introduzione

In meccanica quantistica può capitare di dover affrontare problemi che non hanno corrispettivo classico. Uno di questi fenomeni, in particolare l'effetto Aharonov-Bohm, ci offre un prezioso spunto per analizzare l'importanza dei domini degli operatori che ci troviamo ad utilizzare. Forniremo innanzitutto una descrizione di questo fenomeno, legato all'interferenza degli elettroni quando vi è un campo magnetico in una zona impenetrabile alle particelle: questo verrà usato come modello per descrivere il moto di una carica su di un cerchio quando nell'hamiltoniana compare un potenziale vettore, per poi confrontare questa situazione con il caso analogo in assenza di campo. Le autofunzioni che troveremo saranno diverse nei due casi, infatti differiranno di un fattore di fase, benché si tratti sempre di particelle su un anello. Siamo però in grado di ricavare tali autofunzioni a partire dalla soluzione più generale dell'equazione di Schroëdinger relativa alla particella su in intervallo limitato: dovendo imporre che l'hamiltoniana sia autoaggiunta, in modo da poter descrivere un osservabile, quello che vedremo è che i domini su cui vale tale condizione dipenderanno da due parametri, al variare dei quali otteniamo autofunzioni diverse che descrivono situazioni con condizioni al contorno diverse, come possono essere appunto quelle citate. Faremo un rapido excursus sulla teoria degli operatori, in cui introdurremo definizioni e teoremi che utilizzeremo per trovare tali domini, e, una volta fatto ciò, passeremo alla loro ricerca. Studieremo inoltre le autofunzioni imponendo la sola appartenenza ai domini di autoaggiuntezza, e vedremo per quali valori dei parametri esse possono essere ricondotte al caso libero e al caso di presenza di potenziale.

Capitolo 1

Effetto Aharonov-Bohm

L'effetto Aharonov-Bohm è un effetto puramente quantistico che si ha quando un campo magnetico \vec{B} confinato in una regione di spazio interdetta ad una particella carica influenza la funzione d'onda della particella stessa e ne modifica i livelli energetici.

1.1 Interferenza

Consideriamo un fascio di elettroni passanti attraverso una doppia fenditura e siano $\Psi_1 \in \Psi_2$ le funzioni d'onda relative a due elettroni che compiono cammini diversi. L'ampiezza di probabilità Ψ di trovare una di queste particelle in un certo punto può essere scritta come somma delle Ψ_i funzioni d'onda delle singole particelle:

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \tag{1.1}$$

Quando facciamo il modulo quadro per trovare la probabilità di trovare la particella in un punto dello schermo, comparirà un termine di interferenza che dipende dallo sfasamento relativo che presenteranno Ψ_1 e Ψ_2 , causato dalla differenza del percorso compiuto dagli elettroni. Utilizzando una lastra



Figura 1.1: Come si vede, la presenza del campo fa sì che le frange si trovino in posizioni diverse

fotografica si potranno osservare delle alternanze di zone chiare e scure che prendono il nome di frange di interferenza.

Immaginiamo ora di porre un solenoide indefinito percorso da corrente dietro lo schermo che separa le due fenditure, in una zona impenetrabile al fascio (figura (1.1)): il campo magnetico \vec{B} che si crea sarà $\neq \vec{0}$ solo all'interno del solenoide stesso. Classicamente la particella non risente della presenza del campo, in quanto la forza di Lorentz:

$$\vec{F_L} = e\vec{v} \times \vec{B} \tag{1.2}$$

è nulla nella regione in cui il campo \vec{B} è nullo. Sperimentalmente si osserva però uno spostamento delle frange rispetto alla situazione precedente: questo effetto, noto come effetto Aharonov-Bohm, è spegabile in termini del potenziale vettore \vec{A} .

1.2 La scelta della gauge

L'operatore Hamiltoniano di una particella in presenza di un campo magnetico può essere scritto come:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \tag{1.3}$$

In questa espressione, benché non compaia \vec{B} , è presente il potenziale \vec{A} , legato al campo dalla relazione

$$\nabla \times \vec{A} = \vec{B} \tag{1.4}$$

Il potenziale vettore però è fissato a meno di una trasformazione di gauge, ossia il campo \vec{B} definito dalla (1.4) può essere ottenuto anche a partire da:

$$\vec{A'} = \vec{A} + \nabla\Lambda \tag{1.5}$$

dove Λ è un campo scalare. In questo modo ci verrebbe da chiederci se sia possibile trovare una gauge in cui $\vec{A'} = \vec{0}$. Proviamo a considerarne l'integrale di linea su un certo percorso \vec{s} : esso sarà pari al flusso del campo magnetico attraverso una superficie che ha per bordo \vec{s} stesso. Se consideriamo un percorso concatenato con il solenoide il flusso sarà diverso da zero, essendo in quella zona *B* non nullo; non è quindi possibile porre $\vec{A'} = \vec{0}$. In effetti, se potessimo fare ciò, l'hamiltoniana si ridurebbe al caso di assenza di solenoide e non ci sarebbe differenza di posizione delle frange, quindi ci aspettavamo che $\vec{A'} = \vec{0}$ non fosse una gauge lecita.

Proviamo ora a fare alcune considerazione sulla gauge $\vec{A'} = \nabla \Lambda$: $\vec{A'}$ è irrotazionale, pertanto possiamo pensare di porlo uguale al gradiente di una funzione scalare. Se prendiamo \vec{B} diretto lungo l'asse z, il potenziale vettore ha solo componente lungo gli angoli azimutali:

$$A'_{\phi} = \frac{\Phi}{2\pi r} \tag{1.6}$$

dove r è la distanza dal solenoide. Passando alle coordinate cartesiane si ha:

$$A'_x = -\frac{y}{r}A'_\phi \qquad \qquad A'_y = \frac{x}{r}A'_\phi \qquad (1.7)$$

però per la (1.4):

$$\frac{\partial A'_i}{\partial j} - \frac{\partial A'_j}{\partial i} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial A'_i}{\partial j} = \frac{\partial A'_j}{\partial i} \tag{1.8}$$

Quindi $\vec{A'}$ è una forma chiusa. Il problema sorge nel momento in cui diciamo che l'elettrone non può penetrare nella zona del solenoide: non trovandoci in un insieme semplicemente connesso, la sola chiusura non basta ad assicurarci che la forma sia esatta, cioè non possiamo trovare una primitiva Λ di A' tale che $\nabla \Lambda = \vec{A'}$ in tutto lo spazio.

1.3 La differenza di fase

L'equazione di Schroëdinger corrispondente all'Hamiltoniana (1.3) è:

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \Psi = i\hbar \frac{d}{dt} \Psi$$
(1.9)

In questa nuova situazione, la Ψ'_1 soluzione dell'equazione (1.9) sarà:

$$\Psi_1' = \Psi_1 \exp\left(i\frac{e}{\hbar c}\int_l \vec{A} \cdot d\vec{x}\right) \tag{1.10}$$

dove l è un percorso qualsiasi al di sopra (o al di sotto) del solenoide e Ψ_1 è la funzione d'onda che avremmo in assenza di campo in tutto lo spazio. L'effetto di \vec{A} è quindi quello di modificare la Ψ_1 tramite l'aggiunta di un fattore di fase.

È bene notare che l'integrale che compare nella (1.10) non dipende dal particolare percorso compiuto, questo perché finché ci limitiamo a considerare la regione di spazio superiore (o, similmente, quella inferiore) al solenoide, questa può essere considerata semplicemente connessa, in quanto accessibile totalmente all'elettrone; inoltre in questa regione vale la (1.4) con $\vec{B} = 0$, quindi l'integrale in (1.10) non dipenderà dalla curva seguita ma solo dagli estremi di integrazione. Questo ci dice anche che se consideriamo due elettroni provenienti dalla stessa fenditura, questi presenteranno la stessa fase, e quindi per i nostri calcoli dobbiamo studiare particelle che attraversano fenditure diverse. Possiamo ora calcolarci la probabilità di trovare la particella sullo schermo utilizzando l'integrale sui cammini di Feynman. L'idea è che l'ampiezza di probabilità di trovare un elettrone in un certo punto è data dalla somma delle ampiezze di probabilità riferite a tutti i vari cammini possibili, ognuna delle quali è proporzionale a $e^{i\frac{S}{\hbar}}$, dove S è l'azione di una particolare dinamica, ossia l'integrale sul tempo della funzione di Lagrange L del sistema che stiamo considerando.

La lagrangiana in presenza di un campo magnetico è:

$$L = \frac{m}{2} \left(\frac{d\vec{x}}{dt}\right)^2 + \frac{e}{c} \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{A}$$
(1.11)

la quale si differenzia dalla Lagrangiana in assenza del campo per la presenza del fattore $\frac{e}{c} \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{A}$. L'azione riferita ad un tratto di percorso compiuto tra gli istanti t_{n-1} e t_n sarà quindi:

$$S = \int_{t_{n-1}}^{t_n} Ldt$$

= $\frac{m}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{d\vec{x}}{dt}\right)^2 dt + \frac{e}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{A} dt$ (1.12)
= $S^{(0)}(n, n-1) + \frac{e}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{A} dt$

L'integrale al secondo membro può essere trasformato in un integrale di linea:

$$S = S^{(0)}(n, n-1) + \frac{e}{c} \int_{x_{n-1}}^{x_n} \vec{A} \cdot d\vec{s}$$
 (1.13)

dove $x_{n-1} e x_n$ sono le posizioni occupate dalla particella ripettivamente a $t_{n-1} e t_n$. Considerando quindi il cammino totale dalla fenditura 1 alla lastra, si ha che il contributo all'ampiezza di transizione dato da un singolo percorso è:

$$A_1 = \prod \left\{ \exp \left[i \frac{S^{(0)}(n, n-1)}{\hbar} \right] \right\} \exp \left(\frac{ie}{c\hbar} \int_{x_1}^{x_n} \vec{A} \cdot d\vec{s} \right)$$
(1.14)

In questo modo, per ottenere l'ampiezza totale basta integrare su tutti i cammini possibili:

$$A_{tot} = \int_{sopra} D[x(t)] \exp\left[i\frac{S^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right] \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int_{x_1}^{x_n} \vec{A} \cdot d\vec{s}\right) + \int_{sotto} D[x(t)] \exp\left[i\frac{S^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right] \exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int_{x_1}^{x_n} \vec{A} \cdot d\vec{s}\right) = \left[\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int_{x_1}^{x_n} \vec{A} \cdot d\vec{s}\right)\right]_{sopra}\int_{sopra} D[x(t)] \exp\left[i\frac{S^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right] + \left[\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int_{x_1}^{x_n} \vec{A} \cdot d\vec{s}\right)\right]_{sotto}\int_{sotto} D[x(t)] \exp\left[i\frac{S^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right]$$
(1.15)

dove D[x(t)] è la misura di integrazione e dove $S^{(0)}(N, 1)$ indica l'azione che si avrebbe in assenza di campo considerando tutto il percoso. È stato possibile portare fuori dal segno di integrale $\exp\left(\frac{ie}{c\hbar}\int_{x_1}^{x_n} \vec{A} \cdot d\vec{s}\right)$ a causa delle precedenti considerazioni sull'indipendenza di tale funzione dal cammino scelto.

Quello che ci interessa ora è calcolare lo sfasamento tra due cammini. Fino ad ora, abbiamo visto che se l'elettrone passa attraverso la fenditura 1 esso presenterà una fase data da quella che avrebbe in assenza di solenoide più un ulteriore termine (equazione (1.10)):

$$\exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{sopra} \vec{A} \cdot d\vec{s}\right] \tag{1.16}$$

dovuto alla presenza di \vec{A} . Allo stesso modo, per un elettrone passante per la fenditura 2:

$$\exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{sotto} \vec{A} \cdot d\vec{s}\right] \tag{1.17}$$

La differenza di fase da aggiungere a quella che si ha nel caso di $\vec{A} = \vec{0}$ sarà la quantità:

$$\frac{e}{\hbar c} \int_{sopra} \vec{A} \cdot d\vec{s} - \frac{e}{\hbar c} \int_{sotto} \vec{A} \cdot d\vec{s} =$$
(1.18a)

$$= \left(\frac{e}{\hbar c}\right) \oint \vec{A} \cdot d\vec{s} \tag{1.18b}$$

$$= \left(\frac{e}{\hbar c}\right) \int \vec{B} \cdot d\vec{S} \tag{1.18c}$$

dove \vec{S} rappresenta una superficie che ha per bordo \vec{s} . È interessante notare come nell'equazione (1.18c) compaia il flusso del campo \vec{B} :

$$\int \vec{B} \cdot d\vec{S} = \Phi_B \tag{1.19}$$

benché finora ci fossimo limitati a considerare il potenziale vettore. In effetti, B da solo non è sufficiente per questa trattazione, poichè nullo quasi ovunque, mentre A dipende dalla gauge, quindi non se ne può dare una definizione univoca: entrambe queste quantità sono rilevanti per i nostri fini.

È presente quindi uno sfasamento che dipende dal flusso di \vec{B} , il quale si aggiunge allo sfasamento già presente. Lo spostamento delle frange è quindi spiegato, dato che la posizione x dei massimi sulla lastra è legata alla differenza di fase $\Delta \phi$ dalla relazione:

$$x = \frac{L\lambda\Delta\phi}{4\pi d} \tag{1.20}$$

dove d indica la separazione tra le fenditure e L la distanza tra queste e la lastra. Essendo tale $\Delta \phi$ diverso nei due casi considerati, si hanno massimi in posizioni diverse. È anzi possibile calcolare la differenza tra queste posizioni nelle due situazioni:

$$\Delta x = \frac{\lambda L \left(\Delta \phi_{A=0} + \frac{e}{\hbar c} \Phi_B \right)}{4\pi d} - \frac{\lambda L \Delta \phi_{A=0}}{4\pi d} = \frac{\lambda L e \Phi_B}{4\pi d c \hbar}$$
(1.21)

Siamo ora in grado di calcolare la probabilità di trovare la particella in un punto x della lastra. Ci basterà infatti fare il modulo quadro della (1.15):

$$P_x = \left| A_{tot} \right|^2 \tag{1.22}$$

Come ci aspettaimo, P_x ha una dipendenza di tipo cosinusoidale dallo sfasamento, pertanto ci saranno zone in cui la probabilità di rivelare un elettrone sarà maggiore rispetto ad altre. Modificando il valore di Φ_B , il che corrisponde a variare l'intensità del campo \vec{B} , possiamo rendere nullo il coseno e annullare l'effetto.

1.4 Un caso particolare

Immaginiamo ora una situazione in cui una particella si muove su un cerchio con al centro un solenoide infinito. Da quanto visto in questo capitolo si deduce che, se dividiamo la circonferenza in due semi-circonferenze, le funzioni d'onda relative alle due metà presenteranno delle fasi diverse (in accordo alla (1.16) e alla (1.17)) a causa della presenza del campo. Questo si traduce in una non periodicità della Ψ che descrive la particella:

$$\Psi(2\pi) = \Psi(0) \exp\left(i\frac{e}{\hbar c}\Phi_B\right)$$
(1.23)

Si può quindi realizzare una situazione in cui il moto di una particella su un cerchio è rappresentato da una funzione non periodica. È possibile spiegare questo fenomeno studiando i domini in cui l'hamiltoniana è autoaggiunta.

Capitolo 2

Domini dell'operatore Hamiltoniano

In questo capitolo ci concentreremo sullo studio dei domini di autoaggiuntezza dell'hamiltoniana e vedremo come sia possibile determinarli a partire dallo studio della simmetria dell'operatore stesso.

2.1 Particella libera

Un caso apparentemente semplice da trattare è quello della particella libera su un cerchio, che per comodità prenderemo di raggio unitario. L'Hamiltoniana che ne descrive il moto è:

$$H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\varphi^2} \qquad con \qquad \varphi \in [0, 2\pi]$$
(2.1)

Questo è un problema unidimensionale nella sola variabile φ . Essendo la particella su un cerchio ci aspettiamo che le autofunzioni di H soluzioni dell'equazione $H\psi = E\psi$ siano periodiche, ossia $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$, e possano essere scritte nella base:

$$\psi_n = N e^{\pm i n \varphi} \tag{2.2}$$

con n numero intero ed N costante di normalizzazione che può essere ottenuta imponendo che:

$$\int_0^{2\pi} |\psi|^2 d\varphi = 1 \tag{2.3}$$

dalla quale si ricava $N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. Notiamo che c'è una degenerazione delle autofunzioni, in quanto $n \in -n$ ci danno la stessa ψ I corrispondenti autovalori saranno:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} n^2 \tag{2.4}$$

Le autofunzioni periodiche ben si prestano a descrivere il moto della carica nel caso libero, abbiamo visto però nel capitolo precedente che sono ammesse anche ψ che non godono di questa proprietà. In effetti, lo spazio di Hilbert \mathcal{H} al quale appartengono le funzioni che utilizziamo è $L^2([0, 2\pi]) \subset C^2([0, 2\pi])$ e una funzione per appartenere a questo spazio deve essere a quadrato sommabile, ma può non essere in generale continua. In questo caso, la periodicità è una condizione troppo forte da richiedere. Cerchiamo quindi le autofunzioni di H studiandone lo spettro senza imporre la periodicità.

2.2 Richiami matematici

Prima di procedere con le adeguate considerazione sugli operatori coinvolti, richiamiamo alcuni concetti che verranno poi utilizzati nel seguito.

2.2.1 Operatori limitati

Iniziamo con il considerare un operatore limitato A definito in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , ossia un operatore per il quale valga la relazione:

$$\|A\xi\| \le M \,\|\xi\| \qquad \forall \xi \in \mathcal{H} \tag{2.5}$$

dove M è un intero positivo; consideriamo inoltre il funzionale lineare:

$$\phi_{\eta}(\xi) = \langle \eta \mid A\xi \rangle \tag{2.6}$$

Si dimostra facilmente che esso è limitato, infatti:

$$|\phi_{\eta}(\xi)| = |\langle \eta \mid A\xi \rangle| \le ||\eta|| \, ||A\xi|| \le M \, ||\eta|| \, ||\xi||$$
(2.7)

Ora, dati i vettori $\xi \in \mathcal{H}$ per i quali esiste $\eta \in \mathcal{H}$ tale che:

$$\langle \eta \mid A\xi \rangle = \langle \phi \mid \xi \rangle \qquad \forall \phi \in \mathcal{H}$$
 (2.8)

possiamo definire l'aggiunto di A come quell'operatore A^{\dagger} tale che $A^{\dagger}\eta = \phi$. L'esistenza di questo operatore è assicurata da un teorema, detto teorema di rappresentazione di Riesz, per il quale:

Teorema 1 Ogni funzionale lineare limitato è esprimibile nella forma:

$$\phi(\xi) = \langle \phi^* \mid \xi \rangle \tag{2.9}$$

e tale ϕ^* è univocamente determinato.

Questo teorema ci assicura che esiste un unico A^{\dagger} tale che $\phi_{\eta}^* = A^{\dagger}\eta$. In questo caso, si dice che A è autoaggiunto se $A = A^{\dagger}$.

2.2.2 Operatori non limitati

Consideriamo ora un caso di maggior interesse, cioè gli operatori non limitati. Il teorema di rappresentazione, come abbiamo detto, vale per i funzionali lineari limitati. Non valendo più la (2.5), dobbiamo introdurre il concetto di operatore simmetrico e fare qualche considerazione sui domini di definizione degli operatori coinvolti. Sia A un operatore non limitato definito in un dominio D(A), dato il funzionale lineare:

$$\phi_{\eta}(\xi) = \langle \eta \mid A\xi \rangle \qquad \forall \xi \in D(A) \tag{2.10}$$

chiamiamo D(A) il sotto
spazio di $\mathcal H$ tale che esiste un vettore
 ϕ_{η}^{*} per il quale vale:

$$\phi_{\eta}(\xi) = \langle \eta \mid A\xi \rangle = \langle \phi_{\eta}^* \mid \xi \rangle \qquad \forall \eta \in D(A)$$
(2.11)

allora possiamo definire A^{\dagger} come quell'operatore che soddisfa l'uguaglianza $A^{\dagger}\eta = \phi_{\eta}^{*}$.

Definizione 1 A è chiamato simmetrico se:

$$\langle \eta \mid A\xi \rangle = \langle A\eta \mid \xi \rangle \qquad \forall \xi, \eta \in D(A)$$
 (2.12)

e se il suo dominio D(A) è denso.

L'aggiunto di un operatore simmetrico A è una sua estensione e ha la proprietà che $D(A) \subseteq D(A^{\dagger})$, infatti abbiamo visto che A^{\dagger} agisce sugli $\eta \in D(A)$, ma nulla toglie che possa agire su altri vettori $\notin D(A)$ e che quindi il suo dominio sia più ampio di questo. Inoltre, sempre nel caso di A simmetrico, $A \in A^{\dagger}$ agiscono allo stesso modo sugli elementi di D(A), perché la relazione (2.12) implica che $A\eta = A^{\dagger}\eta$, ma questo non vuol dire che sia autoaggiunto: per esserlo, dobbiamo avere che $A \in A^{\dagger}$ coincidano, il che include anche che $D(A) = D(A^{\dagger})$. L'operatore A è detto essenzialmente autoaggiuto se ammette un'unica estensione autoaggiunta, ossia se è possibile ampliare il suo dominio al fine di renderlo autoaggiunto. Per determinare se esiste questa estensione, è utile introdurre gli indici di difetto, definiti come:

$$n_{+}(A) = dimKer(A^{\dagger} - i1)$$

$$n_{-}(A) = dimKer(A^{\dagger} + i\hat{1})$$
(2.13)

Vale infatti un teorema dovuto a von Neumann che afferma che:

Teorema 2 Sia A è un operatore simmetrico, allora:

1. A è autoaggiunto o ammette una sola estensione autoaggiunta se e solo se $n_{-} = n_{+} = 0;$

2. A ha infinite estensioni autoaggiunte (parametrizzate da una matrice unitaria $n \times n$) se e solo se $n_{-} = n_{+}$;

3. A non ammette estensioni autoaggiunte se $n_-n_+ = 0$ con $n_- \neq n_+$.

Possiamo quindi verificare tramite lo studio della simmetria di un operatore e degli indici di difetto se esso ammette estensioni autoaggiunte.

2.3 Autoaggiuntezza di H

Adesso possiamo utilizzare quanto detto nel paragrafo precedente per trovare i domini di autoaggiuntezza (o di essenziale autoaggiuntezza) di H.

In meccanica quantistica, agli osservabili sono associati degli operatori e i possibili risultati di una misura sono dati dall'autovalore che l'operatore ammette in quello stato. Poiché tali risultati devo essere reali, richiediamo che gli operatori siano autoaggiunti: è infatti possibile dimostrare che:

Teorema 3 Tutti gli autovalori di un operatore autoaggiunto sono reali.

Abbiamo visto nelle precedenti sezioni che a seconda che l'operatore sia limitato o non limitato, le condizioni da imporre per l'autoaggiuntezza sono diverse; infatti, nel caso di non limitatezza, un operatore simmetrico non è necessariamente autoaggiunto, poiché nulla ci assicura che i domini di A e A^{\dagger} coincidano.

La prima cosa da fare è vedere se $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \varphi^2}$ è limitato: esso è associato ad un osservabile, quindi deve essere simile ad una matrice diagonale che ha sulla diagonale principale gli autovalori, ossia deve essere diagonalizzabile. La (2.4) ci dice che gli autovalori di H con condizioni al contorno periodiche dipendono da un numero intero n, pertanto crescono all'infinito. Quindi Hnon è limitato perché è simile ad una matrice infinito dimensionale. Possiamo ora sfruttare il teorema (2) mostrando innanzitutto su quali domini H è simmetrico per poi cercare gli indici di difetto.

2.3.1 Simmetria

Iniziamo ora lo studio della simmetria di H: dobbiamo imporre che valga la (2.12):

$$\langle \psi_1 \mid H\psi_2 \rangle = \langle H\psi_1 \mid \psi_2 \rangle \tag{2.14}$$

con $\psi_1(\varphi)$, $\psi_2(\varphi) \in L^2([0, 2\pi]) \subseteq C^2([0, 2\pi])$. Applichiamo H a ψ_2 ed eseguiamo il prodotto scalare:

$$\langle \psi_1 \mid H\psi_2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{2\pi} \psi_1^* \psi_2'' d\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Big[\left(\psi_1^* \psi_2' \right)_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} - \int_0^{2\pi} \psi_1^* \psi_2' d\varphi \Big]$$
(2.15)

Similmente, per ψ_1 otteniamo:

$$\langle H\psi_1 \mid \psi_2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{2\pi} \psi_1''^* \psi_2 d\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Big[\left(\psi_1'^* \psi_2 \right)_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} - \int_0^{2\pi} \psi_1^* \psi_2' d\varphi \Big]$$
(2.16)

Quindi la (2.14) equivale a:

$$\langle \psi_1 \mid H\psi_2 \rangle - \langle H\psi_1 \mid \psi_2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\psi_1^* \psi_2' - \psi_1'^* \psi_2 \right]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}$$
(2.17)

con il termine a secondo membro nullo. Definiamo il vettore colonna:

$$\Psi_i = \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi'_i \end{pmatrix} \tag{2.18}$$

con i = 1,2. Il secondo membro di (2.17) può essere quindi scritto come:

$$\left[\psi_{1}^{\prime*}\psi_{2}-\psi_{1}^{\prime*}\psi_{2}\right]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}=\left[\Psi_{1}^{\dagger}(2\pi)\left(\begin{smallmatrix}0&1\\-1&0\end{smallmatrix}\right)\Psi_{2}(2\pi)-\Psi_{1}^{\dagger}(0)\left(\begin{smallmatrix}0&1\\-1&0\end{smallmatrix}\right)\Psi_{2}(0)\right] \quad (2.19)$$

Vogliamo quindi trovare una matrice A tale che $\Psi_i(2\pi) = A\Psi_i(0)$ e che:

$$A^{\dagger} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$
(2.20)

Infatti, se sostituiamo nella (2.19) otteniamo:

$$\left[\psi_{1}^{\prime*}\psi_{2}-\psi_{1}^{\prime*}\psi_{2}\right]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}=\Psi_{1}^{\dagger}(0)A^{\dagger}\left(\begin{smallmatrix}0&1\\-1&0\end{smallmatrix}\right)A\Psi_{2}(0)-\Psi_{1}^{\dagger}(0)\left(\begin{smallmatrix}0&1\\-1&0\end{smallmatrix}\right)\Psi_{2}(0) \quad (2.21)$$

che è 0 per la (2.20). Queste condizioni sono soddisfatte dalle matrici unitarie che possono essere scritte nella forma $A = e^{i(\alpha + \sigma_2\beta)}$, dove σ_2 è una delle matrici di Pauli: $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ e dove α e β sono degli angoli che variano in $[0, 2\pi]$ (la dimostrazione della correttezza di questa scelta è data in Appendice A).

Quindi il dominio più generale in cui valgono le (2.19) e (2.20) è:

$$D(H) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \quad \text{che} \quad \text{soddisfano:} \begin{pmatrix} \psi(2\pi) \\ \psi'(2\pi) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} \text{con} \quad A^{-1} = A^{\dagger} \right\}$$
(2.22)

2.3.2 Indici di difetto

Una volta trovati i domini in cui H è simmetrico, possiamo calcolare gli indici di difetto per vedere se è autoaggiunto o se è possibile estenderlo in un dominio in cui lo sia, ed eventualmente trovare tale dominio. Ricordando le definizioni di n_+ ed n_- , il nostro problema è risolvere le equazioni:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\varphi^2}\psi - i\psi = 0 \tag{2.23}$$

e:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\varphi^2}\psi + i\psi = 0 \tag{2.24}$$

Le soluzioni ammesse si ottengono integrando:

$$\psi_{+} = c_{1}' e^{\frac{1-i}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^{2}}})\varphi} + c_{2}' e^{-\frac{1-i}{\sqrt{2}}(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^{2}}})\varphi}$$
(2.25)

e:

$$\psi_{-} = c_1 e^{\frac{1+i}{\sqrt{2}} (\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}})\varphi} + c_2 e^{-\frac{1+i}{\sqrt{2}} (\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}})\varphi}$$
(2.26)

Queste funzioni appartengono ad L^2 , pertanto gli indici di difetto sono $n_+ = n_- = 2$, e quindi per il teorema (2) H ammette infinte estensioni autoaggiunte, però noi vogliamo che le autofunzioni appartengano al dominio di simmetria di H, pertanto le matrici unitarie che ci interessano non sono tutto U(2) ma solo le matrici $A = e^{i(\alpha + \sigma_2 \beta)}$.

Capitolo 3

Autofunzioni

La matrice A dipende da $\alpha \in \beta$, e ogni scelta di questi due valori corrisponde ad una scelta delle condizioni al contorno. Possiamo quindi trovare delle condizioni generali che devono soddisfare i parametri $\alpha \in \beta$, fino a dimostrare due casi particolari che corrispondono alle situazioni già viste.

3.1 Caso generale

Possiamo procedere risolvendo innanzitutto l'equazione:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \tag{3.1}$$

per poi imporre la condizione di appartenenza al dominio di simmetria. Le soluzioni della (3.1) sono (poniamo $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$):

$$\psi(\varphi) = c_+ e^{ik\varphi} + c_- e^{-ik\varphi} \tag{3.2}$$

Non ci resta che uguagliare $A\Psi(0)$ a $\Psi(2\pi)$, dove i vettori Ψ sono quelli definiti in (2.18) (sia $\omega = e^{ik2\pi}$):

$$A\begin{pmatrix} c_+ + c_-\\ ikc_+ - ikc_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_+\omega + c_-\omega^{-1}\\ ikc_+\omega - ikc_-\omega^{-1} \end{pmatrix}$$
(3.3)

Essendo:

$$A = e^{i(\alpha + \sigma_2 \beta)} = e^{i\alpha} e^{i\sigma_2 \beta} = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix}$$
(3.4)

(per la dimostrazione vedere Appendice A), il prossimo passo consiste nel risolvere le equazioni:

$$e^{i\alpha} (c_{+} \cos\beta + c_{-} \cos\beta + ikc_{+} \sin\beta - ikc_{-} \sin\beta) = c_{+}\omega + c_{-}\omega^{-1}$$
$$e^{i\alpha} (-c_{+} \sin\beta - c_{-} \sin\beta + ikc_{+} \cos\beta - ikc_{-} \cos\beta) = ikc_{+}\omega - ikc_{-}\omega^{-1}$$
$$(3.5)$$

Queste equazioni ammettono come soluzione $c_+ = c_- = 0$, che corrisponde al caso di assenza di particella. Per ottenere una soluzione diversa da quella banale, dobbiamo trovare per quali valori di k si annulla il determinante dei coefficienti:

$$\frac{e^{i\alpha}\cos\beta + ike^{i\alpha}\sin\beta - \omega}{e^{i\alpha}\cos\beta - ike^{i\alpha}\sin\beta - \omega^{-1}} = 0 \quad (3.6)$$

Il che ci conduce all'equazione:

$$-2ik + 2ike^{i\alpha}e^{-2i\pi k}\cos\beta + 2ike^{i\alpha}e^{2i\pi k}\cos\beta - 2ike^{2i\alpha} - e^{i\alpha}e^{-2i\pi k}\sin\beta + e^{i\alpha}e^{2i\pi k}\sin\beta - k^2e^{i\alpha}e^{-2i\pi k}\sin\beta + k^2e^{i\alpha}e^{2i\pi k}\sin\beta = 0$$
(3.7)

che in alcuni casi diventa di facile risoluzione. Possiamo infatti risolverla con particolari valori di $\alpha \in \beta$ e confrontare i risultati ottenuti con quelli che avevamo ricavato nelle sezioni 1.4 e 2.1.

3.2 Casi particolari

Una delle scelte che possiamo fare consiste nel porre $\beta = 0$ e $\alpha = 0$. Le equazioni (3.5) si semplificano, diventando:

$$c_{+} + c_{-} = c_{+}\omega + c_{-}\omega^{-1}$$

$$c_{+} - c_{-} = c_{+}\omega - c_{-}\omega^{-1}$$
(3.8)

quindi il determinante in (3.6) è:

$$\begin{vmatrix} 1 - \omega & 1 - \omega^{-1} \\ 1 - \omega & \omega^{-1} - 1 \end{vmatrix}$$
(3.9)

Se lo poniamo = 0 otteniamo:

$$\omega^2 - 2\omega + 1 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \omega = e^{i2\pi k} = 1 \tag{3.10}$$

che è risolta per valori di k interi, ossia $\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^2 = n \operatorname{con} n$ intero. Per quanto riguarda le autofunzioni invece abbiamo:

$$\psi(\varphi) = c e^{in\varphi} \tag{3.11}$$

dove abbiamo imposto che l'onda abbia solo componente progressiva. Gli autovalori e le autofunzioni coincidono con quelli che avevamo ricavato precedentemente nella sezione 2.1, quindi questo è il caso della patricella su di un cerchio con condizioni al contorno periodiche.

Poniamo ora $\beta=0$ e $\alpha\neq 0.$ Otteniamo:

$$e^{i\alpha}(c_{+} + c_{-}) = c_{+}\omega + c_{-}\omega^{-1}$$

$$e^{i\alpha}(ic_{+}k - ic_{-}k) = ic_{+}k\omega - ic_{-}k\omega^{-1}$$
(3.12)

Come abbiamo visto precedentemente, dobbiamo porre il determinante dei coefficienti = 0 per ottenere la condizione che ω deve soddisfare:

$$\omega^2 e^{i\alpha} - \omega (e^{2i\alpha} + 1) + e^{i\alpha} = 0 \tag{3.13}$$

che impilca $\omega e^{i\alpha} = 1$ oppure $\omega e^{-i\alpha} = 1$, ossia $k_1 = n + \frac{\alpha}{2\pi} e k_2 = n - \frac{\alpha}{2\pi}$. Le soluzioni saranno:

$$\psi(\varphi) = c \exp\left\{i\left(\frac{\alpha}{2\pi} + n\right)\varphi\right\}$$
(3.14)

che sono le autofunzioni periodiche a meno di una fase, esattamente uguali a quelle trovate nella sezione 1.4 con l'effetto Aharonov-Bohm: basta infatti porre $\alpha = \frac{2\pi e}{\hbar c} \Phi_B$ per avere la funzione d'onda in (1.23).

Notiamo come in questo caso compaia una degenerazione. Prendiamo ad esempio $k = n - \frac{\alpha}{2\pi}$ e consideriamo una ψ fatta in questo modo:

$$\psi(\varphi) = c_+ e^{i(n - \frac{\alpha}{2\pi})\varphi} + c_- e^{-i(n - \frac{\alpha}{2\pi})\varphi} = c_+ e^{in\varphi - \frac{\alpha}{2\pi}\varphi} + c_+ e^{-in\varphi + \frac{\alpha}{2\pi}\varphi}$$
(3.15)

Consideriamo ora una ψ' in cui al posto di k sostuiamo $k = n' + \frac{\alpha}{2\pi}$ dove n' = -n:

$$\psi'(\varphi) = c_+ e^{-in\varphi + \frac{\alpha}{2\pi}\varphi} + c_- e^{in\varphi - \frac{\alpha}{2\pi}\varphi}$$
(3.16)

Come si vede, se scambiamo c_+ con c_- otteniamo la stessa ψ che compare in (3.15), quindi abbiamo una degenerazione in n delle autofunzioni.

Abbiamo così dimostrato come il dominio di H sia in realtà più ampio di quello visto nella sezione 2.1, infatti al variare di $\alpha \in \beta$ otteniamo autofunzioni non necessariamente periodiche che ci descrivono situazioni effettivamente riscontrabili.

Conclusioni

Studiando l'effetto Aharonov-Bohm ci siamo trovati ad affrontare una situazione in cui una particella su un cerchio è rappresentata da una funzione d'onda non periodica. Abbiamo collegato questo fenomeno ai domini di autoaggiuntezza del laplaciano, i quali sono risultati dipendere da una matrice A. Tale matrice, dipende a sua volta da due parametri, $\alpha \in \beta$, e ci siamo quindi proposti di mostrare per quali valori di questi corrisponda la particolare condizione trovata inizialmente.

Appendice A

Giustificazione della scelta di A

In questa appendice mostriamo come effettivamente $A = e^{i(\alpha + \sigma_2 \beta)}$ soddisfi la condizione (2.20). Il primo passo consiste nello scrivere esplicitamente A: in essa compare $e^{i\sigma_2\beta}$ che è l'esponenziale di σ_2 . Per definizione, data $M \in \Re^{n \times n}$, l'esponenziale di M è:

$$e^M = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{M^i}{i!} \tag{A.1}$$

Però σ_2 è diagonalizzabile, pertanto non è necessario usare la definizione in quanto vale una proprietà che afferma che: sia $M \in \Re^{n \times n}$ una matrice diagonalizzabile che ha come autovalori λ_i . Allora si può scrivere:

$$e^{M} = P \begin{pmatrix} e^{\lambda_{1}} & 0 \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{\lambda_{n}} \end{pmatrix} P^{-1}$$
(A.2)

dove P è la matrice di cambio delle coordinate e P^{-1} la sua inversa.

Nel nostro caso, $P = \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$ e $P^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$, e gli autovalori di σ_2 sono

 $\lambda_1=1$ e $\lambda_2=-1;$ quind
i $e^{i\sigma_2\beta}$ può essere scritto usando la (A.2):

$$e^{i\sigma_{2}\beta} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\beta} & 0 \\ 0 & e^{-i\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{i\beta} + e^{-i\beta} & -ie^{i\beta} + ie^{-i\beta} \\ ie^{i\beta} - ie^{-i\beta} & e^{i\beta} + e^{-i\beta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\beta & \sin\beta \\ -\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix}$$
(A.3)

Sfruttando questa proprietà A la scriveremo come:

$$A = e^{i(\alpha + \sigma_2 \beta)} = e^{i\alpha} e^{i\sigma_2 \beta} = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta \\ -\sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix}$$
(A.4)

Nella (2.20) compare A^{\dagger} che è l'hermitiana coniugata di A:

$$A^{\dagger} = A^{-1} = \frac{e^{i\alpha}}{e^{2i\alpha}} \begin{pmatrix} \cos\beta & -\sin\beta\\ \sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix}$$
(A.5)

Ora che abbiamo trovato $A \in A^{\dagger}$ possiamo verificare la (A.2):

$$A^{\dagger} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} A = \frac{1}{e^{i\alpha}} \begin{pmatrix} \sin\beta & \cos\beta \\ -\cos\beta & \sin\beta \end{pmatrix} A$$
(A.6)

Sostituendo l'espressione di A che ci siamo ricavati in (A.4):

$$A^{\dagger} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} A = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} \\ E_{21} & E_{22} \end{pmatrix}$$
(A.7)

dove E_{ij} sono gli elementi di matrice:

$$E_{11} = \sin \beta \cos \beta - \sin \beta \cos \beta = 0$$

$$E_{12} = \sin^2 \beta + \cos^2 \beta = 1$$

$$E_{21} = -\cos^2 \beta - \sin^2 \beta = -1$$

$$E_{22} = -\cos \beta \sin \beta + \cos \beta \sin \beta = 0$$

(A.8)

che possono essere facilmente calcolati svolgendo il conto in (A.6).

Sostituendo nell'espressione di partenza:

$$A^{\dagger} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$
(A.9)

Abbiamo così dimostrato che scegliendo una matrice definita in questo modo vale la condizione che ci soddisfa la (2.20).

Bibliografia

- J.J. Sakurai: Modern Quantum Mechanics. Addison Wesley Longman (1967)
- [2] Fiorenzo Bastianelli: Appunti sugli integrali funzionali (path integrals).
 (2009) www-th.bo.infn.it/people/bastianelli/path-integrals-09.pdf
- [3] G. Bonneau, J. Faraut, G. Valent: Self-adjoint extension of operators and the teaching of quantum mechanics. Am.J.Phys. 69 (2001) 322. http://arxiv.org/abs/quant-ph/0103153v1
- [4] F. Lizzi, G. Miele, F. Nicodemi: Problemi di Meccanica Quantistica. http://people.na.infn.it/ pq-qp/exercises/exercises.zip (2006)
- [5] K. Konishi, G. Paffuti: Meccanica quantistica: nuova introduzione.
 Oxford University Press (2006)