

GIANFAUSTO DELL'ANTONIO

ASPETTI MATEMATICI DELLA
MECCANICA QUANTISTICA

A Caterina, Fiammetta, Simonetta,
che hanno dato colore nuovo alla mia vita.

Whether our attempt stands, the test can only be shown
by quantitative calculations of simple systems.

Max Born, *On Quantum Mechanics*
Zeitschrift für Physik 26 (1924), 379-395

INTRODUZIONE

Questo testo di Meccanica Quantistica ha origine dalle lezioni che ho tenuto nel corso degli anni agli studenti del quarto anno, e poi della laurea specialistica, del Dipartimento di Matematica dell'Università di Roma La Sapienza. È stato di spunto per miei seminari/lezioni agli studenti della Scuola di Dottorato in Matematica della Università di Roma La Sapienza e agli studenti di Dottorato in Matematica del settore di Fisica Matematica della Sissa di Trieste.

Ho cercato di delineare una presentazione che, senza togliere alla precisione matematica, facesse cogliere la struttura concettuale e l'unità della teoria. Occorre chiarire subito che la Meccanica Quantistica che viene descritta in questo libro è la meccanica quantistica non-relativistica formulata nelle sue parti essenziali da De Broglie e soprattutto Schrödinger da un lato, e da Born, Heisenberg e Jordan dall'altro, con contributi importanti di Dirac e Pauli. Questo libro non tratta, se non molto marginalmente, argomenti relativi a sistemi quantistici con infiniti gradi di libertà, Teoria dei Campi Quantizzati e Meccanica Statistica Quantistica.

Ho avuto modo di compiere una rielaborazione di tutto il testo durante gli anni in distacco all'Accademia dei Lincei, e la stesura definitiva di alcuni capitoli è stata fatta in occasione della preparazione di una serie di lezioni/seminari che ho tenuto al Dipartimento di Fisica dell'Università Federico II di Napoli nell'ambito del progetto Mecenas. La forma finale della presentazione di questi capitoli ha tratto molto beneficio dall'attenta partecipazione dei presenti.

Desidero qui ringraziare gli studenti che hanno seguito i miei corsi e i numerosi colleghi con i quali ho discusso il contenuto di questo libro per commenti, suggerimenti e critiche costruttive che ne hanno molto migliorato la fruibilità da parte degli studenti. In particolare desidero ringraziare Sergio Albeverio e Andrea Posilicano per l'attenta lettura e Giuseppe Marmo e Alessandro Teta per i numerosi commenti.

Desidero ringraziare il mio gruppo di ricerca delocalizzato MMQM (Mathematical Methods in Quantum Mechanics) per l'aiuto datomi nella correzione di errori, di stampa e non solo: un grazie particolare va a Alessandro Teta per il lavoro di coordinamento.

Desidero infine ringraziare caldamente Alessandro Zampini per la preziosa collaborazione nel porre il testo in veste di stampa, e per l'accurata revisione; ed ancora Giuseppe Marmo per il contributo dato all'edizione presso Bibliopolis.

PRESENTAZIONE

Il primo volume del libro (Capitoli da 1 fino a 10) contiene gli elementi essenziali della costruzione matematica e concettuale della Meccanica Quantistica, e alcuni degli strumenti matematici che maggiormente sono utilizzati per la sua

formulazione. Alcuni capitoli contengono costruzioni specifiche della dinamica quantistica e applicazioni tratte da problemi di Fisica.

Questa parte introduttiva serve a familiarizzare lo studente con il formalismo della Meccanica Quantistica, e tuttavia contiene argomenti che sono ancora oggetto di ricerca.

Ciascuno dei capitoli del secondo volume (Capitoli da 11 a 19) tratta un tema specifico, spesso oggetto tuttora di ricerca, scelto tra quelli che considero più interessanti. Poiché la definizione interessante è largamente soggettiva, alcuni dei temi non trattati possono essere da altri considerati più rilevanti o di maggiore interesse per alcune applicazioni. Le applicazioni della Meccanica Quantistica coprono un vastissimo spettro di argomenti di ricerca, e la scelta di quali trattare non può essere che individuale.

Il Capitolo 1 è una breve introduzione storica, a mio avviso necessaria per comprendere la formulazione della Meccanica Quantistica.

Il Capitolo 2 contiene un'analisi del linguaggio (anche matematico) della Meccanica Quantistica e delle difficoltà concettuali che si incontrano nel rapportare questo linguaggio alla realtà sperimentale, in particolare per quanto riguarda la teoria della misurazione e la decoerenza. La Meccanica Quantistica è un modello, denso di aspetti storici e culturali, che possiamo utilizzare per descrivere e organizzare le esperienze relative a sistemi fisici delle dimensioni atomiche, e in questo campo ci dà risposte estremamente accurate e previsioni di straordinaria efficacia. Gran parte della tecnologia che è stata sviluppata negli ultimi decenni è basata sull'utilizzazione del formalismo della Meccanica Quantistica. Tuttavia una parte concettuale della Meccanica Quantistica non è stata finora posta in forma completamente soddisfacente e può darsi che il modello Meccanica Quantistica, nel modo in cui è esposto in questo libro, non colga completamente la complessità dei fenomeni su scala atomica. Questo è in parte dovuto al fatto che il linguaggio (nel senso linguistico del termine) che viene utilizzato per descrivere l'organizzazione degli esperimenti e per comunicare i risultati di un'esperienza (e addirittura per descrivere un'esperienza e la sua importanza) è quello della fisica classica (macroscopica), l'unica a cui accediamo direttamente con i nostri sensi.

In particolare la formalizzazione che dà la Meccanica Quantistica dei processi di misurazione presenta notevoli problemi concettuali. Un'appendice viene dedicata alla descrizione di un formalismo, originato da de Broglie e che chiameremo *dell'onda guida*. In questa formulazione i punti materiali (elementari) vengono *guidati* da un campo di velocità costruito a partire da una funzione d'onda complessa che nella sua dipendenza dallo spazio e dal tempo soddisfa l'equazione di Schrödinger. Questo formalismo evita i problemi connessi alla misurazione, ma ne introduce altri di natura statistica.

Il Capitolo 3 contiene i primi elementi di dinamica quantistica e la loro connessione con i gruppi che preservano strutture fondamentali relative ai concetti di

stato e osservabile. Questo formalismo viene successivamente esemplificato con la trattazione del moto di un sistema quantistico non soggetto a forze, allo scopo di introdurre tecniche di analisi che verranno utilizzate in seguito per studiare la dinamica di sistemi con interazioni. In un'appendice viene data una trattazione elementare del ruolo di strutture topologiche nella descrizione quantistica di sistemi semplici nei quali la hamiltoniana varia lentamente nel tempo (sistemi adiabatici); in particolare viene trattata brevemente la *fase topologica* (fase di Berry).

I Capitoli 4, 5, 6, 9 danno una breve introduzione alle strutture matematiche che formano la base matematica della Meccanica Quantistica. A questo proposito conviene notare che la Meccanica Quantistica ha avuto un ruolo determinante nello sviluppo di gran parte della matematica moderna, in parte attraverso il contributo di Fisici Matematici e in parte come stimolo per lo sviluppo di tecniche che hanno poi avuto applicazioni in altri campi della matematica. Questi capitoli danno i primi rudimenti e applicazioni relativamente elementari della teoria delle algebre di von Neumann, della teoria dei semigrupp, in particolare semigrupp di Markov, della teoria degli operatori su spazi di Hilbert e della teoria delle estensioni di questi operatori, quando necessario e possibile, per fornire generatori di gruppi ad un parametro di simmetrie o di evoluzione temporale. Tutte queste strutture hanno un ruolo essenziale nella formulazione matematica della Meccanica Quantistica e delle sue applicazioni.

Il Capitolo 7 tratta il sistema di Weyl e la sua algebra, uno degli strumenti chiave nella formulazione matematica della Meccanica Quantistica. Viene descritta la sua relazione con la descrizione della quantità di moto in Meccanica Quantistica, un punto centrale sia nella linea di De Broglie-Schrödinger che in quella di Born-Heisenberg-Jordan. Vengono anche descritte le rappresentazioni che hanno avuto un ruolo principale nella successiva estensione della Meccanica Quantistica a sistemi con infiniti gradi di libertà e vengono dati brevi cenni al problema di cosa debba intendersi per quantizzazione. A questo proposito è interessante notare che il termine quanto utilizzato da Planck e poi più efficacemente da Einstein – quanto di luce – è poco connesso alla quantizzazione introdotta in Meccanica Quantistica non relativistica.

Il Capitolo 8 tratta in modo relativamente elementare il problema del limite semiclassico, cioè il modo in cui la dinamica quantistica rifletta la dinamica classica quando viene applicata in circostanze in cui, per i fenomeni considerati, le quantità che vengono misurate e che hanno la dimensione di un'azione risultano avere valori molto maggiori della costante di Planck. In una parte di questo capitolo utilizziamo anche i metodi di fase stazionaria, in analogia a quanto avviene nella trattazione dell'ottica geometrica e della sua relazione con l'ottica ondulatoria. Una trattazione più completa del limite semiclassico con strumenti matematici più avanzati viene ripresa nella seconda parte di questo libro, al capitolo 11.

Il Capitolo 10 utilizza gli strumenti matematici descritti nei capitoli 4, 5, 6, 9 per analizzare la dinamica quantistica di uno o più punti materiali che interagiscono tra loro mediante forze di natura potenziale; vengono descritte in questo capitolo le dinamiche associate a potenziali di varia regolarità, vengono date tecniche generali di costruzione e vengono esplicitate classi di potenziali per i quali è possibile la costruzione di una dinamica quantistica.

Il Capitolo 11 inizia con la descrizione della funzioni di Wigner, uno strumento introdotto per descrivere aspetti del limite semiclassico ma che ha assunto una rilevanza propria nella trattazione della Meccanica Quantistica. Strettamente connessa a questo tema, attraverso la quantizzazione di Weyl descritta nel Capitolo 7, è la formulazione mediante operatori pseudodifferenziali, generalizzazione naturale ed efficace degli operatori differenziali che appaiono nell'equazione di Schrödinger. Gli operatori pseudodifferenziali giocano un ruolo importante nella trattazione matematica della materia cristallina, soprattutto in presenza di campi magnetici, e in generale nei problemi che provengono dalla Fisica dello stato solido.

Il Capitolo 12 riguarda una particolare classe di operatori in uno spazio di Hilbert, gli operatori compatti. Essi giocano un ruolo particolare nella trattazione matematica della Meccanica Quantistica, e le loro proprietà sono alla base di numerosi risultati matematici che hanno rilevanza in Fisica. Questo capitolo raccoglie anche un'antologia di disuguaglianze che sono utili e di uso comune.

Il Capitolo 13 contiene una trattazione matematica della parte di Meccanica Quantistica che riguarda i potenziali periodici, utilizzati per descrivere la struttura cristallina. Questo aspetto della Meccanica Quantistica copre una larga parte delle applicazioni alla Fisica dello stato solido, e costituisce un campo di ricerca molto attivo e denso di problemi aperti.

Il Capitolo 14 introduce la formula di Feymann-Kac, uno degli argomenti più discussi soprattutto per la sua utilizzazione nella trattazione di sistemi con infiniti gradi di libertà (teoria dei campi quantizzati). Nella maggior parte di queste trattazioni la formula stessa viene utilizzata in modo formale, senza una vera giustificazione matematica. In questo capitolo la formula di Feymann-Kac viene connessa al semigruppato del calore; in questo contesto viene data una breve trattazione della teoria matematica delle probabilità, delle variabili casuali, del moto Browniano e sue generalizzazioni e dei processi di Markov.

Il Capitolo 15 analizza la teoria delle forme quadratiche, in particolare della forma di Dirichlet, in connessione con la formulazione della teoria degli operatori autoaggiunti come teoria delle forme quadratiche. Viene anche discussa la connessione con l'operatore modulare e con la condizione K.M.S. utilizzata soprattutto, ma non solo, in Meccanica Statistica Quantistica, nonché con la versione non commutativa dell'equivalenza tra misure espressa dalla derivata di Radon-Nikodym.

Il Capitolo 16 contiene la trattazione quantistica dell'atomo di idrogeno e degli atomi idrogenoidi, sottolineando nel primo caso il ruolo, in analogia con il caso classico, della presenza di un'ulteriore costante del moto (oltre a quelle che per il teorema di Noether vengono associate alle simmetrie continue del sistema). Il capitolo termina con la descrizione dei metodi con cui è possibile dare una stima, in generale dall'alto, del numero di stati legati di un sistema quantistico.

Il Capitolo 17 riguarda elementi di teoria dello scattering in Meccanica Quantistica. Vengono discusse la formulazione dipendente dal tempo, in cui si analizza direttamente il comportamento asintotico nel tempo di uno stato puro quantistico sotto l'evoluzione generata da una forza di natura potenziale, e la teoria stazionaria dello scattering in cui lo stesso comportamento viene analizzato attraverso lo studio dell'operatore risolvente e delle sue proprietà. Il capitolo contiene anche la descrizione di un metodo, dovuto ad Enss, basato su uno studio dettagliato della propagazione della funzione nello spazio delle configurazioni. Per la sua efficacia questo metodo di Enss viene utilizzato negli articoli di ricerca che riguardano la struttura generale dello scattering in Meccanica Quantistica; gli altri due metodi, e soprattutto la teoria stazionaria dello scattering, sono più utilizzati per analizzare in dettaglio la matrice di scattering per il caso di specifici interessanti potenziali.

Il Capitolo 18 riprende la teoria dello scattering analizzando il metodo di Mourre, che prende spunto dal metodo di Enss e lo generalizza. Il metodo di Mourre (e le sue generalizzazioni successive, come ad esempio il metodo degli operatori coniugati) è oggi il metodo che viene più comunemente utilizzato nello studio degli aspetti matematici della teoria dello scattering da forze di natura potenziale. Il metodo stesso è stato poi generalizzato per permettere una trattazione matematica del sistema composto da N corpi quantistici interagenti mutuamente mediante forze di natura potenziale. In questo capitolo viene brevemente descritta la struttura spettrale del sistema quantistico di N corpi e vengono dati elementi della teoria dello scattering per questo sistema.

Nel Capitolo 19 viene descritta la teoria delle applicazioni completamente positive, che giocano un ruolo determinante nella trattazione dei sistemi quantistici aperti (cioè in interazione con un ambiente quantistico esterno della cui modificazione non è possibile tener traccia). In questo contesto si analizzano i semigruppì markoviani e le proprietà di ipercontrattività di operatori su spazi di funzioni (contrattività tra spazi dotati di topologie diverse, che portano in generale ad avere proprietà di regolarità maggiore della funzione immagine). Queste proprietà di ipercontrattività portano spesso in Meccanica Quantistica a formulare criteri di esistenza e unicità dello stato di energia minima (stato fondamentale) e sono alla base della costruzione della teoria dei campi quantizzati. Esse generalizzano al caso di dimensione infinita gli strumenti di teoria delle funzioni tipici della formulazione di Schrödinger della Meccanica Quantistica.

BIBLIOGRAFIA GENERALE

Questa è una bibliografia che riporta testi di carattere generale sugli argomenti connessi ai temi trattati nell'opera. Ogni singolo capitolo termina poi con riferimenti bibliografici specificatamente rilevanti.

- [1] Amrein V., Jauch J, Sinha K.
Scattering theory in Quantum Mechanics
V.Benjamin, Reading Mass, 1977.
- [2] Baez J., Segal I.E., Zhou Z.
Introduction to Algebraic and Constructive Field Theory
Princeton University Press 1992
- [3] Bratteli O.
Derivations, Dissipations and Group Actions on C^ -algebras*
1229 Lecture Notes in Mathematics, Springer 1986
- [4] Bratteli O., Robinson D.W.
Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics I,II
Springer Verlag New York 1979/87
- [5] Brezis J.
Analisi Funzionale e Applicazioni
Liguori (Napoli) 1986
- [6] Cassinelli G., De Vito E., Levrero A., Lahti P.J.
The Theory of Symmetry Actions in Quantum Mechanics
Springer Verlag 2004
- [7] Cycon H.L., Froese R.H., Kirsch W., Simon B.
Schrödinger operators with application to Quantum Mechanics and global geometry
Text and Monographs in Physics, Springer Berlin 1987
- [8] Davies E.B.
Quantum Theory of open systems
Academic Press 1976

- [9] Dixmier J.
Les Algebres d'operateurs dans l'espace hilbertien
Gauthier-Villars Paris 1969
- [10] Doob J.
Stochastic processes
Wiley New York 1953
- [11] Folland G.B.
Harmonic analysis in Phase Space
Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1989
- [12] Gustafson S., Segal I.M.
Mathematical Concepts of Quantum Mechanics
Springer 2006
- [13] Hille E., Phillips R.S.
Functional Analysis and Semigroups
American Math.Society 1957
- [14] Hislop P.D., Sigal I.M.
Introduction to Spectral Theory, with application to Schrödinger Operators
Springer New York 1996
- [15] Kadison R.V., Ringrose J.R.
Fundamentals of the Theory of Operator Algebras vol. I - IV
Academic Press 1983/ 86
- [16] Kato T.
Perturbation Theory for Linear Operators
Springer (Berlin) 1980
- [17] Kuchment P.
Floquet Theory for Partial Differential Equations
Birkhauser Basel, 1993
- [18] Jammer M.
The conceptual development of Quantum Mechanics
Mc Graw-Hill New York 1966

- [19] Mackey G.W.
Mathematical Foundations of Quantum Mechanics
Benjamin N.Y. 1963
- [20] Maslov V.P., Fedoriuk M.V.
Semi-classical approximation in quantum mechanics
Kluwer, Dordrecht 1981
- [21] Nelson E.
Topics in Dynamics, I: Flows
Notes Princeton University Press 1969
- [22] Pedersen G.K.
C-algebras and their Automorphism Groups*
Academic Press London 1979
- [23] Reed M., Simon B.
Methods of Modern Mathematical Physics vol. I - IV
Academic Press , N.Y. and London 1977, 1978
- [24] Sakai S.
C- algebras and W*-algebras*
Springer Verlag Belin 1971
- [25] Segal I.E.
Mathematical Problems of Relativistic Physics
American Math. Soc. Providence R.I. 1963
- [26] Simon B.
Quantum Mechanics for Hamiltonians defined as Quadratic Forms
Princeton Series in Physics, Princeton University press 1971
- [27] Simon B.
Functional Integration and Quantum Physics
Academic Press 1979
- [28] Sinai Y.G.
Probability Theory
Springer Textbooks, Springer Berlin 1992

- [29] Takesaki M.
Tomita's Theory of Modular Hilbert Algebras
Lecture Notes in Mathematics vol 128, Springer Verlag Heidelberg 1970
- [30] Takesaki M.
Theory of Operator Algebras
Vol 1, Springer , New York, 1979
- [31] Teufel S.
Adiabatic Perturbation Theory in Quantum Dynamics
Lecture Notes in Mathematics vol. 1821 Spriger Verlag 2003
- [32] von Neumann J.
Mathematische Grundlage der Quantenmechanik
(Mathematical Foundation of Quantum Mechanics)
Springer Verlag Berlin 1932 (Princeton University Press 1935)
- [33] Van der Werden B.L. (ed.)
Sources of Quantum Mechanics
New York Dover 1968
- [34] Yosida K.
Functional Analysis
Springer Verlag Berlin 1971

VOLUME I

STRUTTURA MATEMATICA E
CONCETTUALE

INDICE

1	CENNI STORICI	3
1.1	Nascita della meccanica quantistica: i precedenti	8
1.2	Nascita della Meccanica quantistica: l'analisi di De Broglie	13
1.3	Nascita della meccanica quantistica: l'analisi di Schrödinger	16
1.4	Nascita della meccanica quantistica: Born, Heisenberg, Jordan	19
1.5	Sviluppi successivi	26
	Riferimenti bibliografici	33
2	STATI, OSSERVABILI, MISURAZIONI. DECOERENZA	35
	Appendice 2A: Le disuguaglianze di Bell	53
	Appendice 2B: La teoria dell'onda pilota di de Broglie	57
	Riferimenti bibliografici	62
3	DINAMICA QUANTISTICA. MOTO LIBERO	63
	Appendice 3A: Il teorema di Wigner	86
	Appendice 3B: Olonomia. Fase geometrica	90
	Appendice 3C: Comportamento delle soluzioni per $t \rightarrow \pm\infty$	99
	Riferimenti bibliografici	101
4	C^* -ALGEBRE. CONDIZIONI K.M.S.	103
4.1	Elementi di teoria delle C^* -algebre	103
4.2	Rappresentazioni	111
4.3	Automorfismi e sistemi dinamici	117
4.4	Derivazioni e generatori	122
4.5	Condizione K.M.S.	133
	Riferimenti bibliografici	140
5	ELEMENTI DI TEORIA DEGLI OPERATORI SU SPAZI DI HILBERT	141
	Appendice 5A: Richiami di teoria degli operatori	158
6	SEMIGRUPPI. DISSIPAZIONI. ASPETTAZIONE CONDIZIONATA	167
6.1	Semigrupperi di contrazione su C^* -algebre	180

6.2	Semigrupperi completamente positivi. Aspettazioni condizionate	185
	Appendice 6A: Approssimazione Markoviana	197
	Riferimenti bibliografici	201
7	ALGEBRA DI WEYL. QUANTIZZAZIONE	203
7.1	Rappresentazione di Bargmann-Segal-Fock	216
7.2	Quantizzazioni strette	226
7.3	Cenni sulla quantizzazione geometrica	231
	Appendice 7A: L'algebra di Weyl magnetica	233
	Riferimenti bibliografici	240
8	LIMITE SEMICLASSICO I. STATI COERENTI. METODO W.K.B.	243
8.1	Approssimazione semiclassica mediante stati localizzati	245
8.2	Metodo W.K.B. per l'approssimazione semiclassica	259
	Appendice 8A: Metodo W.K.B. – il caso stazionario	270
	Appendice 8B: Indice di Maslov. Gruppo metaplettico	275
	Appendice 8C: Moti periodici. Regole di quantizzazione semiclassiche	279
	Riferimenti bibliografici	286
9	ESTENSIONI AUTOAGGIUNTE	289
	Appendice 9A: Il criterio di Weyl	317
	Riferimenti bibliografici	323
10	ELEMENTI DI TEORIA DEGLI OPERATORI DI SCHRÖDINGER	325
10.1	Spettro essenziale	344

CAPITOLO 1 CENNI STORICI

Diamo in questo capitolo alcuni cenni sui risultati sperimentali e le analisi teoriche che hanno portato alla formulazione attuale della Meccanica Quantistica. Alle fine dell'Ottocento la Meccanica Classica (hamiltoniana) e l'Elettromagnetismo avevano raggiunto un notevole grado di formalizzazione e avevano assunto (specie la Meccanica) una struttura matematicamente molto raffinata.

Era convinzione comune che questa teoria classica potesse rendere conto (almeno in linea di principio) di tutti i fenomeni che riguardavano le interazioni della materia con il campo elettromagnetico. Si venivano però accumulando un gran numero di dati sperimentali che non potevano trovare una spiegazione facile nell'ambito di questa teoria classica. Ne citiamo alcuni.

Ricordiamo che Rutherford, fra il 1888 e il 1909, studiando la radiazione α , riuscì a determinare che questa radiazione è composta da atomi di elio doppiamente ionizzati. In questi esperimenti si determinò anche il valore del rapporto e/m tra carica e massa. E nel 1909 gli esperimenti condotti da Millikan portarono a determinare la carica elementare (tutti gli oggetti carichi hanno come carica un multiplo intero della carica elementare).

- 1) Un'analisi approfondita della natura degli atomi fu fatta mediante lo scattering di particelle α da un atomo. Negli esperimenti di Marsden e Geiger furono osservati eventi in cui l'angolo di deviazione era superiore ad un radiante anche in casi in cui lo spessore del materiale attraversato era dell'ordine di grandezza di $6 \cdot 10^{-5}$ cm; quindi si poteva ritenere che gli scattering multipli fossero trascurabili.

Rutherford propose quindi nel 1909 che questa deviazione fosse dovuta ad un singolo evento di scattering. Se questo è vero, la teoria classica dello scattering prevede che l'urto sia avvenuto con una particella il cui diametro è dell'ordine di grandezza di $4 \cdot 10^{-12}$ cm.

D'altra parte il raggio dell'atomo, stimato utilizzando in numero di Avogadro e l'ipotesi che il raggio dell'atomo fosse dello stesso ordine di grandezza della distanza interatomica, come suggerito da altri esperimenti, risultava essere dell'ordine di 10^{-8} cm.

Dunque l'atomo risultava essere composto di un piccolo nucleo a carica positiva e di un certo numero di particelle (elettroni) di carica negativa e di

massa molto più piccola della massa del nucleo. Gli elettroni si muovono attorno al nucleo entro un raggio dell'ordine di 10^{-8} cm.

Prima di questi esperimenti il modello atomico più diffuso era quello di Thomson, in cui la carica positiva si estende in modo uniforme su una palla di raggio di circa 10^{-8} cm. Gli esperimenti successivi, soprattutto ad opera di Geiger e Marsden, confermarono la validità del modello di Rutherford, e anche che la carica del nucleo è circa la metà del numero atomico.

D'altra parte, assumendo il modello di Rutherford, la meccanica classica prevede una grande instabilità dell'atomo, poiché gli elettroni, muovendosi di moto accelerato (secondo le leggi di Newton) devono emettere radiazione, quindi energia, e precipitare sul nucleo. I dati sperimentali, al contrario, mostravano una notevole stabilità degli atomi. Era quindi necessario postulare un meccanismo che rendesse conto di questa stabilità.

- 2) Altri risultati sperimentali mettevano in luce aspetti del mondo fisico difficilmente spiegabili con le leggi della Meccanica Classica e dell'Elettromagnetismo (classico).

Tra questi era l'effetto fotoelettrico. La quantità di elettroni emessa quando la luce incide su di una superficie metallica è proporzionale all'intensità del flusso luminoso se la frequenza della luce eccede una soglia ν_0 (che dipende dal materiale di cui è composta la superficie) ma è nulla, qualunque sia l'intensità della luce, se $\nu < \nu_0$.

La naturale interpretazione di questo fenomeno, data da Einstein, è che *in questa circostanza* la luce si comporta *come se* fosse costituita da una grande collezione di particelle, i *fotoni*. Un fotone di frequenza ν ha un'energia $h\nu$, con h costante universale (costante di Planck). Se l'energia di legame degli elettroni meno legati è data da $h\nu_0$ i fotoni di frequenza $\nu < \nu_0$ non hanno energia sufficiente a compensare l'energia di legame e la ionizzazione non ha luogo.

D'altra parte, la luce uscente dopo la ionizzazione ha una successione discreta di frequenze possibili, e questo suggerisce che l'energia degli elettroni in un metallo sia *quantizzata* (abbia solo un insieme discreto di valori possibili).

Nota 1.1

È interessante notare che è questa *quantizzazione* delle energie degli stati atomici, su cui ritorneremo in seguito, che ha dato luogo al termine *Mecanica Quantistica*. La descrizione della radiazione elettromagnetica come composta da *quanti di luce* è più propriamente legata al formalismo della *seconda quantizzazione* e quindi alla teoria dei *campi quantizzati*.



- 3) Che l'energia scambiata nei fenomeni elettromagnetici fosse *quantizzata* era stato suggerito indipendentemente da Planck per giustificare la formula empirica da lui trovata studiando la distribuzione di frequenze in un corpo nero in equilibrio termico.

Un corpo nero si può rappresentare come una cavità con pareti perfettamente riflettenti. Si pratica un piccolo foro, attraverso il quale si fa entrare una radiazione elettromagnetica che interagisce con il bordo interno della cavità. Chiuso il foro e dopo aver atteso che il sistema all'interno della cavità sia di nuovo in equilibrio, si apre nuovamente il foro e si misura lo spettro della radiazione uscente.

La radiazione di corpo nero ha una legge di distribuzione in frequenza che per considerazioni di natura termodinamica deve avere la forma

$$\rho(\nu) = \nu^3 \Phi\left(\frac{\nu}{T}\right) \quad 1.1$$

dove Φ è una funzione arbitraria e ρ è la densità di probabilità che la frequenza della radiazione sia ν .

Questa legge (legge di Wien) viene dedotta studiando la variazione dello stato della radiazione elettromagnetica quando questa viene assoggettata a un ciclo di Carnot.

Se si applicano al campo elettromagnetico le considerazioni di equipartizione di energia utilizzate in Meccanica Statistica Classica si giunge alla legge di distribuzione di frequenze di Rayleigh-Wien, $\rho(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 KT$ dove T è la temperatura in equilibrio e K la costante di Boltzmann.

La legge di Rayleigh-Wien segue dalla (1.1) ponendo $\Phi(z) = \frac{1}{z}$.

La legge trovata empiricamente da Planck è invece

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{KT}} - 1} \quad 1.2$$

dove h è una costante universale. La legge di Planck corrisponde a $\Phi(z) = (e^{\frac{h}{K}z} - 1)^{-1}$.

Per ν piccolo, o in unità di misura nelle quali la costante h risulti piccola (h ha le dimensioni di un'azione), queste due leggi di distribuzione sono praticamente coincidenti ma esse si discostano molto tra loro per ν grande.

Notiamo che la legge di Wien, che segue dall'ipotesi di equipartizione dell'energia tra i vari modi di oscillazione del campo elettromagnetico, prevede una energia totale infinita (questo è comprensibile, perché sono infiniti i modi di oscillazione di un campo elettromagnetico in una cavità).

Va precisato tuttavia che ricerche successive hanno dimostrato che per sistemi di oscillatori armonici con accoppiamento non lineare tra loro, la legge

di equipartizione dell'energia non è in generale soddisfatta (il sistema non è ergodico in generale) e anche nei casi in cui è soddisfatta almeno approssimativamente (ad esempio quando il numero di oscillatori è molto grande) il tempo richiesto al sistema per raggiungere l'equilibrio può essere estremamente lungo (in casi realistici, qualche migliaio di anni, secondo una stima di Jeans (1903)).

- 4) Se la radiazione elettromagnetica è composta da fotoni e questi vengono assimilati a particelle la legge di Planck si può invece *dedurre* sulla base di considerazioni statistiche (simili a quelle fatte da Gibbs nella sua formulazione della Meccanica Statistica) sul numero di fotoni di frequenza ν (e quindi di energia $h\nu$) che sono presenti quando la radiazione si trova in uno stato di equilibrio termico.

Assumendo che i fotoni di frequenza ν abbiano energia $h\nu$ la legge di Planck si deduce dalla distribuzione di Gibbs e la costante universale K si identifica con la costante di Boltzmann. La legge di Planck riflette il fatto che per ν grande i fotoni hanno energia grande e quindi in uno stato di energia media fissata vi possono essere solo pochi fotoni di frequenza grande.

Diamo qui brevemente la derivazione della legge di Planck fatta da Einstein nel 1917. Consideriamo un atomo in equilibrio con la radiazione. Sia

$$\Delta w = A_m^n \Delta t$$

la probabilità di passaggio *spontaneo* (in un tempo Δt) dell'atomo da uno stato di energia E_m (per semplicità, stato m) ad uno stato n con emissione di un fotone.

Sia $\frac{dw}{dt} = B_n^m \rho$ la (densità di) probabilità di emissione, per irraggiamento con simultaneo passaggio dallo stato m allo stato n , quando la densità della radiazione presente è ρ .

Sia $\frac{dw}{dt} = B_m^n \rho$ la probabilità di assorbimento della radiazione con simultaneo passaggio dell'atomo dallo stato n allo stato m .

Secondo le leggi della Meccanica Statistica di Gibbs, lo stato del sistema atomo-radiazione sarà di equilibrio se risultano uguali (per ogni frequenza) le probabilità di emissione e di assorbimento

Dunque, indicando con p_n la probabilità che l'atomo si trovi nella stato n , si dovrà soddisfare

$$p_n e^{-\frac{E_n}{KT}} B_n^m \rho = p_m e^{-\frac{E_m}{KT}} (B_m^n \rho + A_m^n) \quad 1.3$$

(i fattori $\frac{E_n}{KT}$ vengono dedotti dalle leggi di Gibbs).

Questa relazione deve valere per ogni temperatura ed ogni densità. Prendendo prima il limite $\rho \rightarrow \infty$ e poi il limite $T \rightarrow \infty$ si deduce

$$B_n^m p_n = B_m^n p_m \quad 1.4$$

da cui, sostituendo in (1.3) si ottiene

$$\rho = \frac{A_m^n}{B_m^n} \frac{1}{e^{\frac{E_n - E_m}{kT}} - 1}. \quad 1.5$$

Confrontando con la legge di Planck, si ottiene

$$E_m - E_n = h\nu. \quad 1.6$$

Dunque, se il fotone segue le leggi della Meccanica Statistica, la sua energia deve essere $h\nu$.

In seguito, studiando le proprietà termodinamiche (inclusa la pressione) di un campo elettromagnetico soggetto a compressione (la dimensione spaziale del corpo nero viene modificata dall'azione di un pistone) Einstein mise in luce che il fotone possiede anche una quantità di moto, e che la relazione tra energia e quantità di moto è $E^2 = c^2 p^2$ dove c è la velocità della luce nel vuoto. Questa è la relazione che intercorrerebbe tra l'energia e la quantità di moto di una particella classica di massa a riposo zero.

- 5) Nel frattempo erano stati accumulati numerosi dati sui valori delle frequenze delle radiazioni luminose emesse o assorbite dagli atomi. In particolare per l'atomo di idrogeno era stata trovata empiricamente la *Formula di Balmer*

$$k_m = 2\pi R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad m = 1, 2, \dots \quad 1.7$$

dove k_m è il numero d'onda ($\equiv 2\pi/\lambda$) e R è (approssimativamente) una costante universale (costante di Rydberg). Per atomi più complessi si trovava invece

$$k_m = K^0 - \frac{2\pi R}{(m+p)^2}, \quad p = 1, 2, \dots \quad 1.8$$

dove K^0 è una costante.

Ammettendo l'ipotesi fotonica della luce, le (1.8) e (1.7) danno una regola per calcolare l'energia degli stati nei quali si trova l'atomo prima e dopo l'emissione (o l'assorbimento) di un fotone di frequenza ν .

Questi risultati, e altri sulla frequenza della luce emessa o assorbita dagli atomi, anche in presenza di campi elettrici o magnetici, erano noti in dettaglio fin dal 1905-1909, ma non avevano trovato un inquadramento teorico soddisfacente.

Un primo tentativo era stato fatto da Haas (1910) nell'ambito del modello di Thomson (considerato allora significativo) uguagliando l'energia potenziale di un elettrone (come ricavata dal modello) con la sua frequenza di rotazione, facendo quindi l'ipotesi che anche per un elettrone valesse la relazione tra energia e

frequenza. Posto anche qui $E = h\nu$ si trova un valore di h non molto diverso da quello ottenuto studiando lo spettro del corpo nero o l'effetto fotoelettrico.

Un ulteriore passo per stabilire una relazione tra energia potenziale di un elettrone e frequenza della radiazione emessa o assorbita fu fatto da Nicholson nel 1911 in un modello a bande in cui gli elettroni formano bande che ruotano attorno ai nuclei (a questo punto il modello di Rutherford aveva soppiantato il modello di Thomson).

1.1 NASCITA DELLA MECCANICA QUANTISTICA: I PRECEDENTI

La prima *collezione organica di regole* per determinare l'energia degli stati di un atomo sulla base della Meccanica Classica e di regole di selezione fu formulata da Niels Bohr nel 1913.

Assumendo che l'atomo raggiunga lo stato di equilibrio mediante emissione di radiazione omogenea e monocromatica si ottiene per l'energia potenziale W , utilizzando il teorema del viriale (la media dell'energia cinetica dell'elettrone sull'orbita coincide con la media dell'energia potenziale)

$$W = \tau \frac{h\nu}{2}, \quad \tau \in \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\} \quad 1.9$$

D'altra parte, dalla Meccanica Newtoniana, se in un moto circolare ω è la frequenza orbitale ed a è il raggio dell'orbita, si ha

$$\omega = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \frac{a^{3/2}}{eQ\sqrt{m}} \quad 1.10$$

dove Q è la carica del nucleo. Un confronto con i dati sperimentali fornisce quindi i possibili raggi delle orbite, che risultano *quantizzati*.

I primi due principi enunciati da Bohr furono

- 1) Gli stati di equilibrio di un atomo si possono descrivere mediante la Meccanica Classica. Almeno nel caso semplice dell'atomo di idrogeno si tratta di orbite circolari per gli elettroni e i raggi permessi soddisfano (1.10).
- 2) La transizione da uno stato all'altro non è descritta dalla Meccanica Classica. La transizione è accompagnata dall'emissione (o assorbimento) di radiazione monocromatica con conservazione dell'energia secondo la legge di Planck.

Dunque vale l'implicazione

$$E_{\tau_2} - E_{\tau_1} = h\nu_{\tau_1 \rightarrow \tau_2} \quad \Rightarrow \quad \nu = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3} \frac{1}{\tau_2^2 - \tau_1^2}$$

dove τ_k sono i *numeri quantici* che caratterizzano ciascun atomo. Bohr notò anche che, per orbite circolari, la condizione trovata implica che gli stati

di equilibrio di un atomo sono quelli in cui le orbite degli elettroni hanno momento angolare multiplo di $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$.

Nota 1.2

A rigore, questo modello è valido solo per l'atomo di idrogeno. Per atomi più complessi il moto classico non è così semplice e la regola che connette l'energia degli stati legati del sistema quantistico ad alcuni moti periodici del sistema classico risulta molto più complessa.



Il terzo principio enunciato da Bohr permette di determinare il valore della costante di Rydberg in funzione delle altre costanti che intervengono nella teoria. Si tratta del principio di corrispondenza.

3) (*Principio di corrispondenza*)

Per N (numero quantico dello stato) molto grande, la frequenza della radiazione che accompagna la transizione da uno stato τ_N ad uno stato τ_{N-1} deve essere (approssimativamente) uguale alla frequenza orbitale del moto dell'elettrone, così che per N grande vale (approssimativamente) la teoria della radiazione elettromagnetica per una particella carica classica in moto circolare uniforme, come descritto da Maxwell ed Hertz.

Nota 1.3

Dei tre Principi enunciati da Bohr solo il terzo, il principio di corrispondenza, è un elemento della formulazione attuale della Meccanica Quantistica. Il suo ruolo è quello di determinare il valore dei parametri della teoria.

I *principi* di Bohr considerano valida la cinematica classica e una parte della dinamica ma sostituiscono una parte della dinamica (teoria dell'assorbimento ed emissione di onde elettromagnetiche) con un meccanismo ad hoc che provoca il passaggio da uno stato all'altro.

Al contrario, la formulazione attuale della Meccanica Quantistica, come vedremo, introduce una cinematica del tutto diversa, ed una descrizione di quantità osservabili sostanzialmente differente da quanto avviene in Meccanica Classica. D'altra parte, *la struttura della dinamica rimane invariata*.



Un ulteriore supporto al modello di Rutherford e ai principi di Bohr venne dalla determinazione del numero di elettroni nell'atomo e della carica del nucleo.

Franck e Hertz fecero misure di ionizzazione di un gas di atomi, ed i loro risultati furono in buon accordo con le previsioni del modello di Rutherford e Bohr, anche se l'accordo risultò meno soddisfacente per numeri atomici grandi.

D'altra parte, le previsioni teoriche erano meno accurate per numeri atomici grandi, poiché esse erano basate sull'ipotesi che le sole orbite che dovessero essere considerate fossero orbite circolari, con momento angolare multiplo di \hbar , e nel caso di atomi più complessi la teoria classica non porta ad orbite circolari, se non in qualche approssimazione. La seconda linea di sviluppo della Meccanica Quantistica prende spunto dai fenomeni di emissione e di assorbimento della luce. La descrizione empirica di questi fenomeni porta a formulare relazioni tra le energie dei livelli atomici, intensità di radiazione e di assorbimento della luce emessa o assorbita e la sua frequenza (*relazioni di dispersione*).

Queste relazioni empiriche, che possono essere espresse in termini di matrici (poiché si riferiscono a due stati dell'atomo, quello iniziale e quello finale) possono essere confrontate con le formule che descrivono, in Meccanica ed Elettromagnetismo classici, l'intensità di radiazione per un sistema che descrive classicamente l'atomo di Rutherford.

Tale procedura permette un confronto diretto tra la descrizione teorica di uno stesso fenomeno da una parte mediante il formalismo Hamiltoniano classico e dall'altra un nuovo formalismo basato sull'algebra delle matrici. Per comprendere meglio come possa essere fatto questo confronto, consideriamo la situazione come si presentava ai Fisici Teorici nel 1917. Alcune considerazioni erano considerate significative:

A) *L'ipotesi adiabatica* [Ehr17]

Se un sistema è sottoposto a cambiamenti adiabatici reversibili, i moti permessi si trasformano in moto permessi.

Quest'ipotesi sottolinea l'importanza nella dinamica della presenza di *invarianti adiabatici*; ad esempio per qualunque moto periodico, è un invariante adiabatico il rapporto $2\bar{T}/\nu$ dove ν è la frequenza del moto e \bar{T} è il valor medio su un periodo dell'energia cinetica. Nel caso di un moto armonico per un sistema con un grado di libertà si ha $\frac{2\bar{T}}{\nu} = E$.

Ehrenfest connette l'ipotesi adiabatica con le espressioni introdotte da Planck, Bohr e Sommerfeld; in particolare che un oscillatore armonico (che veniva considerato *il tramite dell'interazione della materia con un campo elettromagnetico*) con frequenza ν_0 può avere solamente energia $Nh\nu_0$, $N \in \mathbb{Z}^+$.

Segue dall'ipotesi adiabatica che anche per un oscillatore armonico (tutti i moti sono periodici) deve valere

$$\frac{2\bar{T}}{\nu} = \iint dq dp = nh, \quad n \in \mathbb{Z}^+$$

Analoghe considerazione valgono per un rotatore rigido e un dipolo in campo magnetico. In generale il rapporto energia/frequenza per un moto periodico deve essere un invariante adiabatico. Dunque per i moti (periodici)

realizzabili in un atomo deve essere

$$E = \nu \iint \sum_k dq_k \wedge dp_k \quad 1.12$$

e l'integrale deve assumere valori interi, perché questo avviene per un sistema di oscillatori armonici.

Si assume che possa essere riguardata come una successione di trasformazioni adiabatiche la trasformazione simplettica che permette di utilizzare per un sistema completamente integrabile (come l'atomo di idrogeno classico) le variabili azione-angolo (e che quindi rende il sistema formalmente equivalente ad un insieme di oscillatori armonici).

B) *I postulati di Niels Bohr* [Boh17]

- 1) Gli stati stazionari sono una collezione numerabile.
- 2) La frequenza della radiazione emessa (o assorbita) quando un atomo passa da uno stato stazionario ad un altro è data dalla relazione $\nu = |E_n - E_m|$, dove E_n è l'energia dello stato n .

Dal punto B) utilizzando i risultati delle esperienze di Balmer, Rydberg e Ritz si deduce che per ogni atomo deve esistere una funzione positiva f_τ con le proprietà

$$\nu_{n,m} = |f_\tau(n) - f_\tau(m)|, \quad E_\tau(n) = -f_\tau(n) \quad 1.13$$

Dunque gli stati degli atomi possono essere catalogati mediante due parametri, uno (n) che assume valori interi, e l'altro (τ) che assume un insieme numerabile di valori a priori arbitrario.

Per l'atomo di idrogeno il parametro τ è assente. Questo è coerente con il fatto che in Meccanica Classica per il sistema Newtoniano a due corpi l'energia dipende da una sola delle variabili d'azione. La presenza del parametro τ riflette la maggiore complessità degli altri sistemi classici e la conseguente maggior complessità delle regole di quantizzazione.

C) *Il Principio di Corrispondenza*

La nuova Meccanica deve dare le stesse previsioni della meccanica classica quando ν è piccolo (legge di Wien) e quindi anche quando la frequenza della radiazione emessa o assorbita è piccola, dunque la quantità $\frac{n-m}{n}$ è piccola (in particolare quando n è un numero molto grande e $n - m$ è piccolo).

D) *Principio di Trasformabilità meccanica*

Le leggi della Meccanica Classica devono valere per gli invarianti adiabatici.

Nota 1.4

Si può notare che il punto D) coincide sostanzialmente con l'ipotesi adiabatica di Ehrenfest; il punto C) è necessario per poter fare previsioni sulla forma della funzione f_τ la cui esistenza è postulata.



Negli anni immediatamente successivi al 1917 le ricerche volte a determinare la struttura della nuova teoria ruotarono attorno all'ipotesi che nell'interazione con il campo elettromagnetico gli atomi agissero *come se* fossero degli oscillatori armonici (virtuali) le cui frequenze corrispondono uno-a-uno con le frequenze di emissione e assorbimento.

Questa descrizione in termini di *oscillatori virtuali* fu suggerita da R. Ladenburg [Lad21] e ripresa da N. Bohr, H. Kramers e J. Slater [BKS24]. J. Slater parla esplicitamente *virtual field of radiation* [Sla24] ma il campo elettromagnetico non viene considerato come composto da fotoni; l'interazione con il campo elettromagnetico viene ancora vista *come mediata da oscillatori virtuali*. Le ricerche quindi si concentrarono soprattutto sulla determinazione di formule empiriche sempre più raffinate (eventualmente con un maggior numero di parametri) che riproducessero le frequenze degli oscillatori virtuali.

Un secondo filone di ricerca, sempre nella direzione dell'emissione o assorbimento di radiazione elettromagnetica da atomi, fu l'analisi di *relazioni di dispersione*, cioè di relazioni tra lunghezza d'onda della luce emessa (o assorbita) e l'intensità del fenomeno di emissione (o assorbimento). Questo filone si rivelò fondamentale per la costruzione della nuova teoria; il motivo è che in questo modo venivano scritte delle relazioni che avevano una controparte classica, e il confronto poteva suggerire importanti analogie.

La più semplice *relazione di dispersione* che si ottiene nell'ambito della Meccanica ed Elettromagnetismo Classici è la seguente.

Consideriamo un oscillatore armonico dotato di carica elettrica in interazione con un campo elettromagnetico variabile nel tempo, che per semplicità assumiamo essere monocromatico.

Facciamo l'ipotesi che l'interazione possa essere schematizzata come la somma di una forza conservativa proporzionale all'intensità del campo elettromagnetico (che supporremo indipendente dalla posizione, almeno nella regione in cui ha luogo il moto dell'oscillatore) e di un termine dissipativo, proporzionale alla velocità, che tenga conto della perdita di energia per irraggiamento.

L'equazione per l'oscillatore armonico considerato (che si può identificare con il momento di dipolo di un atomo) è allora

$$\frac{d^2 P}{dt^2} + \gamma \frac{dP}{dt} + (2\pi\nu_0)^2 P = \frac{e^2}{m} E(t), \quad E(t) = E_0 e^{2\pi i \nu t} \quad 1.14$$

dove ν_0 è la frequenza propria dell'oscillatore, ν è la frequenza del campo

elettromagnetico e γ è la costante di dissipazione. Una soluzione di (1.14) è

$$P(t) = \alpha E(t), \quad \alpha = \frac{e^2}{m} [4\pi^2\nu_0^2 - 4\pi^2\nu^2 + 2\pi i\nu\gamma]^{-1} \quad 1.15$$

nell'ipotesi $\nu \neq \nu_0$ (assenza di risonanza).

Ricordiamo ora che l'atomo veniva considerato *equivalente* a una collezione di oscillatori armonici (postulato di Ehrenfest); pertanto (1.15) va confrontata con la legge che descrive la variazione nel tempo del momento di dipolo di un atomo in un campo elettromagnetico esterno omogeneo e con una dipendenza monocromatica dal tempo.

Esperimenti per determinare la dipendenza dal tempo del dipolo (corrispondente, in teoria classica, all'emissione di onde elettromagnetiche) portarono alla seguente formula *empirica* per la sua intensità [Kra24]

$$P = E \frac{e^2}{4\pi^2 m} \sum_k f_k [\nu^2 - \nu_k^2]^{-1} - E \frac{e^2}{4\pi^2 m} \sum_j g_j [\nu^2 - \nu_j^2]^{-1} \quad 1.16$$

dove ν_k sono le frequenze di assorbimento, ν_j le frequenze di emissione (spontanea o indotta) ed i coefficienti f_k e g_j rappresentano la probabilità che la radiazione venga assorbita o emessa.

Il confronto della (1.16) con la (1.14) suggerisce che il coefficiente di dissipazione γ sia trascurabile; la sua presenza sta ad indicare che le frequenze caratteristiche del sistema possono essere definite solo approssimativamente.

La formula (1.16) va completata dall'indicazione di Einstein, secondo la quale le frequenze devono avere la forma

$$\nu_{k,n} = \frac{1}{h} [E(k) - E(n)] \quad 1.17$$

dove $E(k)$ è l'energia del k -mo stato. Si può dunque immaginare che l'atomo sia descrivibile mediante una collezione di oscillatori armonici, e le transizioni tra livelli diversi siano da attribuirsi all'interazione tra questi oscillatori virtuali ed il campo elettromagnetico.

1.2 NASCITA DELLA MECCANICA QUANTISTICA: L'ANALISI DI DE BROGLIE

Una prima ipotesi su come dovesse essere modificata la Meccanica Classica per tener conto dei nuovi risultati sperimentali fu formulata da L. de Broglie. Questa formulazione fu poi ripresa (e modificata in una sua parte concettualmente essenziale) da Schrödinger nel 1926, culminando nell'equazione che porta il suo nome.

La linea di ricerca di de Broglie, iniziata grosso modo nel 1923, era volta a riconciliare due aspetti della fenomenologia: la natura ondulatoria e la natura

corpuscolare della radiazione e a metterli in relazione con la natura quantica dei livelli di energia dell'atomo. Questa ricerca è contenuta nella sua tesi e in vari articoli [deB23, deB25, deB27]

Abbiamo visto che alcuni aspetti dell'interazione della luce con la materia si possono interpretare assumendo che la luce sia composta da fotoni che hanno una natura particellare. Il fenomeno della diffrazione per raggi X era stato messo in luce da von Laue nel 1914 [Lau14]; de Broglie fece l'ipotesi che questa doppia natura (ondulatoria e particellare) fosse comune anche per gli elettroni e fosse possibile fare esperimenti di diffrazione degli elettroni da una sostanza cristallina che avesse un passo reticolare opportuno. Sulla base dell'analogia con le proprietà dei fotoni de Broglie fece l'ipotesi che a ciascun elettrone di quantità di moto p fosse associata un'onda monocromatica di frequenza $\nu = |p|/h$ (in unità in cui la velocità della luce è posta essere uno).

Pochi anni dopo (1928) esperimenti di diffrazione di elettroni da un cristallo furono compiuti da Thomson e indipendentemente da Davisson e Germer e confermarono pienamente l'ipotesi di de Broglie. Molto più tardi, negli anni Quaranta, fu possibile misurare la diffrazione di neutroni, e questa relazione tra quantità di moto e frequenza dell'onda associata venne confermata. La difficoltà di realizzare esperimenti di diffrazione con neutroni è dovuta al fatto che la loro massa è molto maggiore di quella di un elettrone e quindi la loro velocità deve essere molto bassa affinché la lunghezza d'onda sia confrontabile alla spaziatura cristallina del materiale diffrangente. Lo sviluppo della tecnologia dei neutroni lenti (neutroni termici) fu dovuta a Fermi e avvenne nell'ambito della costruzione della pila atomica.

De Broglie notò che la determinazione delle orbite stabili degli elettroni nell'atomo faceva riferimento a numeri interi come accade all'interferenza delle oscillazioni proprie. De Broglie propose che le regole di quantizzazione fossero dovute alla condizione che l'elettrone rimanesse in fase con la sua onda nel corso del moto. Per un elettrone non legato ad un atomo de Broglie propose che la traiettoria seguisse la superficie di eguale fase dell'onda associata.

Questa proposta costituisce un radicale cambiamento delle regole della dinamica, abbandonando la tradizionale visione Newtoniana del moto retto da forza in favore di una dinamica in cui il moto della particella (de Broglie usa la notazione *frammento di energia*) viene descritto da un campo vettoriale (quindi da un'equazione differenziale del prim'ordine nel tempo). Il campo vettoriale a sua volta è determinato dall'onda associata alla particella. Chiameremo quest'onda, come successivamente fatto da de Broglie, *onda pilota* e ci riferiremo allo schema di de Broglie come *teoria dell'onda pilota*.

Come notato da de Broglie la nuova teoria sta alla teoria classica come l'ottica ondulatoria sta all'ottica geometrica: in qualche limite (ad alte energie) le due teorie portano agli stessi risultati, ma nella nuova teoria la forza è *un concetto derivato* identificato (modulo una costante moltiplicativa, la massa) con la

derivata temporale della velocità (per traiettorie sufficientemente regolari). Le figure di interferenza nello scattering di elettroni da un cristallo vengono viste come fenomeni di interferenza delle onde pilota con le onde pilota delle particelle del mezzo diffrangente. Queste interferenze sono responsabili del fatto che il campo pilota diventa irregolare e le traiettorie della particelle diventano irregolari (wiggling); questa irregolarità origina le figure di diffrazione.

Per de Broglie l'idea fondamentale della teoria quantistica è l'impossibilità di considerare separatamente il *frammento di energia* e l'onda che gli è associata. Come nel caso dei fotoni, a un frammento di energia E di massa propria m_0 è associata un'onda di frequenza ν data dalla relazione $h\nu = m_0c^2$ (che riprenda la relazione tra l'energia di un fotone e la sua frequenza).

Una linea guida nell'analisi di de Broglie è il tentativo di unificare la meccanica classica e la nuova teoria dei quanti attraverso i fondamentali principi variazionali dell'ottica (principio di Fermat) e della meccanica (principio della minima azione di Maupertius-Hamilton). Il principio di Fermat per un'onda sinusoidale può essere scritto $\delta \int_Q^P d\phi = 0$ dove $\phi(x, t)$ è la fase dell'onda. Nella descrizione della luce come sciami di fotoni si ha

$$d\phi = 2\pi \frac{\nu}{c} dt - \frac{\nu}{\nu_{\text{photon}}} dl$$

dove ν è la frequenza della radiazione elettromagnetica, $h\nu_{\text{photon}}$ è l'energia del fotone (secondo la teoria dei quanti di luce) e dl è l'elemento differenziale nella direzione del moto del fotone; de Broglie propose che l'onda associata a una particella soddisfacesse $d\phi = 2\pi\omega_\mu dx^\mu$ dove per una particella libera di quantità di moto p si ha $p_i = h\omega^i$. Questo porta ad una completa analogia dei due principi variazionali.

È facile verificare che con questa posizione la velocità del punto materiale sarebbe superiore a quella della luce. Lo stesso accade nella formulazione di Hamilton del moto come flusso di varietà lagrangiane. Anche qui la velocità del punto rappresentativo è perpendicolare alla superficie di costante valore della varietà lagrangiana associata ma la velocità del punto è inversamente proporzionale alla velocità locale della varietà ed è uguale alla velocità di gruppo opportunamente definita. In modo analogo de Broglie affermò che si doveva confrontare la velocità della particella con la velocità di gruppo dell'onda associata. In questo modo a un punto materiale viene associata un'onda *estesa nello spazio* e l'onda *non è portatrice di energia*.

Lo stesso de Broglie (e più tardi D. Bohm) notò che è possibile introdurre artificialmente il punto di vista newtoniano di forze, proporzionali all'accelerazione e quindi alle variazioni nello spazio e nel tempo del campo vettoriale che determina il moto. Poiché il campo vettoriale varia anche nel tempo e poiché la particella si muove, questo procedimento produce una forza *apparente* di natura potenziale (potenziale quantistico). Questa forza fittizia è in questo ambito

responsabile della irregolarità delle traiettorie e quindi delle possibili figure di interferenza.

Più tardi de Broglie estese la sua teoria a sistemi di N particelle associando al sistema un'onda pilota (non necessariamente il prodotto delle singole onde a causa delle interferenze, che avvengono nello spazio delle configurazioni). Se la funzione (d'onda) associata è scritta in termini di modulo e fase (reali) come $\phi(t, X) \equiv |\phi(t, X)|e^{\frac{i}{\hbar}S(t, X)}$, il campo vettoriale pilota è $\nabla_k S$ e quindi l'equazione per i punti materiali è

$$m_k \frac{dx_k}{dt} = \nabla_k S \quad S = \hbar \Im \log \phi \quad 1.18$$

Per completare le leggi della dinamica è necessario dare l'equazione per l'onda $\phi(t, X)$. Indicazioni preliminari per l'individuazione di questa equazione erano già state date da de Broglie che aveva notato che in presenza di un potenziale elettrostatico Φ la fase di un elettrone di carica e e velocità v ha frequenza $\nu = (mc^2 + V)/mv$ e velocità di fase $v_{fase} = (mc^2 + V)/mv$ dove $V = e\Phi$ ed $m = m_0/\sqrt{1 - v^2/c^2}$.

Fu Schrödinger che riuscì a scrivere un'equazione soddisfacente. Egli iniziò con lo studiare gli stati stazionari, utilizzando prima l'equazione di Klein-Gordon (relativistica) e poi, poiché i risultati non erano in accordo con i dati sperimentali, la versione non-relativistica della stessa equazione pervenendo all'equazione (per gli stati stazionari di energia E)

$$H\phi \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\phi(x) + V\phi(x) = E\phi(x) \quad 1.19$$

Per un'ulteriore analisi dell'opera di de Broglie si può consultare [BV09].

1.3 NASCITA DELLA MECCANICA QUANTISTICA: L'ANALISI DI SCHRÖDINGER

Ricordiamo che una formulazione della Meccanica Classica in termini di fronti d'onda era stata fatta da Hamilton e più compiutamente da Jacobi, culminando nell'equazione di Hamilton-Jacobi (un'equazione alle derivate parziali) che descrive la dinamica classica come propagazione di fronti d'onda (varietà lagrangiane). Confrontando questa formulazione con quella data da Hamilton come moto di punti materiali nello spazio delle fasi, la velocità del punto materiale risulta in ogni punto del fronte d'onda perpendicolare al fronte d'onda stesso.

In questo contesto una difficoltà nel proseguire quest'analogia con la Meccanica Classica (e quindi nell'individuare gli elementi della Nuova Meccanica) che si presentava consisteva nel fatto che i punti di massimo dell'onda si propagano con velocità superiore a quella della luce, e comunque non con la velocità della particella quantistica.

Come abbiamo visto precedentemente, de Broglie superò questa difficoltà notando che la velocità di propagazione dei massimi si può identificare con *una velocità di fase*, e quindi non è associata a una quantità misurabile. Un calcolo della velocità di gruppo, cioè la velocità di propagazione del baricentro di un pacchetto sufficientemente ben localizzato (ad esempio che avesse la dimensione di un atomo) dimostrò che la velocità di gruppo, che è misurabile, è grosso modo uguale alla velocità di un punto materiale classico che abbia massa uguale a quella dell'elettrone e abbia quantità di moto uguale alla frequenza (in unità di misura in cui la velocità della luce è posta uguale ad uno).

L'idea che gli elettroni siano *associati ad un'onda* porta anche in modo naturale a riconoscere che per un elettrone confinato a rimanere in una regione limitata Ω dello spazio (ad esempio all'interno dell'atomo) le frequenze dell'onda sono quantizzate. Infatti la funzione che rappresenta l'onda deve soddisfare al tempo stesso un'equazione alle derivate parziali (tipica proprietà delle onde) e delle *condizioni al bordo di Ω* e quindi il suo spettro di energia è un insieme numerabile.

L'interpretazione di de Broglie rende anche ragione, almeno in parte, dell'osservazione di Bohr sulla quantizzazione del momento angolare in condizioni elementari (elettroni in una regione a simmetria sferica).

Schrödinger riprese il punto di vista di de Broglie. Tuttavia, pur affermando che queste onde contengono tutta l'informazione ottenibile sul sistema, Schrödinger non interpretò le onde introdotte da de Broglie per descrivere gli elettroni come onde guida di un insieme di punti materiali bensì come *descrizione* della particella quantistica. Secondo quest'interpretazione le particelle sono individuate da funzioni a valori complessi, che possono interferire nel senso che uno stato può essere rappresentato da una combinazione lineare (a coefficienti complessi) di funzioni che rappresentano due stati diversi tra loro (e dallo stato risultante). Questo *principio di intralacciamento* è responsabile dei fenomeni di interferenza. Il fenomeno è matematicamente analogo all'interferenza di onde elettromagnetiche ma qui le onde non trasportano energia (ma solo probabilità come chiariremo in seguito).

Notiamo che in Elettromagnetismo le quantità osservabili (energia, impulso, vettore di Poynting, ...) sono reali, essendo funzioni sesquilineari del potenziale elettromagnetico; questo induce a pensare che una situazione analoga si verifichi anche nel caso delle onde che rappresentano le particelle. Rimaneva il problema di quale fosse l'equazione adatta a descrivere la propagazione dell'onda e i suoi stati stazionari.

L'analogia con la formulazione della dinamica hamiltoniana classica in termini di soluzioni dell'equazione di Hamilton-Jacobi e l'analogia introdotta da de Broglie tra impulso di un punto materiale e frequenza di un'onda monocromatica portarono Schrödinger a postulare che l'onda monocromatica $u(t, x)$ soddisfacesse l'equazione di Klein-Gordon, la più semplice equazione relativistica conosciuta

per particelle di massa diversa da zero in presenza di un campo elettromagnetico. Questa equazione, tenuto conto della descrizione data da de Broglie della quantità di moto come operatore differenziale, risulta essere

$$\frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} - eA_0 \right)^2 u = \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} A \right)^2 u + m^2 c^2 u \quad 1.20$$

dove A_0 è il potenziale elettrico e A è il potenziale magnetico. L'approssimazione non relativistica di questa equazione, nel caso di uno stato stazionario di energia E (descritto quindi da una funzione della forma $u(t, x) = e^{-i(E+mc^2)t/\hbar} \phi(x)$, con $E \ll mc^2$) è

$$E\phi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\phi(x) + V(x)\phi(x) \quad 1.21$$

dove $V = eA_0$. Ricordiamo che per un punto materiale di massa m in un campo di potenziale $V(q)$ l'energia è data da

$$E = \frac{1}{2m} |p|^2 + V(q)$$

La (1.21) dà risultati in ottimo accordo con il dato sperimentale (e con il modello di Bohr) per l'atomo di idrogeno. L'accordo era meno buono per numeri quantici più grandi, dove ci si poteva aspettare che vi fossero interazioni tra gli elettroni e quindi una dinamica più complicata ed una modificazione degli stati di energia possibili.

Si può notare a questo proposito che fin dagli anni '20 era noto che le dimensioni degli atomi non variano in modo sensibile (né in modo monotono) al crescere dal numero atomico N , così che al crescere di N *gli elettroni si addensano*. È noto adesso che l'equazione (1.21) opportunamente generalizzata per atomi a più elettroni (questa generalizzazione fu considerata anche da de Broglie) dà risultati in ottimo accordo con il dato sperimentale nei casi e nell'approssimazione in cui si riesce a risolverla.

Le autofunzioni del problema stazionario corrispondevano, almeno nel caso dell'atomo di idrogeno e per energie vicino alla soglia di ionizzazione (e quindi nel limite in cui era postulato il principio di corrispondenza) a elettroni che occupano regioni che sono intorno delle orbite di Bohr.

Le autofunzioni corrispondenti allo spettro positivo risultavano invece essere funzioni limitate ma non a quadrato integrabile, con un comportamento a grandi distanze simile ad onde piane. Questo fatto suggeriva che, almeno nel caso particolare analizzato, l'equazione di Schrödinger rendesse conto per energie negative dell'esistenza di stati legati (e ne determinasse le energie) e per energie positive si accordasse con la descrizione di de Broglie delle particelle come onde piane.

La possibilità di utilizzare la teoria delle funzioni e la teoria delle equazioni differenziali, che avevano avuto notevoli sviluppi negli anni precedenti la nascita

della Meccanica Quantistica, rendono l'approccio di Schrödinger (il *formalismo di Schrödinger*) molto efficace nella soluzione di problemi che hanno un corrispondente classico in cui la hamiltoniana è al più quadratica nelle quantità di moto.

Sulla base di questo successo Schrödinger postulò che la dinamica delle particelle fosse descritta da un'equazione di propagazione per l'onda associata che fosse almeno formalmente il limite non relativistico dell'equazione di Klein-Gordon. Utilizzando la relazione tra impulso e operatori differenziale postulata da de Broglie postulò quindi la seguente equazione di evoluzione

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(t, x) + V(x) \psi(t, x) \quad 1.22$$

L'equazione di Schrödinger (1.22) e la sua estensione naturale al caso di sistemi di più particelle è alla base della Meccanica Quantistica così come è stata formulata da Schrödinger (Meccanica Ondulatoria). Essa permette, almeno in linea di principio, di descrivere completamente un sistema quantistico ad un tempo qualunque purché si conosca il suo stato iniziale e siano soddisfatte le condizioni (matematiche) per l'esistenza e unicità delle soluzioni di (1.22).

1.4 NASCITA DELLA MECCANICA QUANTISTICA: BORN, HEISENBERG, JORDAN

Una prima analisi teorica del problema della polarizzazione venne fatta da van Vleck [Vle24]. Un'analisi più approfondita venne fatta da Max Born [Bor24] con lo scopo dichiarato di *presentare il problema in forma tale che possa dare suggerimenti su come effettuare il passaggio dalla Meccanica Classica ad una nuova meccanica*.

Born nota che un sistema completamente integrabile (come il sistema coulombiano) descritto in variabili azione-angolo si presenta come una collezione di oscillatori armonici e questa descrizione sopravvive all'interazione con un campo elettromagnetico classico mediante l'uso della teoria delle perturbazioni canoniche sviluppata da Hamilton. Se gli oscillatori virtuali così ottenuti dovessero essere descritti secondo le regole di Bohr, le loro frequenze proprie dovrebbero dipendere da due numeri interi e dovrebbe soddisfare la relazione

$$\nu(n, n') = \frac{1}{h} [E(n) - E(n')]$$

dove h è la costante di Planck e $E(n)$ è l'energia dello stato n -mo. In conclusione di questo fondamentale articolo Born traccia le linee che devono guidare nella ricerca di una formulazione di una nuova Meccanica e conclude che *la Meccanica subirà un cambiamento nel senso che si passerà da equazioni differenziali a equazioni alle differenze finite*.

Questa previsione di Born non si è avverata in senso stretto, perché nella formulazione finale si è rimasti nell'ambito di equazioni differenziali, sebbene ora alle derivate parziali. Una traccia delle differenze finite appare nel fatto che gli operatori che intervengono nella formulazione attuale della Meccanica Quantistica sono generalizzazioni di matrici e hanno uno *spettro discreto*, almeno nell'ambito degli stati legati, che sono quelli cui si riferiscono le relazioni di dispersione.

D'altra parte il principio di corrispondenza afferma che, se k ed h sono molto grandi e $|k - h|/k \ll 1$ la relazione di dispersione (1.16) deve avere un analogo classico e i parametri che appaiono in (1.16) devono, in questo limite, essere determinabili per confronto con le formule classiche.

Convieni pertanto fare una breve parentesi, per ricordare come viene descritta in Meccanica Classica l'interazione di un dipolo elettrico con il campo elettromagnetico. Di questa descrizione la (1.15) è solo una prima approssimazione. Il problema che abbiamo descritto si presenta, nell'ambito della Meccanica Classica, nella forma seguente.

Un sistema completamente integrabile (come l'atomo di idrogeno) e quindi descrivibile come una collezione di oscillatori armonici, ha una hamiltoniana $H_0 = F(J_k)$ dove $\{J_k, k = 1, \dots, N\}$ sono le variabili d'azione e θ_k le corrispondenti variabili angolo. L'interazione viene descritta da una hamiltoniana H_I

$$H_I = \sum_{\tau_0 \dots \tau_N} c_{\tau_0 \dots \tau_N} e^{2i\pi(\omega_0 \tau_0 + \dots + \omega_N \tau_N)} \quad 1.23$$

con $\theta_k \equiv 2\pi\omega_k$, $\omega_0 = \nu_0 t$ e si assume che per ogni scelta dei numeri interi τ_0, \dots, τ_N risulti $\tau_0 \nu_0 + \dots + \tau_N \nu_N \neq 0$, dove $\nu_k = \frac{\partial H_0}{\partial J_k}$, $k = 1, \dots, N$, sono le frequenze imperturbate (condizione di non risonanza). I coefficienti numerici $c_{\tau_0 \dots \tau_N}$ descrivono l'interazione del sistema con un campo elettromagnetico esterno. Siccome H_I è reale, essi soddisfano la relazione $c_{-\tau_0 \dots -\tau_N} = c_{\tau_0 \dots \tau_N}^*$.

In Meccanica Classica l'interazione con un campo elettromagnetico esterno viene usualmente rappresentata dalla hamiltoniana $p \cdot E(t)$, $p \in R^N$, dove p è il momento di dipolo e $E(t)$ è il campo elettrico (che assumiamo essere debole, così da poter utilizzare metodi di teoria delle perturbazioni).

Se $\tau = (\tau_1, \dots, \tau_N)$ e p_0 denota il momento di dipolo del sistema imperturbato

$$p_0 = \sum_{\tau} A_{\tau}(J) e^{2i\pi(\omega_1 \tau_1 + \dots + \omega_N \tau_N)} \quad 1.24$$

l'interazione H_I sarà

$$H_I = p_0 \cdot E(t) = \sum_{\tau} E(t) \cdot A_{\tau}(J) e^{2i\pi(\omega_1 \tau_1 + \dots + \omega_N \tau_N)} \quad 1.25$$

dove $E(t) = E \cos 2\pi\nu_0 t$. Per determinare il momento di dipolo risultante, si cerca mediante una trasformazione canonica (così che le nuove equazioni sono

ancora in forma hamiltoniana) di scrivere $H_0 + H_I$ nella forma

$$H_0 + H_I = H_0^1 + H_I^1 \quad 1.26$$

dove H_0^1 è funzione di nuove variabili d'azione (e quindi il sistema che rappresenta è completamente integrabile) ed H_I^1 è di ordine superiore al primo in $E(t)$ (che viene assunto piccolo). La funzione H_0^1 avrà dunque la forma

$$H_0^1(J', E) = H_0(J') + E \cdot p_1(J') + E \cdot p_0(J') \quad 1.27$$

dove $J' \equiv \{J'_1, \dots, J'_N\}$ è un nuovo sistema di variabili in involuzione (le nuove variabili d'azione) e $p_{0,k}$ è la media di p_k sugli angoli. Il termine $E \cdot p_1(J') + E \cdot p_0(J')$ rappresenta l'accoppiamento effettivo del sistema (all'ordine considerato) e quindi $p_1(J') + p_0(J')$ è il *dipolo elettrico effettivo* del sistema. Si noti che la (1.27) dà una descrizione del sistema in termini di *invarianti adiabatici*. Siccome $E(t)$ è monocromatica con frequenza ν_0 la media sul tempo della funzione $H(J, \theta)$ è nulla.

La trasformazione canonica che produce la (1.27) si ottiene mediante una funzione generatrice a valori reali $S(\theta, J')$, ponendo

$$\theta'_k \equiv \frac{\partial S}{\partial J'_k}, \quad J_k \equiv \frac{\partial S}{\partial \theta_k} \quad 1.28$$

e la determinazione di S si ottiene risolvendo l'equazione di Hamilton-Jacobi all'ordine considerato in E . Il risultato per p_1 , nota S , è

$$p_1 = \sum_k \left[\frac{\partial p_0}{\partial J_k} \frac{\partial S}{\partial \omega_k} - \frac{\partial p_0}{\partial \omega_k} \frac{\partial S}{\partial J'_k} \right]. \quad 1.29$$

Utilizzando la forma esplicita (1.25) di H_1 si ottiene

$$p_1 = -E \cos 2\pi\nu_0 t \sum_k \sum_{\nu \cdot \tau > 0} \tau_k \frac{\partial}{\partial J_k} \left(\frac{2|A_\tau|^2 \nu \cdot \tau}{(\nu \cdot \tau)^2 - \nu_0^2} \right), \quad 1.30$$

dove ricordiamo che ν_k sono le frequenze fondamentali degli oscillatori (notare che all'ordine considerato si può sostituire J_k a J'_k .)

La formula (1.30) deve essere confrontata con la formula empirica (1.16) di Kramers per ottenere delle regole che possano far dedurre la *formula quantistica* e da queste dedurre la struttura della nuova meccanica.

I parametri che appaiono nelle formule quantistiche devono essere tali che si ottengano le formule classiche nel limite $\frac{|n-m|}{n} \rightarrow 0$.

Per l'ordinamento dato dalle energie degli stati atomici, la successione E_n è crescente e converge verso un limite che convenzionalmente assumiamo essere zero. Ma allora per n grande e $n - m$ di ordine di grandezza uno si ha

$$E_m = E_n - \epsilon_{n,m}$$

con $\epsilon_{m,n}$ infinitesimo rispetto a E_n . Ne segue che per n grande la variazione di energia nella transizione dallo stato m allo stato n è infinitesima rispetto all'energia dello stato iniziale, e il principio di corrispondenza dice che per l'emissione e l'assorbimento *vicino alla soglia di ionizzazione* devono valere leggi confrontabili con quelle della teoria classica.

Dal confronto di (1.16) con (1.30) Born concluse che *ogni stato stazionario è equivalente ad una collezione di oscillatori armonici (risuonatori) virtuali la cui frequenza corrisponde alla differenza di energia nella transizione considerata*.

Notare che non compaiono le armoniche superiori, perché in generale i rapporti $(E_n - E_m)/(E_k - E_h)$ non sono numeri razionali. Questo evita nel caso della Meccanica Quantistica il problema dei *piccoli denominatori* che rende difficile l'analisi perturbativa in Meccanica Classica hamiltoniana.

La *regola di corrispondenza* si ottiene con la sostituzione

$$\nu \cdot \tau \rightarrow \nu(n, m), \quad J \rightarrow nh \quad 1.31$$

La seconda regola in (1.31) è il principio di corrispondenza di Bohr. Per comprendere meglio la corrispondenza tra frequenze in (1.31) notiamo che, se si può passare adiabaticamente dallo stato n allo stato m , si possono considerare stati fittizi intermedi ponendo

$$m(\tau) = n + \mu\tau_k, \quad 0 < \mu < 1, \quad \tau_k \in Z.$$

Allora si ha

$$\nu \cdot \tau = \sum_k \frac{\partial H_0}{\partial J_k} \tau_k = \frac{1}{h} \sum_k \frac{\partial H_0}{\partial J_k} \frac{\partial J_k}{\partial \mu} = \frac{1}{h} \frac{\partial H_0}{\partial \mu}. \quad 1.32$$

Questa manipolazione, del tutto formale, è meglio giustificata se μ è molto piccolo, quindi se $n - m$ è di ordine di grandezza αh con α piccolo. D'altra parte, per la regola di Bohr-Einstein, se $m = n + \tau$ si ha

$$\nu(m, n) = \frac{1}{h} |E(n + \tau) - E(n)| \quad 1.33$$

Confrontando (1.32) con (1.33) si vede che l'operazione effettuata per passare dalla regola classica a quella quantistica consiste nel sostituire differenziali con differenze finite (quozienti incrementali rispetto alla quantità h).

Per ottenere una relazione tra i coefficienti, facciamo ancora uso del principio di corrispondenza. Analizziamo quindi il caso $\frac{\tau}{n} \ll 1$. Si ha allora per una data grandezza fisica Φ

$$\sum_k \tau_k \frac{\partial \Phi}{\partial J_k} \rightarrow \int_0^1 d\mu \sum_k \tau_k \frac{\partial \Phi}{\partial J_k}. \quad 1.34$$

Dalla regola di quantizzazione di Bohr, per $\frac{\tau}{n}$ abbastanza piccolo (quindi $\tau h/J$ abbastanza piccolo) si ha

$$\tau_k d\mu \simeq dJ_k$$

e dunque

$$\int_0^1 \sum_k \frac{\partial \Phi}{\partial J_k} \tau_k d\mu \simeq \int_0^1 \sum_k \frac{\partial \Phi}{\partial J_k} dJ_k = \frac{1}{h} (\Phi(n + \tau) - \Phi(n)) \quad 1.35$$

e questa identificazione deve, valere nel limite $\frac{\tau}{n} \rightarrow 0$, per ogni grandezza fisica. Inoltre, poiché $|A_\tau(J)|^2 = A_\tau(J)A_{-\tau}(J)$ e $A_{-\tau}(J) = A_\tau^*(J)$

$$|A_\tau(J)|^2 \equiv \Gamma(n, m) = \Gamma(m, n), \quad m = n + \tau \quad 1.36$$

Eseguendo in (1.30) le sostituzioni indicate in (1.33), (1.34) e (1.35) e utilizzando la definizione di Γ data in (1.36) si ottiene

$$p_1 = E \cos(2\pi\nu_0 t) \frac{1}{h} \sum_{\tau_k > 0} \left[\frac{2\Gamma(n + \tau, n)\nu(n + \tau, n)}{\nu(n + \tau, n)^2 - \nu_0^2} - \frac{2\Gamma(n, n - \tau)\nu(n, n - \tau)}{\nu(n, n - \tau)^2 - \nu_0^2} \right]. \quad 1.37$$

Questa espressione va confrontata con l'espressione (1.16). L'accordo è molto buono pur di porre

$$-\frac{e^2}{4\pi^2 m} f_{n,m} = \frac{1}{h} 2\Gamma(n, m)\nu(n, m), \quad \Gamma(n, m) \equiv |A_{m-n}|^2. \quad 1.38$$

Nota 1.5

Da (1.38) si vede che la conoscenza delle frequenze di assorbimento ed emissione non è sufficiente a determinare le quantità $A_{n,m}$, ma solamente il loro valore assoluto. Per determinare le fasi è necessario studiare il problema che stiamo analizzando in un'approssimazione migliore (ad esempio all'ordine due in E) o, meglio, utilizzare un problema in cui l'accoppiamento con il campo elettromagnetico risulti più complesso. ♣

Nota 1.6

Ricordiamo che le $A_\tau(J)$ sono le componenti dello sviluppo in serie delle quantità di moto p_k in funzione degli angoli θ_k . In accordo con quanto avviene nella formula di Kramers, ci aspettiamo che nella nuova formulazione della Meccanica la quantità di moto sia espressa come funzione di due indici, quindi sia rappresentata da una matrice. Quando $m_k = n_k + h\tau_k$ e τ_k è piccolo rispetto a n_k ci aspettiamo che $A_{n+h\tau_k, n}$ giochi il ruolo che giocava $A_\tau(J)$ nel caso classico, dove J è il valore della n-pla di variabili d'azione *associate* allo stato n . ♣

Il passo successivo nella costruzione della nuova Meccanica fu effettuato da Heisenberg analizzando le regole di calcolo delle quantità del tipo delle $A_{n,m}$

(cioè associate a osservabili classiche) quando si vogliono ottenere le matrici $C_{n,m}$ associate alle coordinate q_h e più in generale le matrici $B(P)_{n,m}$ associate a polinomi P nelle coordinate q_k e p_h dello spazio delle fasi classico.

Far questo è possibile (in linea di principio) analizzando ad esempio formule empiriche ottenute mediante esperimenti nei quali la hamiltoniana classica abbia la forma $x \cdot E$ (ad esempio le formule di polarizzazione in un campo elettrico uniforme o lentamente variabile nello spazio).

Analizzando in dettaglio le corrispondenti formule empiriche, ed in particolare analizzando alla luce di questa formulazione l'effetto Zeeman anomalo (descritto in teoria classica dall'equazione $\ddot{x} = -\omega^2 x - \epsilon x^4$) Heisenberg pervenne [Hei25] alla corrispondenza seguente tra il caso classico e il caso quantistico

$$\begin{aligned} \nu(n\tau) &\equiv \tau\nu(n) \equiv \tau \frac{1}{h} \frac{\partial E}{\partial n} \\ &\rightarrow \nu(n, n - \tau) = \frac{1}{h} (E(n) - E(n - \tau)) \\ \\ \nu(n, \tau_1) + \nu(n, \tau_2) &= \nu(n, \tau_1 + \tau_2) \\ &\rightarrow \nu(n, n - \tau) + \nu(n - \tau, n - \tau - \tau_1) = \nu(n, n - \tau - \tau_1) \\ \\ \Re e (a_\tau(n)) e^{it(\omega(n) \cdot \tau)} & \\ &\rightarrow A(n, n - \tau) e^{it\omega(n, n - \tau)}. \end{aligned} \tag{1.39}$$

L'ultima forma è valida per ogni osservabile classico rappresentabile nella forma

$$\sum_{\tau} a_\tau(n) e^{it(\omega(n) \cdot \tau)}.$$

Inoltre, almeno per le variabili di posizione, vale la seguente regola che connette la descrizione quantistica di q con quella di q^2 . Nel caso classico si ha

$$q^2(n, t) = \sum_{\beta} b_\beta(n) e^{it(\omega(n) \cdot \beta)} = \sum_{\beta, \alpha} a_\alpha(n) a_{\beta - \alpha}(n) e^{it[(\omega(n) \cdot \alpha) + (\omega(n) \cdot (\beta - \alpha))]} \tag{1.40}$$

mentre nel caso quantistico le corrispondenti matrici, che indichiamo con \hat{q} , \hat{q}^2 , soddisfano

$$\begin{aligned} \hat{q}_{n, n - \tau}^2 &= \sum_{\alpha} \hat{q}_{n, n - \alpha} \hat{q}_{n - \alpha, n - \tau} = B(n, n - \tau) e^{it\omega(n, n - \tau)} \\ B(n, n - \tau) &\equiv \sum_{\alpha} A(n, n - \alpha) A(n - \alpha, n - \tau). \end{aligned} \tag{1.41}$$

Si noti che quest'ultima relazione rappresenta non altro che il prodotto di matrici, esteso al caso di matrici infinite.

L'insieme di queste considerazioni portò nell'anno successivo ai due articoli di Born e Jordan [BJ25] e di Born, Jordan e Heisenberg [BJH26] nei quali, come affermano gli Autori, *viene messa in piedi una descrizione organica, invece*

di adattare le idee tradizionali in modo artificiale e forzato e viene formulata una teoria matematica coerente della Meccanica Quantistica che descrive le caratteristiche dei fenomeni quantistici e al tempo stesso presenta una notevole analogia con la Meccanica Classica.

In questi articoli si parla esplicitamente di una *geometria quantistica simbolica* che tende, per piccoli valori di h , alla *geometria visualizzabile della Meccanica Classica*.

Si parla già di *relazioni tra osservabili* e del fatto che ogni quantità osservabile può essere descritta da una *matrice infinita* (cioè da un operatore lineare in uno spazio vettoriale di dimensione infinita).

Gli Autori sottolineano anche che queste matrici (operatori) non sono dello stesso tipo di quelle che negli stessi anni venivano studiate da Hilbert¹; gli operatori che venivano allora studiati da Hilbert sono quelli oggi chiamati di Hilbert-Schmidt. Verificheremo nel seguito che gli operatori associati alle coordinate posizione e quantità di moto *non possono essere di classe Hilbert-Schmidt*.

Nei due articoli citati qui sopra Born, Heisenberg e Jordan sviluppano il calcolo delle matrici, impostano la teoria della perturbazioni in Meccanica Quantistica in stretta analogia con la corrispondente teoria delle perturbazioni canoniche in Meccanica Classica e la analizzano in dettaglio fino al second'ordine.

L'esempio che viene trattato in maggior dettaglio è quello dell'oscillatore anarmonico, con un termine anarmonico di ordine quattro. I risultati sono in ottimo accordo con il dato sperimentale. È curioso osservare che, come vedremo in seguito, in questo caso lo sviluppo perturbativo non converge; lo sviluppo è tuttavia asintotico, e per perturbazioni piccole lo sviluppo al second'ordine fornisce un risultato soddisfacente.

I contenuti importanti di questi articoli, modulo dettagli matematici, consentono già completamente di definire la formulazione attuale della Meccanica Quantistica nella sua versione algebrico-assiomatrica. Tra gli altri, si possono mettere in evidenza

- l'utilizzazione di metodi di *differenziazione simbolica* che, nel linguaggio attuale, consente di sostituire il campo vettoriale (e quindi le equazioni del moto) con una espressione algebrica associata al commutatore tra due matrici (e quindi in un certo modo con differenze finite). In questo ambito giocano un ruolo particolare le matrici \hat{q}_k e \hat{p}_k associate alle coordinate dello spazio della fasi classico.

- la scrittura delle equazioni della Meccanica Quantistica nella forma

$$\frac{d\hat{q}_k}{dt} = i[H, \hat{q}_k] \quad \frac{d\hat{p}_k}{dt} = i[\hat{H}, \hat{p}_k] \quad 1.42$$

dove la matrice \hat{H} descrive le interazioni all'interno del sistema e le matrici \hat{q}_k e \hat{p}_k rappresentano le coordinate e gli impulsi.

¹Sia gli Autori che Hilbert lavoravano in quell'anno a Göttingen.

- la dimostrazione che le equazioni (matriciali) (1.42) rendono estrema (o comunque, stazionaria) l'espressione

$$\int (\hat{p}, \hat{q}) - \hat{H}(\hat{q}, \hat{p})$$

$$\hat{q} \equiv \{\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_N\}, \quad \hat{p} \equiv \{\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_N\}, \quad 1.43$$

- L'affermazione che la controparte quantistica dell'identità

$$1 = 2\pi \sum_{\tau} (\tau, \nabla_{\tau}(q_{\tau}^k p_{\tau}^h)) \quad 1.44$$

è l'identità (nel senso di prodotto delle corrispondenti matrici)

$$[\hat{p}_k, \hat{q}_h] = \frac{h}{2i\pi} \delta_{k,h}. \quad 1.45$$

Va peraltro notato che la relazione

$$[\hat{p}_k, \hat{p}_h] = [\hat{q}_k, \hat{q}_h] = 0, \quad k \neq h \quad 1.46$$

viene postulata da Born, Heisenberg e Jordan ma senza argomentazioni veramente convincenti. Da questa analisi si deduce che nella nuova Meccanica giocano un ruolo fondamentale delle matrici (infinite) \hat{q}_k, \hat{p}_h che soddisfano, almeno formalmente, le relazioni (1.45) e (1.46). Lo spazio vettoriale in cui agiscono queste matrici è costituito da successioni di numeri complessi $\phi \equiv \{c_n, n \in Z\}$; il contesto in cui viene formulata la teoria porta ad affermare che $|c_k|^2$ sia la probabilità che il sistema si trovi nel k -mo stato atomico. Ne segue che deve essere $\sum_k |c_k|^2 = 1$.

Se lo spazio viene dotato del prodotto scalare

$$(\phi^1, \phi^2) \equiv \sum_k (c_k^1)^* c_k^2,$$

le matrici \hat{q}_k e \hat{p}_h risultano hermitiane.

1.5 SVILUPPI SUCCESSIVI

Subito dopo la formulazione della Meccanica Ondulatoria di Schrödinger e la formulazione della Meccanica delle Matrici di Born, Heisenberg e Jordan, l'equivalenza delle due teorie fu notata da Schrödinger [Sch26], Eckart [Eck26], Pauli (lettera a Jordan, maggio 1926), Dirac [Dir26(2)].

È facile verificare infatti che le relazioni di commutazione del formalismo di Heisenberg sono soddisfatte (almeno formalmente) da operatori che agiscono su uno spazio di funzioni come segue

$$\hat{q}_k \psi(x) = x_k \psi(x) \quad \hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_k} \quad 1.47$$

Notare che l'operatore $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$ è hermitiano e ha la quantità di moto come autovalore (generalizzato).

Da questo punto di vista le relazioni di indeterminazione dedotte da Heisenberg attraverso *esperimenti virtuali* sono una conseguenza delle proprietà della trasformazione di Fourier. Le teorie vennero successivamente formulate in modo matematicamente rigoroso da J. von Neumann [Neu27] con successivi importanti contributi di A. Weyl. Essi dimostrarono che sotto opportune ipotesi tutte le rappresentazioni delle relazioni di commutazione canoniche su spazi di Hilbert sono tra di loro unitariamente equivalenti.

Inoltre gli elementi fondanti della Meccanica Classica (hamiltoniana) e della Meccanica Quantistica hanno forma identica: se la hamiltoniana classica è

$$H_{class} = \frac{1}{2m} p^2 + V(q) \quad q = \{q_k\}, p = \{p_k\} \quad 1.48$$

e l'evoluzione delle osservabili è descritta da $\dot{A}_{class} = \{A_{class}, H\}$ allora in Meccanica Quantistica il generatore \hat{H} dell'evoluzione nel tempo è costruito a partire da H_{class} con le sostituzioni $q_k \rightarrow x_k$ e $p_k \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$

$$(\hat{H}\phi)(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(x) + V(x)\phi(x) \quad 1.49$$

e l'equazione di evoluzione risulta precisamente essere l'equazione di Schrödinger. Infatti l'evoluzione è ottenuta sostituendo le parentesi di Poisson con la moltiplicazione per i del commutatore degli operatori. Queste due operazioni sono isomorfe dal punto di vista algebrico se lo spazio di Hilbert è complesso.

Notiamo che nell'anno successivo Dirac, che era venuto a conoscenza delle idee sviluppate da Born, Heisenberg e Jordan ma non ne conosceva probabilmente i dettagli, sviluppa la *Quantum Algebra* [Dir26]. In questo lavoro Dirac introduce esplicitamente i termini *Quantum Algebra*, *Quantum Differentiation*, *Quantum Poisson Brackets* e nota esplicitamente che la corrispondenza tra la Meccanica Classica (hamiltoniana) e la Meccanica Quantistica sta (anche) nel fatto che le strutture algebriche sottostanti (parentesi di Poisson da un lato, commutatori di matrici dall'altro) sono isomorfe.

In questo lavoro, che è rimasto una pietra miliare per lucidità e precisione di linguaggio, Dirac estende le sue considerazioni al caso di infiniti gradi di libertà, ponendo così le basi per la trattazione del Campo Elettromagnetico *Quantizzato*

e i successivi sviluppi dell'Elettrodinamica Quantistica. Il lavoro di Dirac si basa su una scelta di una base per le soluzioni dell'equazione di Maxwell, ed estende il calcolo quantistico di Born, Heisenberg e Jordan introducendo un calcolo formale che utilizza le *funzioni* $\delta(x - y)$ e la base generalizzata delle soluzioni monocromatiche (onde piane).

Il fatto che il numero di gradi di libertà sia adesso infinito genera alcune difficoltà formali (energia infinita di punto zero) peraltro facilmente superabili nella teoria del campo elettromagnetico quantizzato libero; se si introduce un'interazione, le difficoltà diventano maggiori e in generale con questo schema si ottiene solamente uno sviluppo in serie (nella costante di accoppiamento) di cui non si riesce a controllare la convergenza.

Va notato che Jordan [Jor25] ha per primo cercato di generalizzare la nuova Meccanica Quantistica al caso di sistemi a un numero infinito di gradi di libertà, ma la notazione che utilizzava era farraginoso (descriveva insiemi infiniti di matrici infinite) ed in un primo momento non era stata apprezzata nemmeno dai suoi collaboratori. Il formalismo di Dirac era molto più chiaro ed è rimasto come base per l'Elettrodinamica Quantistica.

Mentre il formalismo di Dirac si appoggia sulla teoria algebrica delle relazioni di commutazione canonica tra gli operatori associati alle variabili classiche di posizione e quelli associati alle variabili classiche di quantità di moto, il tentativo di Jordan era di *quantizzare le funzioni* ed era più vicino alla quantizzazione delle soluzioni dell'equazione delle onde che è stata poi introdotta da I. Segal e da K. Friedrichs e alla quale accenneremo brevemente nel cap. 7.

Per quanto riguarda la quantizzazione del campo elettromagnetico conviene notare che si parla in generale di *seconda quantizzazione* perché, nella formulazione di Dirac, a ciascuno stato della particella, definito da un elemento $\phi \in L^2(R^3)$ viene associata uno spazio vettoriale di dimensione infinita, i cui elementi rappresentano stati corrispondenti ad un numero sempre crescente di particelle tutte nello stato ϕ . Quindi questo formalismo è adeguato a trattare sistemi in cui il numero di particelle non è conservato.

Ad una configurazione del campo elettromagnetico *classico* corrisponde uno stato quantistico sovrapposizione (con fasi relative ben definite) di stati con un numero diverso di *particelle del campo elettromagnetico* (fotoni).

La quantizzazione del campo elettromagnetico libero fornisce un'espressione per l'energia che contiene un termine lineare nella frequenza che dà origine ad *un'energia di punto zero*. In quegli anni Born e Jordan sostennero, contro l'opinione di Einstein, che quel termine originava dal campo elettromagnetico e non dall'aspetto *particellare* del fotone.

Un contributo notevole all'accettazione della nuova Meccanica Quantistica da parte di gran parte della comunità dei fisici teorici fu l'analisi *quantistica* (in termini di algebre di matrici) compiuta da W. Pauli [Pau26] dello spettro dell'atomo di idrogeno.

Quest'analisi venne fatta da Pauli sulla falsariga della corrispondente analisi in Meccanica Classica, utilizzando solo le proprietà dell'algebra di Lie indotta dalle relazioni di commutazione tra le matrici (operatori) che corrispondono in Meccanica Quantistica ai generatori del gruppo di rotazione, al vettore di Runge-Lenz e alla hamiltoniana del sistema. Questo ha successo in virtù dell'isomorfismo strutturale tra i commutatori e le parentesi di Poisson.

Il lavoro di Pauli dimostrava che la nuova Meccanica poteva essere utilizzata per previsioni quantitative, almeno per sistemi semplici. Inoltre l'analisi di Born mostrava che anche nella nuova Meccanica era disponibile una teoria delle perturbazioni analoga alla teoria della perturbazioni canonica nel formalismo di Hamilton.

Fu anche subito chiaro che la teoria delle perturbazioni così costruita non presentava alcuni dei problemi che rendevano complessa la sua utilizzazione nel caso classico. In particolare il problema, messo in luce da H. Poincaré, dei *piccoli denominatori* che rende divergente per quasi tutti i dati iniziali la serie formale data dalla teoria classica delle perturbazioni. Infatti le frequenze *quantistiche*, come descritte da Bohr, erano tali da non comprendere armoniche. La teoria perturbativa di Born, Heisenberg, Jordan, Pauli e Dirac è tuttora alla base delle formule che vengono utilizzate nei lavori di Meccanica Quantistica.

Un passo molto importante nella formulazione di Schrödinger della nuova meccanica fu l'osservazione, fatta da Schrödinger e poi ripresa da Born, che tutte le soluzioni relative agli stati legati erano a quadrato sommabile, mentre in meccanica classica interviene l'integrabilità delle distribuzione (reale) di carica, di massa, etc. . Questo rende plausibile che per una funzione d'onda $\psi(x)$ sia la quantità $\bar{\psi}(x) \cdot \psi(x) = |\psi(x)|^2$ ad avere un ruolo analogo alle densità.

Poiché la funzione d'onda rappresenta una particella e non un fluido, la quantità $|\psi(x)|^2$ non può essere associata alla densità di un fluido. Conseguentemente Max Born postulò che la funzione reale positiva $|\psi(x)|^2$ rappresenti la *densità di probabilità* che facendo una misura di posizione si trovi la particella nel punto di coordinate $x \in R^3$ (nel senso che $\int_{\Omega} |\psi(x)|^2 dx$ dà la probabilità di trovare la particella nella regione Ω dello spazio).

Conseguentemente l'integrale

$$\int_{R^3} F(x) |\psi(x)|^2 dx \quad 1.50$$

dà il valor medio dei risultati della misure di un'osservabile F che dipende solo dalla coordinata di posizione, effettuate su una particella in uno stato descritto dalla funzione d'onda $\psi(x)$.

Analogamente, detta $\hat{\phi}$ la trasformata di Fourier di ψ , la quantità $|\hat{\phi}(p)|^2$ rappresenta la densità di probabilità che misurando la quantità di moto della particella

si trovi il valore p e l'integrale

$$\int_{R^3} G(p) |\hat{\phi}(p)|^2 dp \quad 1.51$$

rappresenta il valor medio medio dei risultati della misure di un'osservabile G che dipende solo dalla quantità di moto, effettuate su una particella in uno stato descritto dalla funzione d'onda $\phi(x)$.

Questo postulato connette il formalismo matematico della Meccanica Quantistica con le operazioni di misura su un sistema fisico. Ritorniamo nel capitolo seguente sull'importanza di questo e anche sui problemi che questa corrispondenza pone.

Con questo postulato Born rimette al centro dell'interesse della ricerca in Meccanica Quantistica l'impostazione di Heisenberg della meccanica delle matrici. Infatti la struttura di spazio di Hilbert si accorda bene con le matrici infinite (operatori lineari sullo spazio di Hilbert) e anzi introduce una naturale dualità, che verrà analizzata poi in dettaglio da J. von Neumann e da A. Weyl e di cui tratteremo nei capitoli successivi.

Nel contesto degli spazi di Hilbert le relazioni (1.50) e (1.51) hanno un'ovvia generalizzazione al caso di misurazione di una qualunque quantità che possa essere associata ad un operatore, e provvede un risultato reale se l'operatore considerato è simmetrico.

Con l'introduzione degli spazi di Hilbert e degli operatori lineari non risulta più necessario riferirsi alla rappresentazione di Schrödinger anche se nelle applicazioni *risulta più naturale* descrivere le varie situazioni sperimentali associandole a proprietà *spaziali* della funzione d'onda del sistema.

Inizia qui, e si protrarrà fino ai giorni nostri, la divisione delle ricerche in Meccanica Quantistica in *ricerche sugli aspetti matematici* che si avvalgono dell'arbitrarietà della rappresentazione dello spazio di Hilbert e *ricerche sulla proprietà dei sistemi analizzati sperimentalmente*, atomi, molecole, cristalli, agglomerati di molecole, sistemi estesi, che hanno portato ai notevoli successi ad esempio della chimica quantistica e della fisica della materia condensata. Le prime hanno portato a un'inquadramento assiomatico delle teorie, l'hanno resa raffinata dal punto di vista matematico e hanno posto le basi per la trattazione di sistemi che dal punto di vista classico hanno infiniti gradi di libertà (Teoria dei Campi Quantizzati e teorie derivate da questa, Meccanica Statistica Quantistica). Le seconde beneficiano in maniera notevole della *visualizzazione nello spazio delle configurazioni* che offre la rappresentazione di Schrödinger e sono alla base di tutte le straordinarie applicazioni che ha avuto la Meccanica Quantistica nel campo della tecnologia avanzata. Entrambe si sono poco occupate di un problema, la teoria della misurazione, la cui analisi in Fisica Classica è data per scontata mentre in Meccanica Quantistica non ha tuttora trovato soluzione soddisfacente. Ritorniamo su questo punto nel capitolo successivo.

Ritornando alla formulazione della Meccanica Quantistica (Meccanica delle Matrici), notiamo che l'equazione di Schrödinger si scrive adesso

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = H\phi \quad 1.52$$

dove H è un opportuno operatore simmetrico (trascuriamo in questo momento sottigliezze matematiche legate all'autoaggiuntezza dell'operatore H). La soluzione di (1.45) è (almeno formalmente)

$$\phi(t) = e^{-itH/\hbar} \phi(0).$$

In virtù del postulato di Born e del fatto che la particella può trovarsi dopo l'evoluzione in un altro stato ma che non può scomparire, la trasformazione $\phi(0) \rightarrow \phi(t)$ deve risultare unitaria (preciseremo questo punto in seguito) e questo implica che in (1.52) l'operatore H deve essere simmetrico.

Inoltre, il postulato di Born rende equivalenti dal punto di vista sperimentale funzioni d'onda che differiscano tra loro per un fattore di fase. Ciò ha notevoli implicazioni. In particolare rende legittime, come simmetrie del sistema, trasformazioni che hanno come risultato il cambiamento della funzione d'onda per un fattore di fase e introduce così la possibilità di utilizzare rappresentazioni proiettive dei gruppi di simmetria.

Utilizzando una rappresentazione proiettiva del gruppo delle rotazioni (una rappresentazione fedele del gruppo delle matrici unitarie di dimensione due) Pauli introdusse in Meccanica Quantistica lo *spin*, un'entità estranea alla Meccanica Classica, che rese conto della struttura iperfina dello spettro degli atomi, in particolare dell'atomo di elio.

Sempre questa proprietà del formalismo della Meccanica Quantistica permise l'introduzione del formalismo della *statistica di particelle identiche* con la divisione delle particelle elementari in due classi mutuamente escludentesi, quella (i Bosoni) in cui una permutazione degli indici di particella non altera la funzione d'onda e quelle (i Fermioni) in cui quest'operazione porta ad un cambiamento di segno (e quindi ad uno stato equivalente).

Ne segue che due Fermioni non possono stare nello stesso stato; questo principio di esclusione (di Pauli) è alla base delle proprietà degli spettri atomici e molecolari, e anche della *stabilità della materia* (di cui parleremo in seguito).

Al contrario, due Bosoni possono essere nello stesso stato, e anzi ci si aspetta che in uno stato di energia minima N Bosoni occupino, se possibile, lo stesso stato (abbiano la stessa funzione d'onda). Questo meccanismo è alla base della *condensazione di Bose-Einstein* un fenomeno previsto da Bose ed Einstein e osservato ora sperimentalmente.

Il render conto in modo relativamente semplice di questi due fenomeni, che non hanno alcuna controparte classica, è certamente uno dei successi maggiori del modello Meccanica Quantistica.

Terminiamo questo capitolo con una nota che indica la rigidità strutturale del modello. Abbiamo visto che in Meccanica Quantistica la dinamica è descritta dalla seguente relazione di evoluzione per gli operatori A

$$i\frac{dA}{dt} = \frac{1}{\hbar}[H, A], \quad 1.53$$

dove nella rappresentazione di Schrödinger A e H sono operatori differenziali o operatori di moltiplicazione per funzioni nello spazio delle configurazioni e nella formulazione di Born-Heisenberg sono operatori su uno spazio di Hilbert (matrici di rango infinito).

In entrambi i casi la soluzione di (1.53) è (sempre formalmente)

$$A(t) = U(t)AU^*(t), \quad U(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}H} \quad 1.54$$

dove per ciascun t l'operatore $U(t)$ è unitario. In generale per operatori differenziali o per matrici di rango infinito, le (1.53) e (1.54) sono solo formali, e richiedono una precisazione del dominio di applicazione. Se le matrici fossero di rango finito, queste affermazioni sarebbe esatte e non solo formali.

Notiamo ora che in Meccanica Classica la dinamica è data da un campo vettoriale, e che ciascun campo vettoriale definisce una derivazione nello spazio delle funzioni (abbastanza regolari) attraverso

$$\frac{dF}{dt} = \sum_k \xi_k \frac{\partial F}{\partial x_k}.$$

In particolare, se la dinamica è hamiltoniana, si ha

$$\frac{dF}{dt} = \{H, F\} \quad 1.55$$

dove $\{ , \}$ indica la parentesi di Poisson. La *rigidità strutturale* del modello Meccanica Quantistica è allora ben descritta dal seguente Teorema di Dirac.

Sia M_n l'algebra delle matrici $n \times n$. Diciamo che un'operazione lineare δ è una derivazione se essa soddisfa la regola di Leibniz per il prodotto. Una derivazione si dice una *-derivazione se soddisfa

$$\delta(a^*) = (\delta(a))^* \quad 1.56$$

per un generico elemento $a \in M_n$, dove a^* è l'aggiunta, o hermitiana coniugata di a . Diremo inoltre che la derivazione considerata è *interna* se esiste un elemento h di M_n tale che

$$\delta(a) = i[a, h]. \quad 1.57$$

Con queste notazioni vale il seguente teorema

Teorema 1.1 (Dirac)

Ogni *-derivazione di M_n è interna (e la matrice h può essere scelta hermitiana) \diamond

Daremo nel cap. 4 la dimostrazione del teorema di Dirac inquadrandola nel contesto delle algebre di operatori su uno spazio di Hilbert e più in generale delle C^* -algebre. Dimostreremo in quel contesto un risultato più generale, dovuto a Bratteli.

Notiamo solo che il teorema di Dirac implica che ogni dinamica lineare su M_n è necessariamente della forma

$$i \frac{da}{dt} = ha - ah. \quad 1.58$$

Se la derivazione è una *-derivazione, la matrice h è hermitiana ed è unica a meno di un termine additivo proporzionale all'identità (la matrice identità è la sola che commuta con ogni altra matrice). La soluzione di (1.58) è

$$a(t) = e^{-ith} a e^{ith}. \quad 1.59$$

Si può interpretare il teorema di Dirac come l'affermazione che ogni campo vettoriale quantistico è hamiltoniano e ogni evoluzione così generata è unitaria.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [BV09] G. Baccigaluppi, A. Valentini, *Quantum theory at the crossroad*, Cambridge Univ. Press 2009.
- [Boh17] N. Bohr, *Memoirs Acad. Roy. Dan.* (1917).
- [BKS24] N. Bohr, H. Kramers, J. Slater, *Phil. Mag.* 47 (1924) 785-802.
- [Bor24] M. Born, *Zeitschrift für Physik* 26 (1924) 379-395.
- [BJ25] M. Born, P. Jordan, *Zeitschrift für Physik* 34 (1925) 858
- [BJH26] M. Born, P. Jordan, W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik* 35 (1926) 557.
- [deB23] L. de Broglie, *Ondes et quanta*, *Compte rendues de l'Academie de Physique* 3 177 (1923) 548-550.
- [deB25] L. de Broglie, *Recherches sur la théorie des quanta*, *Annales de Physique* 3 (1925) 22-128.

- [deB27] L. de Broglie, *La mécanique ondulatoire*, Jour. de Physique 8 (1927) 225-241.
- [Dir26] P. Dirac, Proc. Royal Soc. A109 (1926) 642.
- [Dir26(2)] P. Dirac, Proc. Royal Soc. A112 (1926) 661-677.
- [Eck26] C. Eckart, Phys. Rev. 28 (1926) 711-726.
- [Ehr17] P. Ehrenfest, Phil. Mag. 33 (1917) 500-513.
- [Hei25] W. Heisenberg, Zeitschrift für Physik 33 (1925) 879-893.
- [Jor25] P. Jordan, *Zur Theorie der Quantenstrahlung*, Zeitschrift für Physik 30 (1925) 297-319.
- [Kra24] H. Kramers, Nature 113 (1924) 673-676.
- [Lad21] R. Ladenburg, Zeitschrift für Physik 4 (1921) 451-468.
- [Lau14] M. von Laue, Annalen der Physik 44 (1914) 1197-1212.
- [Neu27] J. von Neumann, Nachrichten der Akademie der Wissenschaften, Göttingen (20.05.1927) 1-57.
- [Pau26] W. Pauli, Zeitschrift für Physik 36 (1926) 336-363.
- [Sch26] E. Schrödinger, Annalen der Physik 79 (1926) 734-756.
- [Sla24] J. Slater, Nature 113 (1924) 307-320.
- [Vle24] J. van Vleck, Phys. Rev. 24 (1924) 330-365.

CAPITOLO 2

STATI, OSSERVABILI, MISURAZIONI. DECOERENZA

Nel capitolo precedente abbiamo visto come si sia venuto accumulando un insieme di risultati sperimentali, di analisi teoriche, di idee e di analogie che suggerivano la possibilità di costruire un modello di nuova meccanica e di nuova dinamica che fosse in grado di descrivere il comportamento di sistemi atomici. Ricordiamo che un modello matematico, secondo la definizione di J. von Neumann, è *una costruzione matematica che, insieme ad un linguaggio verbale di corrispondenza, cataloga (riproduce) un ambito di fenomeni fisici*.

La costruzione matematica consiste in assiomi o postulati (in generale dedotti da considerazioni semi-empiriche su regolarità di fenomeni osservati) e in deduzioni sotto forma di teoremi e di soluzioni di equazioni. Il linguaggio verbale associa alle strutture matematiche del modello dati sperimentali e quantità la cui descrizione empirica è tratta dal linguaggio comune.

Per esempio, nella Fisica Classica la costruzione matematica è costituita dalle equazioni della dinamica newtoniana (o hamiltoniana) del punto materiale, le equazioni della dinamica del continuo e quelle dell'elettromagnetismo come formulate da Maxwell. Il linguaggio (scientifico), cioè l'associare a oggetti matematici quantità misurabili sperimentalmente, è in questo caso dato per scontato, e l'accordo implicito proviene da molti secoli di esperienze e dal fatto che del mondo classico abbiamo esperienza quotidiana. Nessuno dubita del fatto che termini come *misurare una velocità* o *misurare un campo magnetico* abbiano un significato che non deve essere ulteriormente precisato.

Per i fenomeni descritti dalla Meccanica Quantistica questa ovvietà viene meno, e, come vedremo, *lo stesso concetto di misurazione può divenire problematico*. Si potrebbe ovviare a questo affermando con Bohr che oggetti macroscopici, quali sono gli strumenti di misura, *devono essere trattati come oggetti classici*, ma questo dividerebbe il mondo delle esperienze in due parti separate e tra loro incompatibili, e renderebbe difficile precisare di volta in volta a quale mondo si fa riferimento.

Molti tentativi sono stati fatti per risolvere il problema della misurazione (cioè cosa è e come agisce in Meccanica Quantistica uno strumento di misura) e più in generale per riprodurre risultati di Meccanica Classica per la maggior parte dei sistemi macroscopici (alcuni hanno tuttavia proprietà non compatibili con la Fisica Classica).

Sono stati proposti vari meccanismi che possono rendere non percepibili nel ca-

so di corpi macroscopici le caratteristiche tipiche della Meccanica Quantistica, in particolare il *principio di sovrapposizione o di intralacciamento*. Alcuni di questi tentativi hanno portato ad una migliore comprensione della portata concettuale del formalismo e della sua interpretazione. Non si è tuttavia ancora trovata una risposta esauriente a questo problema.

Dal punto di vista empirico, il modello Meccanica Quantistica ha avuto successi clamorosi nell'organizzare, descrivere e prevedere tutti i risultati sperimentali disponibili nel suo campo di validità, cioè la fisica (non relativistica) degli atomi, delle molecole e dei loro aggregati, ed è alla base dei più recenti successi della tecnologia.

Le tecniche che sono state sviluppate per analizzare in dettaglio il formalismo della Meccanica Quantistica hanno portato a contributi di grande rilevanza per lo sviluppo della ricerca in Matematica.

È opportuno peraltro ricordare che questo modello, come per loro natura tutti i modelli matematici, ha un suo dominio di validità (o piuttosto di utilità), non ha la pretesa di descrivere e comprendere la vera natura delle cose ma serve piuttosto ad organizzare in modo organico le nostre conoscenze sulla fisica alla scala delle dimensioni atomiche e le conseguenze per la struttura di corpi macroscopici.

In questo capitolo e nei successivi descriveremo la struttura matematica e il linguaggio verbale del modello. Sarà opportuno iniziare con una definizione in termini matematici di alcuni concetti quali stato, osservabili, evoluzione e successivamente descrivere la dinamica in termini di equazioni. Sarà poi necessario stabilire teoremi di esistenza e unicità, arrivando se possibile ad una descrizione unificata del formalismo matematico che sta alla base della descrizione di fenomeni diversi quali ad esempio la diffrazione di elettroni da un reticolo cristallino e la struttura discreta degli spettri di emissione di un atomo.

Iniziamo con la formalizzazione matematica dei concetti di *stato* e *osservabile*.

Ricordiamo che in Meccanica Classica lo stato di un sistema elementare è descritto da un punto nello spazio della fasi \mathcal{M} . Le osservabili sono rappresentate da funzioni su \mathcal{M} (a valori reali, ma le considerazioni che seguono possono essere estese a funzioni a valori complessi).

La Meccanica Classica stabilisce che se m è un punto dello spazio delle fasi, e se la funzione f è continua, $f(m)$ rappresenta il risultato che dà la misurazione dell'osservabile descritta da f se è effettuata quando lo stato del sistema è descritto da m .

Il significato del termine *misurazione* e il ruolo dell'apparato di misura non vengono precisati perché la loro definizione è considerata già acquisita (esistenza di misurazioni oggettive).

Dal punto di vista matematico, gli stati del sistema sono quindi elementi del

duale delle funzioni continue, la corrispondenza essendo data da

$$f \rightarrow f(m).$$

In Meccanica Statistica Classica (ad esempio nella termodinamica di Gibbs) si introducono anche stati rappresentati da *densità*, o più precisamente da misure (positive) μ che hanno un densità ρ (derivata di Radon-Nikodym) rispetto alla misura di Lebesgue dm

$$d\mu = \rho(m)dm,$$

dove ρ è una funzione positiva misurabile di integrale uno (se si considerano stati normalizzati, nel senso che alla funzione identicamente uguale ad uno assegnano il valore uno). Questi stati descrivono funzionali lineari positivi sulle funzioni continue e possono essere estesi a funzionali continui su L^∞ , lo spazio delle funzioni essenzialmente limitate; in conseguenza risulta maggiore il numero di funzioni che possono essere associate a quantità osservabili. La corrispondenza è data ora da

$$f \rightarrow \int f(m)\rho(m) dm. \quad 2.1$$

Questi ulteriori stati non sono stati *puri* (non decomponibili) perché ogni funzione positiva ρ in L^1 può essere scritta nella forma $\rho = \rho_1 + \rho_2$ dove ρ_k sono funzioni della stessa classe. Si può notare che la corrispondenza (2.1) è continua in f nella topologia di L^∞ e continua in ρ nella topologia L^1 .

Come si vede da questi brevi richiami, l'utilizzazione in Meccanica Classica di stati puri è *strettamente legata alla possibilità di prendere solamente in esame funzioni continue*. Quando si passa a considerare la Meccanica Quantistica, un primo problema è che non esiste lo spazio delle fasi, e quindi è difficile sapere a priori quali osservabili giocano il ruolo di funzioni continue, o di funzioni differenziabili (per le quali in Meccanica Classica è definita la dinamica in termini di parentesi di Poisson).

Un modo di procedere può essere il seguente. Esso risente della interpretazione di Born secondo la quale la quantità

$$\int_{\Omega \subset R^3} |\phi(x)|^2 dx$$

rappresenta la probabilità che compiendo un'operazione di misura di posizione di una particella risulti che essa è localizzata nella regione Ω . Questa interpretazione introduce in modo naturale la struttura di spazio di Hilbert (quale è $L^2(R^3, dx)$) e mette in luce l'analogia di $|\phi(x)|^2$ con la distribuzione classica $\rho(x)$. In particolare, esse sono entrambe positive, di classe L^1 e normalizzate a 1.

Nella formulazione della Meccanica Quantistica di Schrödinger per una particella in R^3 gli stati sono rappresentati da vettori (normalizzati) in uno spazio

di Hilbert complesso separabile $\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^3)$ e nella formulazione di Heisenberg gli osservabili sono descritti da matrici, ovvero operatori lineari su $\mathcal{H} \equiv l^2(Z)$. È quindi plausibile porre i seguenti assiomi.

Assioma 1

Gli osservabili in Meccanica Quantistica sono rappresentati da operatori lineari autoaggiunti su di uno spazio di Hilbert complesso \mathcal{H} .

◇

Indichiamo con $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ l'insieme degli operatori chiusi e limitati su \mathcal{H} . Rimandiamo ad un'appendice del cap. 5 alcune nozioni di base di teoria degli operatori su di uno spazio di Hilbert.

Sia $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. La corrispondenza

$$A \rightarrow \frac{(\phi, A\phi)}{|\phi|^2} \equiv \sigma_\phi(A) \quad 2.2$$

definisce un funzionale lineare su $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, e quindi può essere identificato con uno stato del sistema. Notando che il termine a sinistra è omogeneo di grado 0 in ϕ si vede che un tale stato dipende solo dal *raggio* associato a ϕ (la collezione di elementi di \mathcal{H} della forma $\{\lambda\phi, \lambda \in \mathbb{C}\}$).

La (2.2) può anche essere scritta nella forma

$$A \rightarrow \text{Tr}(AP_\phi) \quad 2.3$$

dove P_ϕ è il proiettore ortogonale (in \mathcal{H}) sul vettore ϕ e Tr indica l'usuale operazione di traccia su operatori di classe traccia.

Quest'operazione rappresenta una naturale estensione dell'usuale operazione di traccia per una matrice, e ne verifica le proprietà, prima fra tutte la proprietà ciclica. Discuteremo queste proprietà nell'appendice al cap. 5.

Gli stati così ottenuti sono stati puri (non decomponibili). Infatti è facile dimostrare che se gli elementi $\psi, \xi \in \mathcal{H}$ non sono tra loro proporzionali, non esistono $\phi \in \mathcal{H}$ e numeri positivi $a, b, a + b = 1$ tali che

$$\sigma_\phi = a\sigma_\psi + b\sigma_\xi.$$

Nell'ambito più generale delle algebre di operatori su \mathcal{H} si può anche dimostrare che questi stati sono normali (uno stato σ su un'algebra è detto normale se per ogni filtro crescente A_α in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ con estremo superiore A il filtro $\sigma(A_\alpha)$ ha come estremo superiore $\sigma(A)$).

Dunque gli stati che abbiamo definito sono puri e normali. Tuttavia, a differenza di quanto avviene in Meccanica Classica *nessuno di questi stati puri è privo di dispersione*. Questo è dovuto al fatto che l'algebra $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ non è commutativa.

Ricordiamo che la dispersione di uno stato σ relativamente ad un'osservabile A è definita da

$$\Delta_\sigma(A) \equiv \sigma(A^2) - (\sigma(A))^2. \quad 2.4$$

Uno stato non ha dispersione se $\Delta(A) = 0 \quad \forall A$. Notiamo per confronto che gli stati puri della Meccanica Classica non hanno dispersione. Poniamo dunque

Assioma 2

Gli stati puri in Meccanica Quantistica sono rappresentati da raggi di uno spazio di Hilbert \mathcal{H} .

◇

Anche in Meccanica Quantistica si possono introdurre stati non puri, chiamati miscele statistiche. La loro relazione con gli stati puri è analoga alla corrispondente relazione in Meccanica Classica (da questo il nome di miscele statistiche). Essi sono definiti da

$$A \in B(\mathcal{H}) \rightarrow \sum_k c_k \operatorname{Tr}(AP_k) \equiv \operatorname{Tr}(\rho A) \equiv \sigma_\rho(A), \quad c_k > 0, \quad \sum_k c_k = 1 \quad 2.5$$

dove P_k sono proiettori su stati normalizzati $\phi_k \in \mathcal{H}$ e $\rho = \sum_k c_k P_k$. Con questa notazione, ρ è un operatore positivo di classe traccia e traccia 1; a questi operatori viene dato spesso il nome di *matrici densità*. Essi giocano in questo contesto il ruolo che giocano le densità in Meccanica Classica.

Gli assiomi 1 e 2 formalizzano le basi del contenuto matematico del modello. Introduciamo ora due assiomi che sintetizzano la parte verbale del modello, cioè le regole e le convenzioni che permettono di associare agli enti matematici contenuti nei primi due assiomi quantità misurabili sperimentalmente. In altre parole, di connettere il formalismo matematico con le esperienze di laboratorio.

Assioma 3

Vi è corrispondenza biunivoca tra gli operatori chiusi simmetrici e limitati A e quantità misurabili \tilde{A} . Se si compiono misurazioni di \tilde{A} in uno stato rappresentato dal vettore $\phi \in \mathcal{H}$, $|\phi| = 1$ e se l'operatore A ha spettro discreto e semplice, i soli valori che si possono ottenere sono i suoi autovalori.

Indichiamo con a_i gli autovalori e con ψ_i^A le corrispondenti autofunzioni (poiché lo spettro è semplice, questo definisce ψ_i^A a meno di un fattore di fase). La probabilità p_i^A che si ottenga il valore a_i è data da $p_i^A = |(\psi_i^A, \phi)|^2$.

◇

Nota 2.1

Dall'assioma 3 segue che il valor medio dei risultati della misura di \tilde{A} fatta quando lo stato del sistema è descritto dal vettore ϕ è

$$(\phi, A\phi) \equiv \operatorname{Tr}(P_\phi A)$$

dove abbiamo indicato con P_ϕ il proiettore ortogonale sul vettore ϕ . Se il sistema si trova in uno stato descritto dalla matrice densità σ il valor medio sarà corrispondentemente $\operatorname{Tr}(\sigma A)$.

♣

Per osservabili il cui spettro non sia semplice e/o sia continuo l'assioma 3 assume una forma leggermente più complicata, con ovvie modificazioni che qui non esplicitiamo.

Nota 2.2

Il modo in cui abbiamo formulato l'assioma 3 è probabilmente troppo ambizioso. È difficile dare una prescrizione per determinare lo strumento adatto a misurare le osservabili associate ad un qualunque operatore chiuso limitato e simmetrico.

Ad esempio è difficile indicare lo strumento adatto a misurare l'osservabile da associare all'operatore $\Pi_\Omega \tilde{\Pi}_\Sigma \Pi_\Omega$ dove Π_Ω è l'operatore di moltiplicazione per la funzione caratteristica dell'insieme Ω nello spazio delle configurazioni e $\tilde{\Pi}_\Sigma$ è, in trasformata di Fourier, l'operatore di moltiplicazione per la funzione indicatrice dell'insieme Σ . Quello che certamente riteniamo essere misurabile è (la moltiplicazione per) ogni funzione limitata della posizione, (la moltiplicazione per) ogni funzione limitata degli impulsi (mediante esperimenti di scattering) e tutti gli operatori che corrispondono a hamiltoniane per sistemi fisici realizzabili. E riteniamo di poter costruire i corrispondenti strumenti di misura.



Nota 2.3

L'assioma 2 implica che se σ_ϕ e σ_ψ sono stati puri distinti del sistema con $\phi \perp \psi$, anche $\xi \equiv \sigma_{(a\psi + b\phi)}$, con $|a|^2 + |b|^2 = 1$, è uno stato puro. Ma in generale per un'osservabile rappresentata dall'operatore A si ha

$$\text{Tr}(\Pi_\xi A) \neq |a|^2 \sigma_\psi + |b|^2 \sigma_\phi \quad 2.7$$

(fa eccezione il caso in cui $(\psi, A\phi) + (\phi, A\psi) = 0$).

La misurazione di un osservabile nello stato *sovrapposizione* dà in generale un risultato diverso da quello che si avrebbe facendo una misurazione della stessa osservabile nei singoli stati ψ e ϕ e pesando poi il risultato con i pesi $|a|^2$ e $|b|^2$. Lo stato ξ è caratterizzato dalle fasi, oltre che dai moduli, dei due stati ϕ e ψ a partire dai quali è costruito. Tali fasi si cancellano invece nei corrispondenti proiettori (gli stati si sommano allora in maniera incoerente). Come vedremo in seguito l'informazione contenuta nelle fasi, in sistemi quantistici costituiti da più sotto-sistemi, correla gli stati dei sotto-sistemi anche quando questi risultano spazialmente separati. I loro stati vengono *intrallacciati* (*entangled*); questa espressione è stata coniata da Schrödinger, che ha compreso che *questa è la proprietà fondamentale della Meccanica Quantistica*. Questo *principio di sovrapposizione* è un principio caratterizzante della Meccanica Quantistica e non ha un analogo classico.

Si noti per confronto che se σ è una miscela statistica degli stati σ_ψ e σ_ϕ con pesi $|a|^2$ e $|b|^2$ si ha

$$\sigma(A) = |a|^2 \sigma_\psi(A) + |b|^2 \sigma_\phi(A).$$

Se nella rappresentazione di Schrödinger si interpretano (cum grano salis) $\phi(x)$ e $\psi(x)$ come *onde di probabilità*, ne segue che queste onde di probabilità interferiscono tra loro. Si suole esprimere questo dicendo (con terminologia fuorviante) che le leggi che determinano la composizione delle probabilità in Meccanica Quantistica sono diverse da quelle della teoria classica della probabilità (attraverso le probabilità condizionate). Queste interferenze sono note dalla teoria del campo elettromagnetico ma in Meccanica Quantistica rappresentano un discostarsi dal senso comune perché si riferiscono a oggetti materiali.



Ritornando ora alla formulazione assiomatica, notiamo che nell'assioma 3 viene indicata la probabilità di ottenere un dato risultato e di conseguenza il valor medio dei risultati della misurazione. Non viene invece precisato l'effetto della misurazione sul sistema misurato.

In Meccanica Classica si assume che, in circostanza ideali, sia possibile fare una misurazione su un sistema traendo informazioni ma lasciando il sistema inalterato, o comunque cambiando lo stato del sistema in modo controllato.

In Meccanica Quantistica questo non è ritenuto possibile; l'interazione con uno strumento di misura altera in modo irreversibile e casuale lo stato del sistema e quindi altera il risultato di misure che vengano fatte in tempi successivi. In particolare si pone

Assioma 4

Se a_i è un autovalore non degenere dell'operatore A con autovettore ψ_i^A e se la misurazione dell'osservabile A ha dato il risultato a_i , *immediatamente dopo la misurazione* lo stato del sistema è descritto dal vettore ψ_i^A .

Questa affermazione va sotto il nome di *riduzione della funzione d'onda*.



Nota 2.4

La formulazione immediatamente dopo per quanto imprecisa, tiene conto del fatto che l'operatore A può non commutare con la hamiltoniana, per cui nel corso del tempo uno stato corrispondente ad un autovalore di A può diventare una combinazione lineare di più autostati di A .

Poiché l'evoluzione quantistica è un processo continuo, quest'effetto è trascurabile se il tempo che si lascia trascorrere tra una misurazione e l'altra è trascurabile.



Nota 2.5

L'assioma 4, così come è stato formulato precedentemente, sintetizza gli assiomi che, in alcune presentazioni della Meccanica Quantistica, vengono denominati rispettivamente di misura e di preparazione. Il primo sottolinea il processo di riduzione della funzione d'onda all'istante della misurazione. Il secondo riguarda l'immediatamente dopo il processo di misura e costituisce la prescrizione

pratica per la preparazione di un sistema quantistico in un particolare stato: ripetere misurazioni di un'osservabile di cui lo stato stesso è autostato, fino a che il risultato della misura non confermi il corrispondente autovalore.



Per comprendere meglio la portata e le conseguenze dell'assioma 4 notiamo che esso, *insieme al fatto che nell'insieme di tutti gli operatori il prodotto non è commutativo*, porta alla conclusione che non è possibile attribuire *proprietà oggettive in senso classico* ad un sistema quantistico.

Per ciascun stato ρ di un sistema quantistico esiste una collezione di osservabili $A_\rho^1, \dots, A_\rho^n$ che *in quello stato* hanno un valore definito. Ma questa collezione varia da stato a stato, e non esiste un'osservabile (il cui rappresentativo che non sia un multiplo dell'identità) che ha valore definito in tutti gli stati.

Per confronto, notiamo che in Meccanica Classica *tutti gli osservabili* (cioè tutte le funzioni continue sullo spazio delle fasi) *assumono un valore definito* sugli stati puri del sistema (le misure di Dirac concentrate in un punto dello spazio delle fasi). Quindi non c'è ambiguità nell'affermazione il valore dell'osservabile $f(z)$ nello stato rappresentato da δ_{z_0} è $f(z_0)$. Inoltre la *misurazione di un'osservabile* fatta quando il sistema è in uno stato puro non altera lo stato puro e se iterata in un istante immediatamente successivo riproduce lo stesso risultato. Ne segue che in Meccanica Classica non è considerato rilevante il problema dell'esistenza di proprietà oggettive del sistema (si considera evidente, senza ulteriori giustificazioni, l'affermazione il punto materiale si trova all'istante considerato in una posizione nello spazio delle configurazioni e possiede una specifica quantità di moto). E si considera risolto (anzi, non degno di attenzione) il problema di cosa significhi *misurare un'osservabile*.

Nota 2.6

In alcuni casi in Meccanica Quantistica si ammette l'esistenza di un certo numero di osservabili che hanno valore ben definito in ciascuno stato. In quel caso, le osservabili non sono in corrispondenza biunivoca con gli operatori autoaggiunti, ma ne costituiscono una sottoclasse. Si parla allora di *regole di superselezione*.

Le regole di superselezione sono originate da una collezione di operatori $\{B_1, \dots, B_n\}$ e si richiede alle osservabili di corrispondere ad operatori che commutano con tutti gli operatori B_i . Se gli operatori $\{B_i\}$ commutano fra loro, gli stati puri del sistema sono autostati di ciascun B_i . Una tipica regola di superselezione è la conservazione della carica.

In questa nostra trattazione elementare trascureremo l'eventuale esistenza di regole di superselezione.



Commentiamo brevemente l'assioma 4. Come vedremo nel corso di questo capitolo, quest'assioma è all'origine delle difficoltà concettuali che presenta il for-

malismo della Meccanica Quantistica e la sua interpretazione. Vedremo infatti nel cap. 3 che la dinamica quantistica dà luogo, come quella classica, a trasformazioni continue e deterministiche degli stati. D'altra parte la riduzione della funzione d'onda viene presentata come (quasi) istantanea.

Per conciliare le due cose, sarebbe necessario affermare che la riduzione della funzione d'onda richiede un lasso finito di tempo, magari trascurabile rispetto al tempo caratteristico di cambiamento della maggior parte dei sistemi fisici. In questo modo la riduzione può essere considerata avvenire *a tutti i fini pratici* in modo istantaneo.

E sarebbe soprattutto necessario precisare quali sono le caratteristiche dei processi di misurazione che li distinguono dai comuni processi di interazione. Torneremo su questo problema in questo Capitolo.

Qui ci occupiamo di una giustificazione formale dell'assioma 4. Per osservabili rappresentati da operatori a spettro discreto questa analisi può essere fatta in modo accurato.

Consideriamo la misurazione in tre istanti successivi di due osservabili rappresentate da operatori A e B che non commutano tra di loro e hanno spettro discreto (ad esempio le componenti dello spin di una particella lungo assi diversi) e semplice (gli autovalori hanno tutti molteplicità uno).

Siano $\{a_n\}$, $\{\phi_n\}$ gli autovalori e autovettori dell'operatore A e $\{b_n\}$, $\{\psi_n\}$ gli autovalori ed autovettori dell'operatore B . Facciamo una misurazione dell'osservabile A nello stato (puro) rappresentato dalla funzione d'onda ξ . Otterremo con una certa probabilità il risultato a_k . L'assioma 4 afferma che se il risultato ottenuto è a_k , lo stato finale (dopo la misurazione dell'osservabile A) del sistema è ϕ_k . Se così non fosse, una misurazione della stessa osservabile A in un istante immediatamente successivo potrebbe dare un risultato diverso da a_k e questo renderebbe non significativa la misurazione.

Adesso facciamo una misurazione dell'osservabile B ; secondo le regole della Meccanica Quantistica che abbiamo descritto, otteniamo il valore b_h con probabilità $|\langle \phi_k, \psi_h \rangle|^2$. Se il risultato della misurazione è b_h , l'assioma 4 assicura che il sistema *dopo la misurazione di B* si trova nello stato ψ_h . Ne deduciamo che se ora eseguiamo una misurazione di A otterremo il risultato a_n con probabilità $|\langle \psi_h, \phi_n \rangle|^2$.

Quindi se misuriamo l'osservabile A dopo aver fatto una misurazione dell'osservabile B , il risultato della misurazione è in generale diverso da quello che avremmo ottenuto se non avessimo fatto la misurazione di B .

Il fatto che il risultato dell'ultima operazione sia di natura probabilistica (diamo la probabilità di ottenere lo stesso risultato della prima misurazione) è evidenza del fatto che la modificazione dello stato del sistema in seguito ad un'operazione di misurazione segue una legge diversa da quella che ne regge l'evoluzione nel tempo in assenza di misurazioni.

Gli assiomi enunciati qui sopra permettono di dare una descrizione matematica

della Meccanica Quantistica e di fare previsioni statistiche sui risultati di una misurazione.

Conviene notare che, pur essendo di natura statistica le previsioni sui risultati di una misurazione, l'evoluzione delle osservabili e degli stati che descriveremo nel cap. 3 sarà descritta da leggi deterministiche; l'aspetto intrinsecamente probabilistico della teoria interviene solo nell'assioma 4 che descrive i risultati del processo di misurazione.

Come già osservato, questo implica che nella Meccanica Quantistica formulata attraverso gli assiomi 1, ..., 4 il processo di misurazione viene descritto da leggi *diverse* da quelle che regolano l'evoluzione e conseguentemente viene fatta una distinzione tra interazione (ad esempio di una particella con l'altra) e processo di misurazione. Ciò costituisce una notevolissima difficoltà concettuale, che non è stata finora superata nell'ambito della Meccanica Quantistica.

Esplicitiamo questa difficoltà. Siano $\{\psi_k\}$ gli autostati dell'operatore che corrisponde all'osservabile considerato e $\{\xi_m\}$ quelli dello strumento di misura. Supponiamo che prima della misurazione lo stato dell'osservabile sia ψ_1 e quello dello strumento di misura sia ξ_1 . L'autofunzione del sistema complessivo è quindi al tempo 0

$$\Phi(0) = \psi_1 \xi_1. \quad 2.8$$

Se la misurazione è una trasformazione unitaria che avviene in un tempo trascurabile τ – trascurabile, ma pur sempre finito – e se il sistema è isolato, la funzione d'onda al tempo τ diventa

$$\Phi(\tau) = \sum_{k,j} c_{k,j}(\tau) \psi_k \xi_j. \quad 2.9$$

Non è incompatibile con il formalismo della Meccanica Quantistica (anche se difficile da dimostrare in casi pratici) il supporre che l'interazione sia tale che al tempo τ (al completamento della misurazione)

$$\Phi(\tau) = \sum_k c_k(\tau) \psi_k \xi_k \quad 2.10$$

dove $|c_k(\tau)|^2$, secondo l'interpretazione di Born, è la probabilità che il risultato della misurazione sia λ_k , autovalore associato a ψ_k . Ma è *impossibile* trovare una trasformazione unitaria da (2.10) a una miscela statistica di stati con probabilità $|c_k(\tau)|^2$.

Il ruolo del principio di riduzione della funzione d'onda appare evidente nell'analisi delle tracce di una particella α rilevate con una camera a bolle. Questo è un apparato riempito di gas supersaturo che può subire una transizione alla fase liquida scambiando una quantità minima di energia. Nella descrizione quantistica della disintegrazione radioattiva, secondo la teoria di Gamow, la particella α è descritta come un'onda (di probabilità) sferica $\phi(r)$ emessa dall'atomo (che

possiamo considerare fermo nell'origine) con alta velocità di propagazione radiale. La particella α interagisce con gli atomi del gas producendo ionizzazione. Questa a sua volta produce la transizione di fase. Quello che viene osservato è la successione di goccioline prodotte; si vede che le tracce sono rettilinee e questo viene interpretato come evidenza di una traiettoria di particella.

È difficile capire come un'onda sferica possa produrre tracce rettilinee; l'intuizione suggerirebbe che la ionizzazione si producesse omogeneamente in tutta la camera a bolle.

Nei testi elementari di Meccanica Quantistica questo viene interpretato nel modo seguente: mediante la prima ionizzazione il mezzo che riempie la camera a bolle agisce come uno strumento di misurazione (della posizione della particella α) e conseguentemente ha luogo una riduzione della funzione d'onda della particella α . La funzione d'onda così prodotta ha supporto in un piccolo intorno di x_0 (punto in cui viene prodotta la goccia), e la sua trasformata di Fourier ha supporto in un piccolo intorno del vettore $k_0 \equiv \hat{e} \sqrt{2M(E_0 - E_{ion})}$ dove \hat{e} è il versore nella direzione della congiungente il punto di decadimento con il punto della prima ionizzazione, M è la massa della particella α , E_0 è l'energia della particella α prodotta e E_{ion} è l'energia richiesta per la ionizzazione.

Come vedremo nel cap.8 (teoria semiclassica) l'evoluto di questo nuovo dato iniziale secondo l'equazione di Schrödinger è una funzione d'onda ben localizzata intorno alla traiettoria classica (rettilinea) che corrisponde alla hamiltoniana $\frac{p^2}{2M}$ e dati iniziali $\{x_0, p_0\}$. Questo dà ragione della traccia rettilinea (ogni successiva ionizzazione altera di poco la quantità di moto poiché $E_{ion} \ll E_0$).

Come giustamente osservato da N.F.Mott nel 1929 [Mot29], per spiegare il fenomeno delle tracce rettilinee non è necessario invocare la riduzione dello stato della particella α e basta eseguire i calcoli seguendo le prescrizioni della Meccanica Quantistica. È tuttavia necessario ricordare che il sistema quantistico che consideriamo è costituito dalla particella α e dagli atomi che vengono ionizzati, e che quello che misuriamo è la ionizzazione degli atomi *e non la funzione d'onda della particella α* . La conoscenza di questa funzione d'onda all'istante iniziale ci provvede la probabilità che la traccia abbia una particolare direzione. In tutta l'analisi che faremo la particella α viene descritta da una funzione d'onda *e non come particella localizzata*. Mott osserva giustamente che la difficoltà che incontriamo a pensare che un'onda sferica generi tracce rettilinee risiede nel fatto che siamo portati a immaginare che la funzione d'onda del sistema rappresenti un'onda nello spazio fisico, mentre essa rappresenta un'onda di probabilità nello spazio di dimensione $3(N+1)$ dove N è il numero di atomi nella camera a bolle.

Nella situazione fisica che corrisponde al fenomeno che descriviamo, la Meccanica Quantistica di Schrödinger prevede che ogni traccia che si forma deve necessariamente essere rettilinea (nel limite degli errori sperimentali) ma che ogni direzione sia ugualmente probabile. La dimostrazione che si trova sull'articolo di Mott utilizza un formalismo indipendente dal tempo e non è totalmente

convincente; una dimostrazione più accurata si ottiene facendo uso della forma esplicita (perturbativa) delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger per il sistema complessivo. Le caratteristiche dell'onda iniziale (alta energia ed estrema localizzazione) permettono di introdurre un piccolo parametro ϵ (proporzionale al rapporto tra l'energia di ionizzazione degli atomi e l'energia iniziale della particella α e anche al rapporto fra le dimensioni degli atomi e le distanze tra i punti di ionizzazione). L'analisi della soluzione dell'equazione di Schrödinger può essere fatta utilizzando metodi di fase stazionaria e non-stazionaria (come viene fatto in ottica geometrica) e dimostra che a seguito dell'interazione con un atomo la funzione d'onda viene modificata e la modificazione consiste nella presenza di una funzione d'onda di piccola ampiezza molto localizzata vicino al punto dell'interazione con l'atomo, con alta energia (l'energia di ionizzazione è trascurabile). Essendo l'equazione di Schrödinger lineare, questa perturbazione si propaga con ottima approssimazione in linea retta o seguendo una traiettoria circolare in presenza di un campo magnetico uniforme. Da questo si deduce (attraverso l'equazione di Schrödinger) che è trascurabile la probabilità che *questa parte dell'onda* dia luogo ad una ionizzazione di atomi che non siano (approssimativamente) localizzati lungo la congiungente il punto in cui la particella α viene prodotta con il punto in cui avviene la prima ionizzazione.

Notiamo che l'osservazione di una traccia rettilinea non implica una localizzazione della particella α nello stato finale (sebbene lo suggerisca se si cerca un'interpretazione classica). Se si vuole insistere che la particella sia localizzata sulla fine della traccia segnata dalle goccioline, allora bisogna utilizzare il *principio di riduzione della funzione d'onda*, cioè affermare che *sopravvive alla prima interazione* solamente quella parte della funzione d'onda che viene modificata.

Notiamo anche che nello spazio di Hilbert complessivo del sistema particella α prodotta+ atomi ionizzabili la perturbazione è ortogonale (almeno al prim'ordine) alla parte imperturbata (perché corrispondono a stati ortogonali del primo atomo ionizzato). Ne segue che osservazioni di quantità che dipendono solo dal mezzo non permettono di distinguere se lo stato della particella dopo la prima interazione sia uno stato puro oppure una miscela statistica. Sarebbe necessario per questo fare misurazioni di osservabili che *dipendano congiuntamente* dalle coordinate del mezzo e della particella α .

Da questo semplice esempio si vede in che senso il postulato di riduzione della funzione d'onda è simile al condizionamento, ed è legato al fatto che la funzione d'onda in Meccanica Quantistica rappresenta una (densità di) probabilità e non un'onda materiale (da questo punto di vista, la descrizione differisce moltissimo concettualmente da quella data dalla teoria dell'onda pilota di Bohm, che discuteremo brevemente in un'appendice). Ma si vede anche che molti dei risultati che provvede la Meccanica Quantistica non dipendono dalla validità del principio di riduzione.

Si è cercato di risolvere la difficoltà insita nel postulato di riduzione della funzione d'onda notando che gli stati puri ξ_k sono in realtà stati stazionari *instabili* dello strumento di misurazione. Uno strumento di misurazione di un sistema a scala atomica deve essere necessariamente dotato di *un meccanismo di notevole amplificazione* che fa corrispondere a stati *microscopici* dell'osservabile stati macroscopici dell'apparato. Questo rende *a tutti gli effetti pratici* una generica interazione diversa da quella che avviene con lo strumento di misurazione.

Lo stato puro macroscopico ξ_k dello strumento deve essere considerato quindi una miscela statistica di stati a livello microscopico, e deve essere sufficientemente *instabile* in modo tale da poter essere molto sensibile alla variazione dello stato del sistema microscopico e al tempo stesso stabile per piccoli cambiamenti dell'ambiente esterno.

Data la analogia con le *transizioni di fase* in termodinamica e la loro analisi in Meccanica Statistica classica, risulta naturale cercare di descrivere lo strumento di misura mediante un sistema composto da un gran numero N particelle e considerare come *osservabili (stabili) dello strumento di misura* funzioni *estensive*.

Anche se le osservabili delle singole particelle non commutano le variabili estensive nel limite $N \rightarrow \infty$ possono essere variabili *classiche* (tra loro commutanti, e quindi simultaneamente misurabili).

Non è noto se possa essere scritta un'equazione *effettiva* che descrive approssimativamente l'evoluzione nel tempo dello stato macroscopico ξ_k nell'intervallo di tempo in cui si compie la misurazione (notiamo che questo tempo è trascurabile su scala macroscopica, ma può essere molto lungo su una scala adattata al sistema microscopico). Questa equazione può essere non lineare, in analogia di quanto avviene nella descrizione della condensazione di Bose-Einstein, essendo un'equazione per variabili macroscopiche (ad esempio valori medi di variabili microscopiche dello strumento di misura) derivata da un'equazione lineare per le variabili microscopiche. Se esiste ed è non lineare può presentare degli attrattori, e questo darebbe ragione della stabilità del risultato finale rispetto a piccole perturbazioni dell'ambiente esterno.

Modelli di questo tipo sono stato elaborati, con diversi gradi di successo, e costituiscono a tutt'oggi la migliore descrizione teorica e matematica di come possa essere interpretato in Meccanica Quantistica il processo di misurazione e quindi il senso che possiamo dare al principio di von Neumann relativamente alla riduzione della funzione d'onda durante un procedimento di misurazione.

Ne concludiamo che una formulazione più precisa dell'assioma 4 richiede un'analisi dettagliata del processo di misurazione e della struttura dell'apparato di misura. Contributi significativi a quest'analisi sono stati dati da K.Hepp [Hep72], N.Van Kampen [Kam88], G. Sewell [Sew05]. Tutti questi modelli portano in ultima analisi a considerare classico lo strumento di misura (la tesi che fosse necessario considerare come classico lo strumento di misura fu sempre sostenuta

da N.Bohr).

In questo ambito si collocano anche le teorie che attribuiscono all'interazione con l'ambiente esterno l'assenza apparente (nel limite della precisione delle misurazioni) delle conseguenze del principio di sovrapposizione *quando si fanno misurazioni che riguardano esclusivamente alcune osservabili di un sottosistema* (l'oggetto osservato). Ricordiamo che per un sistema quantistico isolato \mathcal{S} i valori di aspettazione di un sufficiente numero di osservabili individua con precisione lo stato del sistema. Se il sistema \mathcal{S} non è isolato ma fa parte di un più grande sistema quantistico \mathcal{S}' questa affermazione non è più vera se riferita alle sole osservabili di \mathcal{S} . Ignorando la parte restante del sistema (che convenzionalmente chiameremo *ambiente* che interagisce con \mathcal{S}) si ottiene solamente una conoscenza parziale e non è più possibile cogliere appieno gli effetti dell'intrallacciamento (*decoerenza*).

A questo proposito bisogna ricordare che la funzione d'onda rappresenta una densità di probabilità (e non di materia) ed è definita nello spazio delle configurazioni del sistema complessivo (compreso l'ambiente esterno); il principio di sovrapposizione vale in questo spazio. La decoerenza può essere considerata come conseguenza di un processo continuo di formazione di correlazioni tra le varie parti di un sistema quantistico (in particolare del sistema sotto osservazione) con l'ambiente esterno. Questo processo è persistente (dura fino a che il sistema sotto osservazione interagisce con l'ambiente esterno) e incontrollabile perché l'ambiente esterno non è soggetto a un procedimento di misurazione.

Notiamo esplicitamente che *il fenomeno della decoerenza non risolve il problema della misurazione*; per questo sono necessarie le considerazioni che abbiamo fatto riguardo alle proprietà caratteristiche che devono avere gli strumenti di misurazione.

Dal punto di vista matematico la decoerenza è connessa ad un'operazione di *traccia parziale*; attraverso questa operazione si perde una conoscenza dettagliata dello stato del sottosistema che si sta misurando.

Il *condizionamento* in Meccanica Quantistica ha caratteristiche simili all'operazione con lo stesso nome che è familiare dalla teoria della probabilità classica (dovuta lì a una informazione incompleta sul sistema complessivo) ma è presente in Meccanica Quantistica *anche se si ha un'informazione completa sul sistema complessivo*. Va infatti notato che, a differenza di quanto avviene in Meccanica Classica, in Meccanica Quantistica un'informazione completa dello stato di un sistema *non implica conoscenza completa dello stato delle sue parti*.

La soppressione delle informazioni contenute nello stato dell'ambiente dopo l'interazione potrebbe portare, secondo questa linea di pensiero, a scrivere delle equazioni approssimate per *alcune quantità misurabili relative al sottosistema in esame*. La struttura dell'interazione selezionerebbe le osservabili per le quali si possono ottenere dinamiche approssimate. La dinamica così ottenuta descriverebbe accuratamente il comportamento del sottosistema indipendentemente

dall'evoluzione dell'ambiente esterno \mathcal{E} per quasi tutte le configurazioni di quest'ultimo, con un errore trascurabile se l'interazione con l'ambiente esterno è significativa e sufficientemente prolungata (così che se l'errore fosse non trascurabile per una particolare configurazione, questo non inciderebbe sulla accuratezza complessiva). Torneremo brevemente su questo problema nel capitolo 6, discutendo la proprietà di Markov.

Grosso modo, il meccanismo di decoerenza si presenta in questo modo: lo stato Φ del sistema complessivo, oggetto osservato + ambiente esterno, è descritto da un vettore nello spazio di Hilbert complessivo \mathcal{H}_{tot} che può essere scritto come prodotto $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{ogg} \otimes \mathcal{H}_{amb}$ dello spazio di Hilbert con cui viene descritto l'oggetto osservato e dello spazio di Hilbert con cui viene descritto l'ambiente. Se si misura un osservabile A del sistema osservato (rappresentato quindi da un operatore in \mathcal{H}_{ogg}), la media dei risultati della misura sarà, secondo le leggi della Meccanica Quantistica $(\Phi, (A \otimes I)\Phi)$ dove abbiamo introdotto l'immersione naturale degli operatori su \mathcal{H}_{ogg} negli operatori su \mathcal{H}_{tot} . E se la hamiltoniana del sistema complessivo è H la misurazione a un tempo $t > 0$ darà il risultato

$$(\Phi, e^{itH}(A \otimes I)e^{-itH}\Phi). \quad 2.11$$

Non esisterà in generale un operatore K in $\mathcal{B}(\mathcal{H}_{ogg})$ tale che per tutte le osservabili $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_{ogg})$ si abbia per un generico stato Φ del sistema complessivo

$$(\Phi, e^{itH}(A \otimes I)e^{-itH}\Phi) = (\Phi, (e^{itK}Ae^{-itK} \otimes I)\Phi). \quad 2.12$$

Anche se lo stato Φ è rappresentato da un vettore $\phi \otimes \psi$ con $\phi \in \mathcal{H}_{ogg}$ e $\psi \in \mathcal{H}_{amb}$, nel corso del tempo questa rappresentazione non resta valida a causa dell'interazione sistema osservato-ambiente esterno.

Ci si può aspettare, se l'ambiente ha un numero N sufficientemente grande di gradi di libertà e la hamiltoniana di interazione ha opportune proprietà (ad esempio è lineare in A), che valga approssimativamente un teorema della media (teorema ergodico) e conseguentemente che per un'opportuna classe di osservabili (questa classe dipende dalle proprietà dell'interazione sistema osservato-ambiente) e per un'opportuna classe di stati iniziali Φ possa essere trovato un operatore K tale che per $t \geq t_0 > 0$

$$|(\Phi, e^{itH}(A \otimes I)e^{-itH}\Phi) - (\Phi, e^{itK}Ae^{-itK} \otimes I)\Phi)| \leq c_N, \quad \lim_{N \rightarrow \infty} c_N = 0. \quad 2.13$$

Il tempo t_0 è il tempo necessario al sistema complessivo per raggiungere una situazione di quasi completo intralacciamento del sistema osservato con l'ambiente esterno. Si ha in generale

$$(e^{-it_0H}\Phi, Ae^{-it_0H}\Phi) = \text{Tr}(\sigma_0 A) \quad 2.14$$

e quindi dopo un tempo in generale trascurabile lo stato del sistema \mathcal{S} è rappresentato da una matrice densità.

Se vale (2.14) lo stato del sistema risulta quindi, per un osservatore che misuri *solo alcune osservabili* che fanno riferimento a \mathcal{H}_{oss} , *indistinguibile* da uno stato rappresentato da matrici densità $\sigma(t)$ che si evolve secondo una hamiltoniana *effettiva* K . Se σ_0 ha dispersione trascurabile rispetto all'osservabile A e l'evoluzione secondo K preserva questa proprietà, l'osservabile A *appare essere* un osservabile classico.

La *coerenza* (che è alla base del principio di sovrapposizione) viene nascosta dalla mancanza di controllo dell'ambiente esterno.

Va sottolineato che questo schema descrittivo non è stato finora sviluppato in modo adeguato; solo casi particolari sono stati analizzati in modo rigoroso ed argomenti qualitativi sono stati dati in casi sufficientemente generali.

Argomenti qualitativi sono stati dati ad esempio per mostrare come la decoerenza di un sistema quantistico possa essere prodotta dall'interazione con un gran numero di particelle leggere, nell'ambito della teoria quantistica dello scattering, e che, in questo caso, le variabili di posizione del sistema macroscopico sono privilegiate. Una panoramica degli argomenti presentati si può vedere ad esempio in [Giu96] ed in [Hor06].

Argomenti sono stati dati anche per descrivere la decoerenza di un sistema quantistico immerso in un *bagno termico*, cioè interagente con un gran numero di particelle in equilibrio termodinamico a temperatura fissata. In questa direzione un approccio alla descrizione matematica della decoerenza è stato compiuto [BO03] nell'ambito della formulazione algebrica della Meccanica Quantistica, formulazione che descriveremo brevemente nei Capp. 3 e 4 utilizzando l'approssimazione in cui la dinamica del sottosistema osservato è descritta da un semigruppato markoviano.

Nonostante questi sviluppi, vi sono ancora punti oscuri riguardo alla formulazione matematica e al significato della decoerenza. Va sottolineato ancora che la teoria della decoerenza non risolve il problema della misurazione in Meccanica Quantistica; essa provvede un meccanismo attraverso il quale lo stato finale del sistema osservato può essere descritto come una distribuzione statistica classica, ma non provvede il meccanismo attraverso il quale uno specifico risultato viene ottenuto.

Dal punto di vista sperimentale sono stati fatti molti progressi nella descrizione del fenomeno della decoerenza e in particolare nello studio della sua relazione con l'interazione con l'ambiente esterno. Esperimenti molto raffinati sono stati compiuti, in particolare dal gruppo di S.Haroche alla Scuola Normale Superiore di Parigi. Un tipico esperimento è descritto su Nature (2007)¹

In quest'esperimento degli atomi di rubidio, inizialmente in uno stato di Rydberg circolare l di numero quantico 50 vengono immessi uno per volta in una cavità

¹S. Gleyzes, S. Kuhr, C. Guerlin, J. Bernu, S. Deléglise, U. Busk Hoff, M. Brune, J.M. Raymond, S. Haroche, Nature 446, (2007) 297-300.

aperta con pareti fatte di specchi di niobio (photon box) che può conservare per un tempo di 1 millisecondo fotoni di lunghezza d'onda prefissata (6 mm).

La cavità è preparata in uno stato quasi coerente del campo elettromagnetico (stato quasi classico); per questi stati vale una descrizione classica in termini di campo elettromagnetico; in particolare si può (approssimativamente) definire la *frequenza* della radiazione.

Uno stato coerente è una sovrapposizione *coerente* di stati di $1, 2, \dots, N, \dots$ fotoni con pesi statistici e fasi appropriati. Nell'esperimento si utilizzano stati con 7 - 9 fotoni, che approssimano in modo soddisfacente uno stato coerente (una configurazione del campo elettromagnetico classico con frequenza fissata).

Supponiamo che il campo sia preparato in uno stato (quasi) monocromatico e la corrispondente frequenza del campo sia risonante con la frequenza propria della transizione tra lo stato f del rubidio e un altro stato g . Attraversando la cavità l'atomo interagisce con il campo elettromagnetico mediante processi di emissione o assorbimento di fotoni. Come risultato lo stato complessivo del sistema diventa una sovrapposizione *coerente* di stati in cui l'atomo è nello stato f o nello stato g e il campo elettromagnetico non è più in uno stato coerente.

Non si può dunque parlare di stato definito dell'atomo e di stato definito (classico) del campo elettromagnetico. L'ambiente esterno in questo caso è rappresentato dalle pareti della cavità, con le quali interagiscono sia l'atomo che il campo elettromagnetico presente nella cavità.

Lo stato dell'atomo può essere monitorato mediante l'immissione nella cavità di un secondo atomo di rubidio, in uno stato atomico conosciuto. L'interazione tra i due atomi ha caratteristiche diverse a seconda che il primo atomo si trovi in uno stato f oppure g oppure in una sovrapposizione coerente di questi stati. L'apparato sperimentale permette di distinguere se il primo atomo si trova in uno stato puro o debba invece essere *descritto* mediante una miscela statistica., permette quindi di misurare la *decoerenza* indotta dall'interazione con l'ambiente esterno.

Il risultato dell'esperimento è stato che l'ammontare di decoerenza dipende dal ritardo con cui viene immesso il secondo atomo.

Chiameremo *tempo di decoerenza* τ_d^R il tempo dopo il quale la descrizione mediante miscela statistica *effettiva* produce un errore relativo di ordine 10^{-4} . I risultati dell'esperimento descritto brevemente qui sopra indicano che il tempo di decoerenza τ_d^R nel caso dell'atomo di rubidio è di ordine di grandezza di 0.1 millisecondi.

La situazione sperimentale che abbiamo descritto ricorda da vicino l'esperimento del gatto di Schrödinger sospeso in modo coerente tra stato di morte e stato di vita. Il secondo atomo rappresenta in questo caso un topo, che è immesso per saggiare se il gatto è vivo o morto. Nel caso di un atomo, la coerenza persiste per una frazione di millisecondo in presenza di un numero molto limitato

di fotoni (nel senso che dopo tale tempo la coerenza non può essere rilevata sperimentalmente).

Ci si può aspettare che, se fosse possibile progettare un esperimento in cui il gatto G si trova all'inizio in uno stato quantistico puro, sovrapposizione coerente di ψ_v (stato di gatto vivo) e ψ_m (gatto morto) e lo si facesse interagire con un ambiente esterno (quantistico) sarebbe molto minore di τ_G il tempo di decoerenza necessario a rendere lo stato del sistema indistinguibile da una miscela statistica degli stati di ψ_v e ψ_m (che descrive la probabilità che il gatto sia vivo o morto). Questo e altri esperimenti sono un'indicazione del fatto che quello che risulta controintuitivo in un ambiente su cui si ha poco controllo può risultare osservabile in un ambiente finemente controllato.

Tenuto conto della difficoltà di formulare matematicamente una teoria della decoerenza, e del conseguente stato di incompletezza a questo riguardo della Meccanica Quantistica, sembrerebbe naturale ritenere che l'aspetto probabilistico delle previsioni della Meccanica Quantistica fosse dovuto ad una incompleta conoscenza dello stato del sistema e che esistano *variabili nascoste* conoscendo il valore delle quali si potrebbero fare previsioni certe per qualunque successione di misurazioni.

In altre parole la Meccanica Quantistica metterebbe in luce solo un aspetto statistico dovuto all'incompleta conoscenza dello stato del sistema.

D'altra parte la Meccanica Quantistica non può essere sostituita da una teoria di *variabili nascoste* ingenua, che coinvolga solamente quantità osservabili.

Per la sua importanza concettuale, discuteremo in qualche dettaglio in Appendice 2A l'analisi del problema fatta da J.Bell, che ha studiato delle disuguaglianze relative alla misurazione di quantità associate a operatori che non commutano fra loro, effettuate da due osservatori indipendenti.

Le disuguaglianze di Bell sono soddisfatte in Meccanica Quantistica, sono state verificate sperimentalmente, ma sono incompatibili con una formulazione in cui l'incompletezza dell'informazione sullo stato del sistema sia la sola causa dell'aspetto probabilistico.

Le disuguaglianze di Bell dimostrano che non è possibile sostituire la Meccanica Quantistica con una teoria ingenua basata solo su variabili nascoste.

Daremo anche in Appendice 2B un breve cenno alla teoria di Bohm, una teoria che introduce punti materiali e relative variabili di posizione, e quindi variabili nascoste dalla formulazione che abbiamo dato della Meccanica Quantistica.

Questa teoria non è una teoria di variabili nascoste in senso stretto, perché contiene nei suoi assiomi oltre ai punti materiali, di cui individua le traiettorie nello spazio (classico) delle configurazioni (e che pertanto non sono più nascosti), anche una funzione d'onda $\psi(x, t)$ a valori complessi, definita sullo spazio delle configurazioni, che soddisfa l'equazione di Schrödinger e che determina il campo vettoriale (reale) che regge a sua volta le equazioni del moto dei punti materiali (che risultano quindi essere equazioni differenziali del primo ordine).

La funzione d'onda $\psi(t, x)$ (chiamata onda pilota nella formulazione originaria della teoria) non è associata allo stato del sistema elementare (che è descritto da un punto nello spazio delle configurazioni). Essa evolve secondo l'equazione di Schrödinger e $|\psi(t, x)|^2$ rappresenta la densità di probabilità che al tempo t il punto materiale considerato si trovi nella posizione x se si considera un insieme statistico (nel senso classico) di insiemi elementari.

D'altra parte ciascun sistema elementare si trova in ciascun istante in una posizione oggettiva. La figure di interferenza e di diffrazione (ad esempio nell'esperimento della doppia fenditura) sono in questa teoria effetti statistici dovuti al fatto che il moto di ciascun punto materiale è retto dal campo pilota, e che le traiettorie dei vari punti sono molto diverse se il campo pilota evolve secondo l'equazione di Schreodinger con potenziali (o condizioni al bordo) che sono diversi nel caso di condizioni sperimentali diverse (ad esempio se sono aperte tutte due le fenditure o se ne è aperta una sola.

Il campo vettoriale che determina il moto dipende infatti dalla forma dell'onda pilota, e più precisamente è costruito a partire dall'onda pilota con la formula che definisce in Meccanica Quantistica la corrente associata alla funzione d'onda $\psi(x; t)$ (ed è quindi definito a meno della divergenza di un campo scalare). Questo campo vettoriale dipende dal tempo ed ha la proprietà (per costruzione) che se un insieme di punti che si muovono lungo le sue traiettorie ha all'istante iniziale la distribuzione di densità $|\psi(x, 0)|^2$ allora al tempo t la distribuzione dei punti ha densità $|\psi(x, t)|^2$ dove $\psi(x, t)$ è la soluzione dell'equazione di Schrödinger con dato iniziale $\psi(x, 0)$.

Ciò rende conto del fatto che, per quanto riguarda le osservabili che dipendono solo dalla posizione la teoria di Bohm fa le stesse previsioni della Meccanica Quantistica.

La teoria di Bohm si presenta come una teoria con caratteristiche in parte simili alla Meccanica Classica. Tutte le caratteristiche quantistiche (interferenza, principio di sovrapposizione) vengono ascritte alla funzione d'onda, una funzione a valori complessi che non può essere misurata direttamente ma solo attraverso gli effetti del campo vettoriale che è costruito a partire da essa. In questo senso la teoria del campo guida non è una teoria di variabili classiche nascoste.

APPENDICE 2A: LE DISUGUAGLIANZE DI BELL

Analizziamo in questa appendice le *disuguaglianze di Bell* riguardanti i valori ottenibili quando due osservatori (detti nel seguito, seguendo una prassi comune, Alice e Bob) fanno ripetute osservazioni su un sistema fisico.

Queste disuguaglianze non sono verificate da alcun sistema classico che attribuisca gli aspetti probabilistici della Meccanica Quantistica solamente ad una distribuzione di probabilità (incognita) di dati iniziali.

Consideriamo per semplicità un sistema quantistico descritto in uno spazio di

Hilbert \mathcal{H} di dimensione (complessa) 4. Ad esempio un sistema quantistico composto da due particelle identiche di spin $\frac{1}{2}$ di cui trascuriamo gli aspetti spaziali.

Indichiamo con S_k , $k = 1, 2, 3$ gli operatori (matrici 2×2) che vengono associati alla misurazione dello spin in direzione k . Questi operatori soddisfano le relazioni di commutazione

$$[S_i, S_k] = \sum_h \epsilon_{i.k,h} S_h$$

dove $\epsilon_{i.k,h}$ è il simbolo totalmente antisimmetrico di Ricci. In generale indichiamo con S_x , con x vettore unitario di R^3 , la combinazione lineare degli S_h con coefficienti i coseni direttori di x (S_x è il generatore delle rotazioni attorno all'asse x nella rappresentazione proiettiva del gruppo delle rotazioni indotto in $\mathcal{K} \equiv C^2$ dalla rappresentazione unitaria del gruppo $SU(2)$). Lo spazio di Hilbert in cui viene descritto il sistema è

$$\mathcal{H} = \mathcal{K} \otimes \mathcal{K}.$$

Indichiamo con $|+ \rangle$ e $|-\rangle$ la base data dagli autostati dell'operatore σ_3 (che viene associato alla misurazione dello spin in direzione dell'asse 3). Supponiamo che Alice e Bob abbiano entrambi a disposizione lo stato rappresentato in \mathcal{H} dal vettore

$$\psi \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle]. \quad 2A.1$$

Consideriamo un esperimento di misura in cui Alice misura la componente dello spin nella direzione x e Bob quella nella direzione y . L'operatore corrispondente a questa misurazione è

$$S_x \otimes S_y.$$

Il valore di aspettazione di questo operatore nello stato ψ è

$$(\psi, S_x \otimes S_y \psi) = -(x, y),$$

dove (x, y) indica il prodotto scalare tra i vettori x e y . Se Alice sceglie di fare due misurazioni nelle direzioni x_1 e x_2 e Bob sceglie di fare due misurazioni nelle direzioni y_1 e y_2 si otterranno quattro risultati possibili corrispondenti alla matrice

$$(\psi, S_{x_i} \otimes S_{y_j} \psi) = -(x_i, y_j) \quad i, j = 1, 2.$$

Scegliendo i quattro vettori (unitari) nel modo seguente

$$x_1 = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right), \quad x_2 = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right) \quad y_1 = (0, -1, 0), \quad y_2 = (1, 0, 0)$$

le corrispondenti aspettative quantistiche soddisfano

$$\begin{aligned} & (\psi, [S_{x_1} \otimes S_{y_1} + S_{x_1} \otimes S_{y_2} + S_{x_2} \otimes S_{y_1} - S_{x_2} \otimes S_{y_2}] \psi) \\ &= -\frac{1}{2}(x_1, y_1) - \frac{1}{2}(x_1, y_2) - \frac{1}{2}(x_2, y_1) + \frac{1}{2}(x_2, y_2) = \sqrt{2}. \end{aligned} \quad 2A.2$$

Supponiamo ora che esista una teoria di variabili nascoste che sia *locale*, nel senso che le direzioni che sceglie Alice non dipendono da quelle che sceglie Bob.

La teoria associa al sistema fisico un parametro λ il cui valore determina il risultato della misura. Sia $X_i(\lambda)$ il valore che ottiene Alice quando fa una misurazione nella direzione x_i e il parametro ha il valore λ . Per definizione $X_i(\lambda) = \pm 1$. Similmente sia $Y_j(\lambda)$ il valore che ottiene Bob. Se la teoria di variabili nascoste riproduce le correlazioni quantistiche tra i vari risultati di misura ci aspettiamo che sia

$$E(X_i Y_j) = \int X_i(\lambda) Y_j(\lambda) d\mu(\lambda) = (\psi, S_{x_i} \otimes S_{y_j} \psi) = -(x_i, y_j)$$

dove abbiamo indicato con μ la misura di probabilità nello spazio di variabili nascoste e con E l'aspettazione rispetto a questa misura.

Notiamo ora che, poiché $X_i(\lambda)$ e $Y_j(\lambda)$ assumono solo i valori ± 1 , per ogni valore di μ vale la disuguaglianza

$$\frac{1}{2}X_1Y_1 + \frac{1}{2}X_1Y_2 + \frac{1}{2}X_2Y_1 - \frac{1}{2}X_2Y_2 \leq 1. \quad 2A.3$$

Indipendentemente dalla forma della misura di probabilità μ si ha allora

$$\frac{1}{2}E(X_1Y_1) + \frac{1}{2}E(X_1Y_2) + \frac{1}{2}E(X_2Y_1) - \frac{1}{2}E(X_2Y_2) \leq 1. \quad 2A.4$$

Un semplice confronto tra (2A.2) e (2A.3) mostra che il risultato quantistico non può essere ottenuto con una teoria di variabili nascoste locale. Notiamo che le direzioni scelte in 2A.2 massimizzano l'espressione algebrica

$$g(a, b, c, d) \equiv (a, b) + (a, c) + (d, a) - (d, c)$$

dove a, b, c, d sono vettori unitari in R^3 .

È stato verificato sperimentalmente² che, nelle condizioni suggerite da (2A.1), il risultato per la quantità (misurabile) che abbiamo indicato con $g(a, b, c, d)$ è un numero strettamente maggiore di 2, entro i limiti della precisione sperimentale, e recenti esperimenti condotti con tecniche più raffinate, hanno dato un valore vicino a $2\sqrt{2}$, come previsto dalla Meccanica Quantistica.

²Come riportato in A. Aspect, P. Grangier e G. Roger, Phys. Rev. Letters 49 (1982) 91.

È interessante vedere quale forma assume il confronto tra la Meccanica Quantistica e una teoria di variabili nascoste locali quando ci si limita a considerare il caso in cui sempre la direzione in cui misura lo spin Alice sia la stessa di quella di Bob.

In Meccanica Quantistica si avrà sempre $(\psi, S_{x_i} \otimes S_{x_i} \psi) = -1$. Nella teoria di variabili nascoste questo implica che $X_i(\lambda) = -Y_i(\lambda)$ per quasi tutti i valori di λ . Pertanto

$$E(X_i X_j) = -E(X_i Y_j) = (x_i \cdot x_j) \quad 2A.5$$

D'altra parte per variabili che possono assumere solamente i valori ± 1 vale la relazione

$$-X_1 X_2 - X_1 X_3 - X_2 X_3 \leq 1$$

e quindi per ogni misura μ vale

$$-E(X_1 X_2) - E(X_1 X_3) - E(X_2 X_3) \leq 1. \quad 2A.6$$

Prendendo x_1, x_2, x_3 coplanari e formanti tra loro un angolo di 120° si ottiene da 2A.5

$$-(x_1, x_2) - (x_2, x_3) - (x_3, x_1) = \frac{3}{2}. \quad 2A.7$$

Da un confronto di (2A.6) con (2A.7) risulta ancora una volta la incompatibilità della Meccanica Quantistica con teorie delle variabili nascoste locali.

Conviene notare che nella definizione dello stato ψ in ciascuno dei due addendi il primo simbolo si riferisce ad Alice ed il secondo a Bob. Quindi lo stato è antisimmetrico rispetto allo scambio del nome Alice con Bob (è uno stato di singoletto). L'unicità di questo stato implica che si può anche scrivere

$$\psi \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle' \otimes |-\rangle' - |-\rangle' \otimes |+\rangle'], \quad 2A.8$$

dove $|\pm\rangle'$ è l'autostato all'autovalore ± 1 di σ_ξ dove ξ è una qualunque direzione in R^3 . Da questo è facile dedurre che se Alice e Bob effettuano una misurazione nello stato ψ dello spin in una stessa direzione, la misurazione dà il risultato che gli spin vengono da loro trovati orientati sempre *in versi opposti*. Se ne conclude anche che l'aver la componente dello spin in una direzione a scelta ad arbitrio non è una proprietà né di Alice né di Bob.

Nota 2.7

Questa correlazione è dovuta al fatto che lo stato ϕ è *intrallacciato* (*entangled*).

In generale un stato ϕ di un sistema quantistico definito in $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_M$ viene detto *entangled* se il proiettore ortogonale su ϕ non può essere scritto nella forma

$$P_\phi = \sum_m c_m P_{\psi_m}, \quad \psi_m \in \mathcal{H}_m, \quad c_m > 0, \quad \sum c_m = 1. \quad 2A.9$$

Nel caso di Alice e Bob si ha $M = 2$ e il sistema si dice essere *bipartito*.



Gli stati intralacciati hanno la proprietà che se si calcola il valor medio dei risultati della misurazione su alcune delle osservabili si perde informazione sui risultati delle misurazioni di altre osservabili sebbene tutte le osservabili considerate commutino tra di loro.

Senza tentare qui una descrizione generale di questa proprietà della Meccanica Quantistica, la esemplifichiamo nel caso particolare dello stato 2A.1.

Scegliamo per osservabile per cui vogliamo determinare la probabilità che si ottenga uno specifico valore l'osservabile associato alla misurazione da parte di Alice dello spin S_{x_1} e scegliamo di mediare sui risultati della misurazione di $I \otimes S_{y_1}$ (che rappresenta l'osservabile associato alla misura effettuata da Bob nella direzione 1).

Nello stato ψ la probabilità di ottenere uno per $I \otimes S_{y_1}$ è uguale alla probabilità di ottenere -1 (questi sono i due soli valori possibili). Lo stato delle nostre conoscenze possibili sul sistema di Alice è dunque dato dallo stato σ che si ottiene da P_ψ facendo una traccia parziale rispetto allo spazio \mathcal{K}_2

È facile vedere che $\sigma = \frac{1}{2}I$ corrisponde ad uno stato non puro semisomma dei proiettori su due qualunque vettori ortonormali in \mathcal{K}_1 . Ne segue che se mediamo sui risultati della misura dello spin di Bob in una qualunque direzione perdiamo tutte le informazioni riguardo al valor medio dello spin di Alice in ogni direzione. Naturalmente questo è un caso estremo, lo stato che abbiamo scelto è massimamente intralacciato. Ma va tenuto presente che tutti gli stati puri di sistemi bipartiti presentano questa proprietà quando i due sistemi componenti sono messi in interazione tra loro. La perdita di informazione su una parte del sistema se non si misura l'altra parte è un fenomeno inevitabile in Meccanica Quantistica. In questo caso non si può considerare il secondo sistema come strumento di misura.

Questo indica che non tutte le interazioni di un sistema devono essere considerate atti di misurazione.

APPENDICE 2B: LA TEORIA DELL'ONDA PILOTA DI DE BROGLIE

Come abbiamo visto nel capitolo 1 la teoria dell'onda pilota riguarda un sistema di N particelle ovvero, come vengono chiamate da de Broglie, *frammenti di energia*, che si muovono nello spazio delle configurazioni sotto l'influenza di un'onda *pilota*. Questa è un funzione a valori complessi $\Phi(X, t)$, $X = x_1, \dots, x_N$, $x_i \in R^3$ che determina un campo vettoriale

$$\Xi(X, t) \equiv \Im \left(\frac{\bar{\Phi}(X, t) \nabla \Phi(X, t)}{|\Phi(X, t)|^2} \right) \quad 2B.1$$

e un equazione differenziale del prim'ordine nel tempo $\frac{dX}{dt} = \Xi(X, t)$.

La teoria fu elaborata da de Broglie e venne presentata al Congresso Solvay nel 1927; sebbene apprezzata da Einstein e Lorenz venne oscurata dal successo della nuova meccanica di Born e Heisenberg e di quella di Schrödinger. La teoria venne raccolta da D.Bohm nel 1952 ed è stata portata a livello di teoria matematica matura ad opera di D. Dürr, S.Goldstein, N. Zanghì e collaboratori³.

La teoria dà, per costruzione, gli stessi risultati della Meccanica Quantistica per quanto riguarda la misurazione di funzioni delle sole variabili di posizione. Questo può essere visto notando che la formula che dà il campo vettoriale nella teoria dell'onda pilota è identica alla formula che dà la corrente come funzione di $\Phi(X, t)$. D'altra parte, nella teoria dell'onda pilota, le sole osservabili sono funzioni della posizione (ricordare che i modelli specificano anche quali misurazioni siano possibili).

La *differenza concettuale* tra le due teorie sta nel fatto che, mentre in Meccanica Quantistica $|\Phi(X, t)|^2$ rappresenta la densità di probabilità che si trovi la configurazione X quando si fa una misura di posizione al tempo t , la teoria dell'onda pilota afferma che $|\Phi(X, t)|^2$ è la densità di probabilità (classica) che le N particelle si trovino nella configurazione X al tempo t *indipendentemente dall'esistenza di un osservatore*.

La descrizione dei fenomeni a scala atomica in termini di punti materiali è naturalmente suggerita dall'effetto fotoelettrico; d'altra parte come abbiamo visto vi erano anche aspetti che portavano nella direzione di fenomeni ondulatori. Una via d'uscita venne tentata da Einstein, che cercò di attribuire gli effetti di interferenza riguardanti i fotoni all'effetto del campo elettromagnetico considerato come campo guida. Questa linea di pensiero si dimostrò impraticabile per i fotoni, ma fu ripresa per gli elettroni da L.de Broglie, e poi da D. Bohm. Quest'ultimo arrivò a una forma dell'equazione per l'onda pilota scrivendo la funzione d'onda, soluzione dell'equazione di Schrödinger per N particelle, in forma polare

$$\Phi(X, t) \equiv R(X, t)e^{\frac{i}{\hbar}S(X, t)}, \quad X \in R^{3N}$$

dove S e R sono funzioni a valore reale. L'equazione di Schrödinger si riscrive allora come sistema di due equazioni di evoluzione: l'equazione di continuità per la densità $\rho \equiv R^2$ e per la funzione S un'equazione tipo Hamilton-Jacobi che differisce dall'usuale equazione della dinamica hamiltoniana per l'aggiunta al potenziale di un termine (denominato da D.Bohm *potenziale quantistico*)

$$U(X) = - \sum_n \frac{\hbar^2}{2m_n} \frac{1}{R(X)} (\Delta_n R)(X). \quad 2B.2$$

Quest'equazione ha una singolarità per $R(X) = 0$. L'esistenza di soluzioni regolari è stata dimostrata da [DGZ92, DT09]. Notare che $U(X)$ è di ordine

³Buoni riferimenti bibliografici sono [DGZ92, DT09].

due in \hbar e che quindi al primo ordine in \hbar le equazioni soddisfatte sono quelle di Hamilton-Jacobi).

Nella teoria dell'onda pilota il potenziale quantistico è un ente estraneo alla teoria che può essere artificialmente introdotto se si desidera introdurre un concetto di *forza*. Nella maggior parte dei testi di Fisica teorica e in gran parte degli articoli di Ricerca soprattutto in Stato Solido si cita il potenziale quantistico come correzione quantistica e la corrispondente teoria viene detta *teoria bohmiiana*.

Quando la funzione d'onda viene scritta in forma polare l'equazione per le particelle diventa

$$\frac{dx_n}{dt} \equiv \frac{1}{m_n} \frac{\partial S}{\partial x_n}, \quad 2B.4$$

dove m_n è la massa della n^{ma} particella. In questa formulazione la teoria di Bohm presenta alcune difficoltà. Anzitutto introduce un'equazione non-lineare (l'equazione di Hamilton- Jacobi) al posto di un'equazione lineare (l'equazione di Schrödinger) e introduce un potenziale quantistico complicato e di difficile interpretazione.

Dal punto di vista matematico la difficoltà maggiore sta nel fatto che il campo vettoriale è singolare nei punti in cui la funzione $\Phi(X, t)$ è zero, e queste singolarità dipendono dal tempo. Queste difficoltà non sono insormontabili poiché *per costruzione le configurazioni singolari hanno probabilità zero, ma hanno contribuito ad allontanare dalla teoria di Bohm ricercatori con un indirizzo matematico*.

Nei primi anni novanta il problema *dell'esistenza e unicità delle soluzioni* di (2B.4) fu risolto da Dürr, Goldstein e Zanghì ed è a questo punto che inizia la formulazione moderna della teoria dell'onda pilota. In questa formulazione vengono introdotte come quantità primitive la posizione

$$x_1(t), \dots, x_N(t), \quad x_n \in R^3, \quad n = 1, \dots, N$$

dei punti materiali e l'onda pilota $\Phi(x_1, \dots, x_N; t)$, una funzione a valori complessi (o a valori spinori) definita nello spazio della configurazioni delle N particelle.

La teoria viene definita attraverso le sue *equazioni del moto*

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = H \Phi \quad 2B.5$$

$$\frac{dx_n}{dt} = \frac{\hbar}{m_n} \Im \left(\frac{\bar{\Phi} \nabla_n \Phi}{|\Phi|^2} \right) (x_1, \dots, x_N) \quad 2B.6$$

dove H è la hamiltoniana (non relativistica) del problema. In presenza di campi magnetici, il gradiente in (2B.6) deve essere inteso nel senso della derivata covariante.

L'equazione (2B.6) è compatibile con l'invarianza del sistema per trasformazioni di Galileo e per inversione temporale. È in un certo senso la più semplice (per ordine di derivate parziali coinvolte) che garantisce la completa equivalenza del sistema (2B.5), (2B.6) con la Meccanica Quantistica per quanto riguarda la misura di posizione. Come abbiamo già visto, questa equivalenza risulta immediatamente dal fatto che il campo vettoriale in (2B.6) è proporzionale a J/ρ , il rapporto tra la corrente e la densità in Meccanica Quantistica.

Inoltre risulta immediatamente dall'equazione di continuità quantistica

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0 \quad 2B.7$$

che se al tempo $t = 0$ la configurazione del sistema è casuale, con legge di probabilità $|\Phi(x)|^2$, questo sarà vero ad ogni istante t se la $\Phi(x, t)$ soddisfa l'equazione di Schrödinger con dato iniziale $\Phi(x)$.

Come notato l'equazione (2B.6) non è priva di difficoltà, la principale essendo quella che il campo vettoriale risulta divergente nei punti in cui la funzione $|\Phi(x)|^2$ è nulla; in un intorno di questi punti l'equazione deve essere trattata con cura. Goldstein, Dürr, Zanghì e collaboratori hanno eseguito una trattazione matematicamente molto accurata di questa e altre difficoltà connesse alla (2B.6) e questo ha reso interessante dal punto di vista matematico la teoria dell'onda pilota.

L'interesse epistemologico consiste nel fatto che la teoria descrive il moto di punti materiali nello spazio delle configurazioni classico; d'altra parte il campo vettoriale (del prim'ordine) che descrive il moto è prodotto da una funzione che soddisfa l'equazione di Schrödinger, e la non-località, caratteristica di quest'equazione, si riflette nel fatto che non è possibile scrivere delle equazione per i punti materiali che coinvolgano solo le coordinate dei punti e *siano locali*. Questo è consistente con il fatto, già visto con le disuguaglianze di Bell, che non può esistere una teoria locale di variabili nascoste che coinvolga solo coordinate in uno spazio esteso.

La teoria dell'onda guida descrive il risultato dell'esperienza delle due fenditure facendo un'analisi accurata delle traiettorie corrispondenti ad ogni dato iniziale (per l'unicità delle soluzioni del sistema (2B.5), (2B.6) due traiettorie non si possono intersecare) e dimostrando che partendo da dati iniziali uniformemente distribuiti si produce una distribuzione di probabilità finale che presenta i massimi e minimi trovati sperimentalmente (e attribuiti in Meccanica Quantistica a fenomeni di interferenza delle funzione d'onda generate dalle due fenditure).

D'altra parte se si modifica l'evoluzione dell'onda guida per azione di agenti esterni (ad esempio la chiusura di una delle due fenditure) si modifica di conseguenza il campo vettoriale e quindi le traiettorie, rendendo così conto dell'assenza di frange d'interferenza nel caso in cui solo una delle fenditure sia aperta.

La teoria dell'onda guida descrive il moto di punti materiali, che rappresentano il solo sistema direttamente accessibile alle misurazioni. Le eventuali interazioni del sistema con elementi esterni, anche nel caso di misurazioni, alterano l'onda guida e le equazioni a cui soddisfa e hanno quindi un'efficacia indiretta sul moto dei punti materiali. Notare che il campo vettoriale dipende in modo complicato dalla funzione d'onda di Schrödinger che lo determina.

Questo può rendere difficile il determinare la forma dell'onda guida, e può spostare alla dimensione dello spazio in cui essa è definita il problema della misurazione e in generale il problema di costruire onde pilota che non risentano di tutto il sistema esterno. Se si riesce a determinare in funzione del tempo quest'onda guida, le traiettorie dei punti materiali risultano univocamente determinate. In questo contesto può essere problematica la giustificazione della regola di Born *come distribuzione iniziale dei punti materiali* (anziché, come avviene nelle formulazione tradizionale della Meccanica Quantistica, della densità di probabilità che, in *una misurazione di posizione*, si ottengano valori in un determinato intervallo). Si noti ad esempio che in corrispondenza a tutti gli stati legati non degeneri il campo vettoriale pilota è nullo (la funzione d'onda può essere scelta reale) e conseguentemente *i punti rappresentativi sono fermi*.

Ancora ad esempio, l'elettrone nel suo stato fondamentale all'interno dell'atomo di idrogeno, considerato come sistema isolato, corrisponde ad un unico punto materiale, in una posizione la cui distribuzione di probabilità (tra tutti gli atomi di idrogeno) è data da $|\psi_0(x)|^2$ dove ψ_0 è la funzione d'onda dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno in Meccanica Quantistica.

Non discuteremo oltre la teoria dell'onda guida; dettagli possono essere trovati ad esempio in [Ber95] e [DT09]. Notiamo solo che questa teoria non rappresenta una semplificazione dal punto di vista computazionale (per ottenere risultati da confrontare con il dato sperimentale deve essere risolta l'equazione di Schrödinger e inoltre deve essere risolta l'equazione differenziale ordinaria data dal campo vettoriale).

Dal punto di vista concettuale, ha il vantaggio di essere totalmente deterministica e di introdurre come osservabili solamente le posizioni dei punti materiali evitando quindi i problemi connessi alla misurabilità (anche gli apparati di misura sono considerati costruiti con punti materiali). Il punto debole della teoria è nell'argomentare l'origine della distribuzione di probabilità (nel senso classico) dei punti materiali. Queste difficoltà sono in ultima analisi di natura simile a quelle che si incontrano cercando di mettere in relazione la Termodinamica con la Meccanica Statistica.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [Ber95] K. Berndl, M. Daumer, D. Dürr, S. Goldstein, *A survey of bohmian mechanics*, Nuovo Cimento B 110 (1995) 737-750.
- [BO03] P. Blanchard, R. Olkiewicz, Rev. Math. Phys. 15 (2003) 217-243.
- [DGZ92] D. Dürr, S. Goldstein, N. Zanghì, J. Stat. Phys. 67 (1992) 843-907.
- [DT09] D. Dürr, S. Teufel, *Bohmian mechanics*, Springer 2009.
- [Giu96] D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch, I. Stamatescu, H. Zeh, *Decoherence and the appearance of classical world in quantum theory*, Springer 1996.
- [Hep72] K. Hepp, Helvetica Phys. Acta 45 (1972) 237.
- [Hor06] K. Hornberger, *Introduction to decoherence theory*, arXiv:quantum-ph/0612118.
- [Kam88] N. van Kampen, Physica A 153 (1988) 97.
- [Mot29] N. Mott, *The wave mechanics of α -ray tracks*, Proc. Royal Soc. 124 (1929) 375-380.
- [Sew05] G. Sewell, Rep. Math. Phys. 56 (2005) 271.

CAPITOLO 3
DINAMICA QUANTISTICA. AUTOMORFISMI. MOTO LIBERO.
PERTURBAZIONI LIMITATE. OLONOMIA E FASE GEOMETRICA

Abbiamo notato che in Meccanica Quantistica il ruolo delle funzioni reali limitate sullo spazio della fasi viene assunto dagli operatori simmetrici limitati e il ruolo delle funzioni positive di classe L^1 viene assunto dagli operatori positivi di classe traccia.

Se σ è un tale operatore, con $\text{Tr } \sigma = 1$, ed A è l'operatore che rappresenta l'osservabile a , la media dei risultati ottenuti dalle misurazioni di a nello stato rappresentato da σ è $\text{Tr}(\sigma A)$. Gli stati così definiti, sia in Meccanica Classica che in Meccanica Quantistica, sono stati normali (il valore assunto dall'estremo superiore di una successione crescente di osservabili coincide con l'estremo superiore dei valori assunti sugli elementi della successione).

Utilizziamo questa corrispondenza per definire l'evoluzione in Meccanica Quantistica. Ricordiamo che in Meccanica Classica la dinamica è data da un campo vettoriale $f(z)$

$$\dot{z} = f(z) \tag{3.1}$$

e l'evoluzione di funzioni continue G è data da

$$G_t(z) = G(\phi_t(z)) \tag{3.2}$$

dove $\phi_t(z)$ è la traiettoria (la soluzione di (3.1)), che supporremo per semplicità essere definita per ogni dato iniziale z e per ogni tempo t . Per funzioni differenziabili la (3.2) è equivalente a

$$\frac{dG}{dt} = f \cdot \nabla G. \tag{3.3}$$

La (3.2) può essere estesa per dualità anche a misure

$$t \rightarrow \phi_t^*(\mu), \quad \phi_t^*(\mu) \equiv \mu(G_t) \tag{3.4}$$

e la forma differenziale (debole) di (3.3) risulta

$$\frac{d\mu_t(G)}{dt} = \frac{d}{dt}\mu(G_t). \tag{3.5}$$

Nel caso in cui la misura μ sia assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue, con densità ρ , la (3.5) assume la forma

$$\frac{d\rho_t}{dt} = -\operatorname{div}(f\rho_t). \quad 3.6$$

Nel caso di dinamica Hamiltoniana con Hamiltoniana H si ha

$$\dot{z} = JdH, \quad z \in R^{2n},$$

dove J è la matrice simplettica, e

$$\frac{dG}{dt} = f \cdot \nabla G \equiv \{H, G\} \quad 3.7$$

dove $\{ , \}$ è la parentesi di Poisson associata a J . L'applicazione

$$G \mapsto \{H, G\} \quad 3.8$$

definisce una derivazione, poiché

$$\{H, FG\} = \{H, F\}G + F\{H, G\}$$

ed è una *-derivazione (preserva la coniugazione complessa) se H è una funzione reale. Essa non è definita su tutte le funzioni ma solamente su quelle differenziabili.

L'evoluzione (3.2) in Meccanica Classica costituisce *un gruppo ad un parametro di automorfismi* dell'algebra commutativa C^0 (le funzioni continue) e anche dell'algebra commutativa L^∞ (nel senso che ne preserva la topologia e la struttura algebrica).

Per cercare di sviluppare una formulazione per la dinamica quantistica in analogia con quella per la dinamica classica dobbiamo analizzare gli automorfismi dell'algebra delle osservabili e degli stati, mentre per determinare l'analogo di equazioni differenziali le cui soluzioni siano tali automorfismi dobbiamo studiare le sottoalgebre che vogliamo fare corrispondere alle funzioni di classe C^1 . Inoltre, se vogliamo fare una corrispondenza con le equazioni di Hamilton, dobbiamo studiare la struttura delle derivazioni definite su questa sottoalgebra di osservabili, e possibilmente trovare una struttura analoga alle parentesi di Poisson.

Abbiamo visto che è plausibile far giocare il ruolo delle funzioni misurabili agli operatori limitati $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} .

Per analogia con il caso classico chiameremo *derivazione* su $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ un'operazione lineare δ che soddisfa la regola di Leibnitz

$$\delta(A B) = \delta(A) B + A \delta(B), \quad A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}).$$

Diremo che si tratta di una *-derivazione se preserva la coniugazione hermitiana (tratteremo più in dettaglio le derivazioni di $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ nel cap. 4 dedicato a una breve

introduzione alle C^* -algebre). In questo contesto abbiamo già citato l'importante teorema, dimostrato da Dirac nel caso finito dimensionale

Teorema 3.1 (Dirac)

Sia δ una $*$ -derivazione definita su tutto $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ continua nella topologia della norma (cioè esiste una costante positiva c per cui vale $|\delta(B)| \leq c|B|$). Allora esiste unico (a meno di una costante additiva) un operatore limitato simmetrico A tale che sia

$$\delta_A(B) = i[A, B] \quad \forall B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}). \quad 3.9$$

◇

Dirac ha dimostrato questo teorema nel caso in cui \mathcal{H} sia finito-dimensionale (e quindi $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ sono le matrici $N \times N$ per qualche $N < \infty$). Daremo una dimostrazione di questo importante teorema nel cap 4, estendendolo, sotto opportune condizioni, al caso in cui la $*$ -derivazione è definita su un insieme denso di $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ e continua nella topologia debole. In quel capitolo vedremo che tale risultato vale anche per strutture più generali (C^* -algebre).

In questo capitolo associamo gruppi ad un parametro di automorfismi a derivazioni e a corrispondenti operatori (in generale illimitati).

Sulla base dell'analogia con la dinamica classica e tenendo presente il teorema di Dirac possiamo aspettarci che le equazioni della dinamica quantistica abbiano la forma

$$i \frac{dB}{dt} = [H, B] \equiv \delta_H(B). \quad 3.10$$

La soluzione è formalmente

$$B(t) = e^{-itH} B(0) e^{itH}. \quad 3.11$$

Un calcolo facile (notare se H è un operatore limitato l'esponenziale e^{-itH} può essere definito dalla serie convergente della funzione esponenziale) permette di vedere che se H è hermitiano e limitato allora $U_H(t) \equiv e^{itH}$ soddisfa

$$i \frac{dU_H(t)}{dt} = HU_H(t) \quad 3.12$$

ed è un gruppo di operatori unitari (continuo in norma nel parametro t). Se H non è limitato la (3.12) va trattata con più cura e richiede che H sia autoaggiunto.

L'evoluzione può essere definita per dualità sugli stati normali, e quindi sui proiettori e sulle matrici densità. Si ha

$$\sigma_t(A) = \sigma(A_t), \quad A_t = U_H(-t) A U_H(t). \quad 3.13$$

Sostanziamo queste considerazioni studiando, sulla base degli Assiomi 1 e 2, trasformazioni dell'insieme degli stati quantistici e dell'algebra delle osservabili.

Definizione 3.1 – Automorfismi di Wigner

Sia \mathcal{P} la collezione dei proiettori ortogonali di dimensione uno nello spazio di Hilbert \mathcal{H} . Un automorfismo di Wigner è un'applicazione lineare α , *continua nella topologia della traccia*, tale che per ogni coppia $P_1, P_2 \in \mathcal{P}$ si abbia

$$\text{Tr}(P_1 P_2) = \text{Tr}(\alpha(P_1) \alpha(P_2)). \quad 3.14$$

◇

Nota 3.1

Poiché $\text{Tr}(P_\phi P_\psi) = |\langle \phi, \psi \rangle|^2$, la (3.14) rappresenta la condizione che le probabilità di transizione sono invarianti rispetto alla trasformazione descritta da α .

♣

Per gli automorfismi di Wigner vale il seguente importante teorema, dimostrato da Wigner [Wig59].

Teorema 3.2 (Wigner I)

Se α è un automorfismo di Wigner, allora esiste unico (a meno di un fattore di fase) un operatore U_α , unitario o antiunitario, tale che

$$\alpha(P) = U_\alpha^* P U_\alpha. \quad 3.15$$

◇

Daremo in Appendice una dimostrazione elementare di questo teorema, dovuta a V. Bargmann. Ulteriori approfondimenti sul tema degli automorfismi in Meccanica Quantistica si possono trovare in [6].

Nota 3.2

Ricordiamo che un operatore è antiunitario se è antilineare e soddisfa $U^* U = U U^* = I$. Se U e V sono antiunitari, il loro prodotto UV è unitario. In particolare se un gruppo continuo è composto da operatori ciascuno dei quali è unitario o antiunitario, allora si tratta di un gruppo di operatori unitari.

♣

Consideriamo un gruppo continuo ad un parametro di automorfismi di Wigner α_t . Per costruzione gli operatori U_{t+s} e $U_t U_s$ inducono lo stesso automorfismo. Pertanto per il teorema di Wigner esiste una funzione continua $\xi(t, s)$ tale che

$$U_{t+s} = e^{i\xi(t,s)} U_t U_s. \quad 3.16$$

Se tutti gli operatori sono unitari, dalla proprietà associativa segue che la funzione ξ deve soddisfare la proprietà (di cociclo)

$$\xi(\tau, t) + \xi(t + \tau, s) = \xi(t, s) + \xi(\tau, t + s). \quad 3.17$$

Poiché ciascuna delle U_t è definita a meno di un fattore di fase, è sempre possibile modificare la funzione ξ nel modo seguente

$$\xi(t, s) \rightarrow \xi(t, s) - \beta(t + s) + \beta(t) + \beta(s), \quad 3.18$$

dove $\beta(t)$ è una funzione continua (nella notazione della teoria dei cocicli, questa è un'operazione di cobordo). Quindi se esiste una funzione $\gamma(t)$ tale che sia

$$\xi(t, s) = \gamma(t + s) - \gamma(t) - \gamma(s), \quad 3.19$$

si può scegliere un rappresentante U_t un modo che sia

$$U_{t+s} = U_t U_s. \quad 3.20$$

Vedremo in seguito (teorema di Wigner) che una funzione $\gamma(t)$ che soddisfa (3.19) esiste sempre se il gruppo di automorfismi α_t è continuo in t . Discuteremo anche brevemente in seguito il caso in cui si ha un gruppo di automorfismi α_g , $g \in G$, dove G è un gruppo di Lie, e in particolare le condizioni sotto le quali è possibile dimostrare l'esistenza di una rappresentazione continua di G mediante operatori unitari U_g tali che si abbia $\alpha_g(P) = U_g P U_g^*$.

In generale, questo sarà il caso per gruppi di automorfismi che siano isomorfi ad un gruppo semisemplice, ad esempio il gruppo delle trasformazioni rigide dello spazio R^d e il gruppo di Lorentz (ma non il gruppo di Galilei, che ammette come sottogruppo abeliano invariante il gruppo ad un parametro corrispondente alle traslazioni dell'asse dei tempi).

Il teorema (3.2) viene generalizzato dal seguente Teorema, dovuto a R. Kadison. Non viene più richiesto che le probabilità di transizione rimangano invarianti, bensì che la trasformazione si estenda ad una trasformazione affine su tutto $I_{1,+}$ (gli operatori positivi di classe traccia).

Definizione 3.2 – automorfismi di Kadison

L'applicazione β da $I_{1,+}$ in se è un automorfismo di Kadison se, per ogni $0 \leq s \leq 1$ e per ogni $\sigma_k \in I_{1,+}$ si ha

$$\beta(s\sigma_k + (1-s)\sigma_j) = s\beta(\sigma_k) + (1-s)\beta(\sigma_j) \quad 3.21$$

(cioè β preserva la struttura affine degli stati normali).

◇

Si ha allora [Kad65]

Teorema 3.3 (Kadison)

Se β è un automorfismo di Kadison esiste un operatore U_β , unitario o antiunitario, tale che per ogni $\sigma \in I_{1,+}$

$$\beta(\sigma) = U_\beta \sigma U_\beta^*.$$

◇

Consideriamo ora l'evoluzione delle osservabili. In analogia con il caso classico, supporremo che si tratti di una successione di trasformazioni che preservano la struttura algebrica associata agli operatori simmetrici.

Notiamo a questo proposito che il prodotto di due operatori simmetrici (hermitiani) non è in generale un operatore simmetrico. Una struttura di prodotto che preserva la simmetria è il *prodotto di Jordan*

$$A \times B \equiv \frac{1}{2}(A B + B A) \quad 3.22$$

(questo prodotto non gode della proprietà associativa). Sembra quindi che una condizione ragionevole sia di richiedere che le trasformazioni considerate siano lineari e conservino il prodotto di Jordan.

Definizione 3.3 – automorfismi di Segal

La biiezione $\gamma : B(\mathcal{H}) \leftrightarrow B(\mathcal{H})$ è detta *automorfismo di Segal* se

$$\gamma(A \times B) = \gamma(A) \times \gamma(B) \quad \forall A, B \in B(\mathcal{H})_{sym} \quad 3.23$$

dove $B(\mathcal{H})_{sym}$ è la collezione degli operatori limitati e simmetrici su \mathcal{H} .

◇

Si ha allora il seguente risultato di Segal (per una dimostrazione [KR67])

Teorema 3.4 (Segal)

Se γ è un automorfismo di Segal, esiste un proiettore ortogonale E in $B(\mathcal{H})$, un operatore unitario U in $E \mathcal{H}$ ed un operatore antiunitario V in $(I - E) \mathcal{H}$ tali che, posto $W = U \oplus V$ si ha

$$\gamma(A) = W A W^*, \quad \forall A \in B(\mathcal{H})_{sym}.$$

◇

Consideriamo ora più in dettaglio l'evoluzione temporale. Per ciascun tempo t si tratterà di un automorfismo di Wigner o di Kadison se si tratta dell'evoluzione degli stati, di un automorfismo di Segal se si tratta dell'evoluzione degli osservabili. Bisogna inoltre precisare in quale topologia l'evoluzione sia continua. In questa direzione, il risultato più forte si riferisce agli automorfismi di Wigner. Si ha

Teorema 3.5 (Wigner II)

Se una famiglia di automorfismi di Wigner $t \mapsto \alpha_t$ è misurabile in t nella topologia debole (cioè $(\phi, \alpha_t \phi)$, è misurabile per ogni $\phi \in \mathcal{H}$) è possibile scegliere il fattore di fase per $U(t)$ in modo tale che $U(t)$ sia un gruppo ad un parametro di operatori unitari continuo nella topologia debole.

◇

Per la dimostrazione si può vedere Dixmier [9], o von Neumann [32]. Si tratta di un argomento topologico che dimostra come sia sempre possibile scegliere la fase dei vari operatori $U(t)$, la cui esistenza è garantita dal teorema 3.3, (per la continuità devono essere unitari anziché antiunitari) in modo tale che formino gruppo.

Nota 3.3

Il teorema di Wigner si estende alle rappresentazioni $G \ni g \mapsto \alpha_g$ se G è semisemplice.



Risultati analoghi al Teorema di Wigner valgono nel caso degli automorfismi di Kadison e Segal. *Tuttavia in entrambi i casi è necessario richiedere continuità rispetto a t in una topologia più forte.* Nel caso di automorfismi di Kadison si tratta della topologia naturale per gli operatori di classe traccia, nel caso di automorfismi di Segal della topologia naturale per gli operatori limitati.

Ricordiamo qui che per gli operatori limitati $B(\mathcal{H})$ la topologia naturale è quella della norma operatoriale ($\|A\| \equiv \sup_{\|\phi\|=1} \|A\phi\|$). Per gli operatori di classe traccia, il cui spazio si indica con \mathcal{I}_1 , la topologia naturale (o uniforme) è quella determinata dalla traccia: $\|A\|_{\text{tr}} := \text{Tr}|A|$. Chiaramente $\|A\| \leq \|A\|_{\text{tr}}$. Due altre topologie frequentemente utilizzate sono la *debole* (topologia indotta dal duale) e quella **-debole* (o *vaga*, o *ultradebole*) indotta per dualità dal preduale. Nel caso di \mathcal{I}_1 , esso è il duale del sottospazio degli operatori *compatti* attraverso la dualità $C \rightarrow \text{Tr}(TC)''$ (C compatto, T classe traccia).

Poiché ogni $\sigma \in I_{1,+}$ può essere scritto nella forma

$$\sigma = \sum_k \lambda_k P_k, \quad \lambda_k \geq 0, \quad \sum_k \lambda_k = 1,$$

dove P_k sono proiettori ortogonali su sottospazi di dimensione uno, si vede che, su insiemi limitati di $B(\mathcal{H})$ la topologia ultradebole coincide con quella che si otterrebbe richiedendo continuità dei proiettori di rango uno anziché di tutti gli operatori di classe traccia.

Poiché per proiettori P_ϕ di rango uno vale $\text{Tr}(P_\phi A) = (\phi, A\phi)$, la topologia ultradebole coincide, su sottoinsiemi limitati di $B(\mathcal{H})$, con la topologia debole nel senso degli operatori.

Convieni notare che le topologie qui sopra introdotte per $B(\mathcal{H})$ sono definibili per ogni algebra normata \mathcal{A} ; sono rispettivamente la topologia indotta dal duale e dal preduale (quando quest'ultimo esiste come spazio normato).

Nota 3.4

In $B(\mathcal{H})$ si può introdurre un'ulteriore topologia, la topologia forte degli operatori, intermedia tra la topologia uniforme e quella debole. Esse rende, per ogni $\phi \in \mathcal{H}$, continua la funzione $A \mapsto \|A\phi\|$. Anche per questa topologia si

può dimostrare che essa è equivalente alla topologia debole su insiemi limitati di $B(\mathcal{H})$.

♣

Per i gruppi ad un parametro (ad esempio il tempo) di automorfismi di Kadison e Segal si ha allora, come conseguenza dei teoremi 3.3 e 3.5:

Teorema 3.6 (Wigner, Kadison)

Se $t \mapsto \alpha_t$ è un gruppo ad un parametro di automorfismi di Kadison continuo (rispetto a t) nella topologia uniforme di I_1 , esiste un gruppo di operatori unitari $U(t)$, continuo nella topologia forte, tale che

$$\alpha_t(\sigma) = U(t)\sigma U^*(t) \quad \forall \sigma \in I_1. \quad 3.25$$

◇

Un risultato analogo vale per gli automorfismi di Segal.

Teorema 3.7 (Kadison, Segal)

Se $t \mapsto \gamma_t$ è un gruppo ad un parametro di automorfismi di Segal continuo (rispetto a t) nella topologia forte di $B(\mathcal{H})$, esiste un gruppo di operatori unitari $U(t)$, continuo nella topologia forte, tale che

$$\gamma_t(A) = U(t)AU^*(t) \quad \forall A \in B(\mathcal{H}). \quad 3.26$$

◇

Una dimostrazione è in [KR67].

Nota 3.5

Per operatori unitari la topologia forte operatoriale e quella debole coincidono.

Indicando con \mathcal{U} la collezione degli operatori unitari in \mathcal{H} è facile vedere che se \mathcal{N}_V è un intorno di $V \in \mathcal{U}$ allora $\mathcal{N}'_V \equiv V^{-1}\mathcal{N}_V$ è un intorno dell'identità $\mathbf{1}$.

È sufficiente quindi considerare la continuità all'origine.

Se U è unitario, si ha

$$\|(U - \mathbf{1})\phi\|^2 = 2\|\phi\|^2 - 2\Re(\phi, U\phi) = 2\Re(\phi, (\mathbf{1} - U)\phi).$$

♣

Infine, se si fa l'ipotesi che ciascun automorfismo γ_t preservi la struttura algebrica degli operatori (e non solamente la struttura di Jordan), si ottiene un risultato sotto condizioni più deboli di continuità (questo poiché si possono sfruttare proprietà algebriche).

Teorema 3.8

Sia $t \mapsto \gamma_t$ un gruppo di automorfismi di $B(\mathcal{H})$ continuo nella topologia debole. Allora esiste un gruppo di operatori unitari $U(t)$ continuo nella topologia debole, tale che

$$\gamma_t(A) = U(t)AU^*(t) \quad \forall A \in B(\mathcal{H}). \quad 3.27$$

◇

Le considerazioni fatte fin qui mostrano come, sotto condizioni molto generali e ipotesi abbastanza plausibili si possa concludere che il moto può essere rappresentato in Meccanica Quantistica da un gruppo ad un parametro di operatori unitari che realizzano il gruppo di automorfismi delle osservabili (rappresentazione di Heisenberg) o degli stati (rappresentazione di Schrödinger) con il quale viene descritta da dinamica.

È vero anche il reciproco, come è facile verificare: se $U(t)$ è un gruppo continuo ad un parametro di operatori unitari, allora (3.15), (3.16), e (3.17) descrivono gruppi ad un parametro di automorfismi e quindi definiscono una dinamica.

In dinamica classica la Hamiltoniana, una funzione a valori reali sullo spazio delle fasi, è il generatore infinitesimo del moto; più in generale le traiettorie sono soluzioni di un'equazione associata ad un campo vettoriale. È pertanto interessante notare l'esistenza di analoghe strutture in Meccanica Quantistica. Conviene preliminarmente introdurre alcune definizioni.

Definizione 3.4

Dato un operatore simmetrico chiuso densamente definito A in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , il suo aggiunto è definito come l'operatore A^* il cui dominio di definizione $D(A^*)$ è costituito dagli elementi $\phi \in \mathcal{H}$ tali che $(\phi, A\psi)$ sia continuo in ψ nella topologia di \mathcal{H} . Esiste quindi per il teorema di Riesz un vettore ξ in \mathcal{H} tale che $(\phi, A\psi) = (\xi, \psi)$ per tutti i vettori $\psi \in D(A)$.

Sul suo dominio l'operatore A^* è definito mediante $A^*\phi = \xi$.

◇

Definizione 3.5

Un operatore si dice autoaggiunto se coincide con il suo aggiunto.

◇

Nota 3.6

Nell'appendice del cap. 8 daremo alcune definizioni base ed alcuni teoremi relativi agli operatori su uno spazio di Hilbert. Notiamo qui che se A è densamente definito e limitato, allora il dominio di A^* è l'intero spazio \mathcal{H} , e se inoltre A è simmetrico, allora la sua chiusura \bar{A} coincide con A^* (in questo caso l'operatore è detto *essenzialmente autoaggiunto*).

♣

Il seguente teorema, la cui dimostrazione posticipiamo al cap. 8, caratterizza gli operatori autoaggiunti.

Teorema 3.9 (teorema spettrale)

Condizione necessaria e sufficiente affinché l'operatore A su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} sia autoaggiunto è che esista uno spazio di misura (X, μ) , una funzione μ -misurabile f_A su X e una corrispondenza isometrica invertibile $U : \mathcal{H} \rightarrow L^2(X, \mu)$ tale che valga l'identità

$$UA = (f_A \cdot)U \quad 3.28$$

dove per $f_A \cdot$ si intende l'operatore di moltiplicazione per la funzione f_A . \diamond

Con queste notazioni possiamo ora enunciare il teorema di Stone, che dà la condizione affinché esista il generatore infinitesimo della dinamica in Meccanica Quantistica.

Teorema 3.10 (Stone)

Condizione necessaria e sufficiente affinché $t \mapsto V(t)$ sia una rappresentazione debolmente continua del gruppo additivo dei reali mediante operatori unitari in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} è che esista un operatore autoaggiunto H tale che, se $\phi \in D(H)$ allora vale

$$i \frac{dV(t)}{dt} \phi = HV(t)\phi. \quad 3.29$$

\diamond

Nota 3.7

Si suole esprimere questo teorema scrivendo

$$V(t) = e^{-iHt}.$$

Si può notare che nella rappresentazione in cui H è diagonale vale

$$(V(t)\phi)(m) = e^{-itf_H(m)}\phi(m), \quad \phi \in L^2(X, d\mu).$$

\clubsuit

È facile vedere che, indicando con Π_ϕ il proiettore ortogonale sul vettore ϕ , la (3.29) può anche essere scritta (su un opportuno dominio) nella forma

$$i \frac{d}{dt} \Pi_{\phi_t} = [H, \Pi_{\phi_t}].$$

In generale, se B è un operatore che lascia invariante il dominio di H , la (3.29) può anche essere scritta nella forma

$$i \frac{d}{dt} \gamma_t(B) = [H, \gamma_t(B)] \quad 3.30$$

su un dominio opportuno, con $B \mapsto \gamma_t(B)$ la trasformazione di operatori duale di $\phi \mapsto U(t)\phi$. Formalmente si ha

$$\gamma_t(B) = U(t)BU(t)^*.$$

Tenendo conto della proprietà dei commutatori

$$[H, AB]\phi = [H, A]B\phi + A[H, B]\phi$$

che valgono se tutti i termini in (3.31) sono ben definiti, si vede che l'applicazione

$$B \mapsto [H, B] \tag{3.31}$$

è una derivazione e quindi è strutturalmente omeomorfa a un campo vettoriale. Si ha inoltre come identità (almeno per operatori limitati)

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0.$$

L'omeomorfismo (come strutture formali) della parentesi di Poisson in Meccanica Classica con l'operazione di commutatore nell'algebra di operatori $B(\mathcal{H})$ suggerisce un modo naturale per scrivere la dinamica quantistica per un sistema la cui dinamica "classica" sarebbe descritta da una Hamiltoniana classica H_{cl}

$$H_{cl}(q, p) = \frac{1}{2}p^2 + V(q), \quad q, p \in R^n, \tag{3.32}$$

dove $V(q)$ è una funzione sufficientemente regolare; suggerisce inoltre che sia importante trovare operatori autoaggiunti \hat{q}_k, \hat{p}_i che soddisfino, *in un opportuno dominio*, le relazioni

$$\{\hat{q}_i, \hat{q}_k\} = \{\hat{p}_i, \hat{p}_k\} = 0, \quad \{\hat{q}_i, \hat{p}_k\} = \delta_{i,k} \mathbf{1}. \tag{3.33}$$

Questo permette di definire un generatore (nel senso del teorema di Stone) mediante

$$H = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + V(\hat{q}). \tag{3.34}$$

Notare che il calcolo funzionale (e quindi la definizione di funzione continua o differenziabile) è definito per un operatore autoaggiunto mediante il teorema spettrale.

Nota 3.8

Per Hamiltoniane H_{cl} classiche che non siano della forma (3.34), in particolare non siano somma di una funzione che dipende solamente da metà delle coordinate canoniche e di un'altra funzione che dipende solo dall'insieme complementare, la prescrizione per ottenere un operatore Hamiltoniano quantistico non è così elementare e univoca. Questo perché il teorema di rappresentazione

di una collezione di operatori autoaggiunti come operatori di moltiplicazione per funzioni misurabili su un opportuno spazio di probabilità vale solamente per collezioni di operatori che commutano fra loro. A titolo d'esempio, posto

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(p - iq), \quad \bar{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(p + iq) \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p} - i\hat{q}), \quad \hat{a}^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p} + i\hat{q}),$$

si può verificare che $[\hat{a}, \hat{a}^*] = \mathbf{1}$ (su un opportuno dominio) e che

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

(essendo tutte funzioni a valore numerico) mentre

$$\hat{a}^* \hat{a}^* \hat{a} \hat{a} = \hat{a}^* \hat{a} \hat{a}^* \hat{a} - \hat{a}^* \hat{a}.$$



Naturalmente bisogna prestare anche attenzione a che l'operatore H definito in (3.34) sia autoaggiunto (la somma di due operatori illimitati autoaggiunti A e B è a priori definita solo su $D(A) \cap D(B)$ e può non rappresentare un operatore autoaggiunto).

Le equazioni di Heisenberg assumono allora la forma, nella rappresentazione $\hat{p}_k \equiv i \frac{\partial}{\partial q_k}$,

$$\frac{d\hat{p}_k}{dt} = \frac{\partial V(q)}{\partial q_k} \Big|_{q_k \rightarrow \hat{q}_k} \quad 3.35$$

$$\frac{d\hat{q}_k}{dt} = \hat{p}_k. \quad 3.36$$

La corrispondente equazione di Schrödinger risulta essere

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) = -\frac{1}{2} \Delta \phi(x, t) + V(x) \phi(x, t). \quad 3.37$$

Questa è l'equazione postulata da Schrödinger (va notato peraltro che Schrödinger era pervenuto alla (3.37) per un'altra via, seguendo la traccia descritta da De Broglie e utilizzando la presentazione della Meccanica Classica in termini di fronti d'onda e l'equazione di Hamilton-Jacobi).

Dimostriamo nel cap. 7 che, sotto opportune ipotesi, le (3.33) definiscono in modo unico (modulo trasformazioni unitarie) un insieme di operatori \hat{q}_k e \hat{p}_k . Inoltre, in una rappresentazione opportuna, si ha che \hat{q}_k è moltiplicazione per la coordinata x_k e \hat{p}_k è l'operatore di differenziazione $i \frac{\partial}{\partial x_k}$.

Nelle formule precedenti abbiamo utilizzato unità di misura in cui $\hbar = 1$.

Nota 3.9

In generale

$$[a(\hat{p}), b(\hat{q})] \neq \sum_{i,k} [\hat{q}_k, \hat{p}_i] \left(\frac{\partial a}{\partial q_k} \frac{\partial b}{\partial p_i} \right)_{q_k \rightarrow \hat{q}_k, p_i \rightarrow \hat{p}_i}. \quad 3.38$$

♣

Notiamo che l'operatore H in (3.34) non è un operatore limitato, quindi a stretto rigore non possiamo, senza un'ulteriore analisi, applicare le formule che abbiamo ricavato qui sopra, valide solamente per operatori chiusi e limitati. In particolare non siamo garantiti che l'equazione (3.37) abbia soluzione per tutti i dati iniziali, che questa soluzione sia definita per tutti i tempi e che l'evoluzione sia unitaria. Nel corso dei capitoli che seguono daremo condizioni su V che garantiscono esistenza globale, unicità e unitarietà.

Notiamo che *nel caso* $V = 0$, pur essendo l'operatore $-\Delta$ illimitato, esistenza, unicità, unitarietà, e continuità rispetto a t vengono garantite per dati iniziali in spazi che ammettono trasformata di Fourier continua, in particolare per ogni dato iniziale in \mathcal{S}' (lo spazio delle distribuzioni temperate, duale dello spazio \mathcal{S} delle funzione infinite volte differenziabili e che decrescono – con tutte le loro derivate – all'infinito più rapidamente di qualunque potenza di $|x|^{-1}$). Infatti, utilizzando la trasformata di Fourier, la (3.37) si scrive

$$i \frac{d\hat{\phi}(k; t)}{dt} = \frac{1}{2} |k|^2 \hat{\phi}(k; t) \quad k \in R^d \quad 3.39$$

che ammette la soluzione (unica e globale nel tempo)

$$\hat{\phi}(k; t) = e^{-it|k|^2} \hat{\phi}(k; 0). \quad 3.40$$

In particolare la soluzione per $V = 0$ esiste ed è unica per dati iniziali in $L^2(R^d)$. Inoltre, poiché la norma $L^2(R^d)$ di una funzione non viene alterata moltiplicando la funzione per un fattore di fase, ed essendo la trasformata di Fourier un'isometria in $L^2(R^d)$, ne concludiamo che la norma $L^2(R^d)$ della soluzione rimane costante come funzione del tempo. In altre parole, detta ϕ_t la soluzione di (3.37) con dato iniziale $\phi_0 \in L^2(R^d)$, l'applicazione $\phi_s \mapsto \phi_t$ è una trasformazione unitaria per ogni valore di $t, s \in R$, ed è fortemente continua in t .

La proprietà di gruppo è soddisfatta poiché per ogni k

$$e^{it|k|^2} e^{is|k|^2} = e^{i(t+s)|k|^2}. \quad 3.41$$

Ne concludiamo che nel caso $V = 0$ l'equazione di Schrödinger (3.37) definisce un gruppo ad un parametro di operatori unitari fortemente continuo ma non uniformemente continuo. La continuità non è uniforme, perché nel fattore di

fase in (3.40) $|k|^2$ non è una funzione limitata. In particolare per un insieme denso di vettori in \mathcal{H} lo sviluppo in serie

$$e^{itH}\phi = \phi + itH\phi - \frac{t^2}{2} H^2\phi + \dots, \quad H\phi = -\Delta\phi,$$

non converge necessariamente in $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Notiamo che nel caso $V = 0$ (equazione di Schrödinger “libera”) abbiamo trattato esistenza ed unicità della soluzione con metodi di equazioni alle derivate parziali prescindendo cioè dal suo ruolo in Meccanica Quantistica, e prescindendo anche dalla teoria degli operatori in spazi di Hilbert.

La forma semplice che in questi casi l’equazione assume in trasformata di Fourier *permettono infatti un’analisi accurata delle proprietà delle soluzioni* con i metodi delle equazioni differenziali e in questo contesto è conveniente non limitarsi a dati iniziali in $L^2(\mathbb{R}^d)$. In particolare per ogni dato iniziale $\phi_0 \in \mathcal{S}'$ la soluzione di

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) = -\frac{1}{2} \Delta \phi(x, t) \quad \phi(x, 0) = \phi_0(x), \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad 3.42$$

è unica ed è data da

$$\phi(x, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{d}{2}} \int e^{i(xk - t k^2/2)} \hat{\phi}(k, t) dk, \quad 3.43$$

dove abbiamo indicato con il simbolo \hat{u} la trasformata di Fourier di $u \in \mathcal{S}'$.

Indichiamo con il termine di *propagatore libero* e denotiamo con $U_0(t)$, $t \in \mathbb{R}$ la famiglia di operatori lineari su \mathcal{S}' definiti da

$$(U_0(t))\phi_0(x) \equiv \phi(x, t)$$

con $\phi(x, t)$ data da (3.43).

Indichiamo con $\mathcal{L}(K)$ gli operatori lineari in uno spazio di Fréchet \mathcal{K} e con $H^\sigma(\mathbb{R}^d)$ lo spazio di Sobolev di ordine $\sigma \in \mathbb{R}$ (la collezione di funzioni u tali che $\int |\tilde{u}(k)|(1 + |k|^2)^\sigma dk < \infty$).

In particolare $L^2(\mathbb{R}^d) \equiv H^0(\mathbb{R}^d)$.

Notare che $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) = \cup_\sigma H^\sigma(\mathbb{R}^d)$ mentre $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d) = \cap_\sigma H^\sigma(\mathbb{R}^d)$.

Teorema 3.11

Il propagatore libero soddisfa le seguente proprietà.

- 1) $U_0(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{S}')$ e l’applicazione $\phi \mapsto (U_0\phi, \psi)$ è di classe C^∞ per ogni coppia $\phi, \psi \in \mathcal{S}'$.
- 2) $U_0(t)$ soddisfa la proprietà di gruppo $U_0(t)U_0(s) = U_0(t + s)$ e inoltre $U_0 = \mathbf{1}$.
- 3) $U_0(t)$ è un gruppo fortemente continuo di operatori unitari in $H^\sigma(\mathbb{R}^d)$ per ogni σ .

4) $U_0(t)\mathcal{S} = \mathcal{S}$, $U_0(t)\mathcal{S}' = \mathcal{S}'$, e l'applicazione $t \rightarrow U_0(t)\psi$ è continua in t in ciascuno di questi spazi.

5) Per $\psi \in \mathcal{S}$ vale la formula

$$(U_0\psi)(x, t) = e^{\mp i\frac{\pi}{4}d} \left(\frac{1}{2\pi|t|}\right)^{\frac{d}{2}} \int e^{i\frac{(x-y)^2}{2t}} \psi(y) dy \quad \pm t > 0. \quad 3.44$$

◇

Dimostrazione

Le proprietà 1) ... 4) seguono immediatamente dalle proprietà della trasformata di Fourier. La proprietà 5) segue dal seguente risultato, anch'esso di facile dimostrazione: se $\Re a \geq 0$ e $a \neq 0$ allora, scegliendo il ramo di \sqrt{a} tale che $\sqrt{a} > 0$ quando $a > 0$ si ha

$$(\mathcal{F}e^{-a\frac{x^2}{2}})(k) = a^{-\frac{d}{2}} e^{-\frac{k^2}{2a}}.$$

♣

Per lo studio delle proprietà del propagatore nel caso $V \neq 0$, notiamo che l'operatore G definito da

$$(Gf)(t) \equiv \int_0^t U_0(t-s)f(s) ds, \quad t \in I \subset R \quad 3.45$$

soddisfa, per ogni $k \in R$

$$f \in L^1(I, H^k) \Rightarrow Gf \in \mathcal{A}_c(I, H^k), \quad \frac{d}{dt}Gf = i\Delta Gf + f$$

(\mathcal{A}_c è la classe di funzioni assolutamente continue).

Da (3.34) segue anche la seguente proprietà di regolarità, che risulta utile per lo studio delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger con potenziale V , e anche dell'equazione di Schrödinger non lineare $i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\Delta\psi + g(\psi)$ dove g è un'opportuna funzione (ad esempio $g(\psi) = \alpha|\psi|^2\psi$).

Se $f \in L^1(I, H^k)$ e ψ soddisfa l'equazione $\frac{\partial\psi}{\partial t} = i\Delta\psi + f$ con dato iniziale $\psi_0 \in H^{k+2}$ allora si ha

$$\psi(t) \in L^1(I, H^{k+2}), \quad \psi(t) = U_0(t)\psi_0 + Gf.$$

Esiste una caratterizzazione del gruppo $U_0(t)$ che sarà utile per descrivere il comportamento delle soluzioni dell'equazione $i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\Delta\psi$ (e anche di $i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\Delta\psi + V\psi$ se il potenziale V ha opportune proprietà). Definiamo, per $t \neq 0$, gli operatori $M(t)$ e $D(t)$ nel modo seguente:

$$M(t)f(t)(x) = e^{-\frac{x^2}{2t}}f(x), \quad D(t)f(x) = |t|^{-\frac{d}{2}}f\left(\frac{x}{t}\right). \quad 3.46$$

Il simbolo D è stato scelto perché la sua operazione corrisponde ad una dilatazione dello spazio.

Teorema 3.12

1) Per $|t| \neq 0$ $M(t)$ e $D(t)$ sono isomorfismi di \mathcal{S}' e di \mathcal{S} e sono operatori unitari in $L^2(\mathbb{R}^d)$.

2) Si ha

$$U_0(t) = e^{\mp i \frac{\pi}{4} d} M(t) D(t) \mathcal{F} M(t) \quad 3.47$$

dove abbiamo indicato con \mathcal{F} l'operazione "trasformata di Fourier".

◇

Dimostrazione

Il punto a) è ovvio. Per quanto riguarda il punto b) si usa l'identità

$$e^{i \frac{(x-y)^2}{2t}} = e^{i \frac{x^2}{2t}} e^{-i \frac{xy}{t}} e^{i \frac{y^2}{2t}}$$

e la rappresentazione esplicita data sopra per $U_0\psi$.

♡

Si può anche notare che, mentre per ciascun t l'operatore $U_0(t)$ è un'isometria in $L^2(\mathbb{R}^d)$, esso non è un operatore limitato su $L^p(\mathbb{R}^d)$ per $p \neq 2$. In particolare si verifica che per $p \geq 2$ si ha, per un'opportuna costante C_p ,

$$\|U_0(t)\psi\|_p \leq C_p |t|^{-d(\frac{1}{2} - \frac{1}{p})} \|\psi\|_q, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1. \quad 3.48$$

Questa stima può essere ottenuta per interpolazione, notando che $U_0(t)$ è isometrica in L^2 e per $t \neq 0$ essa è limitata da L^1 a L^∞ perché il suo nucleo integrale è della forma $\frac{g_d(t)}{t^{d/2}}$ dove $g_d(t)$ è una funzione limitata e d è la dimensione dello spazio. Analoghe stime valgono per il propagatore $e^{it(-\Delta+V)}$ sotto opportune condizioni sul potenziale V .

Una proprietà molto interessante di $U_0(t)$ è la proprietà *dispersiva* (che si trasmette, come vedremo, al propagatore $e^{it(H_0+V)}$ quando il potenziale soddisfa opportune condizioni). Tale proprietà è detta dispersiva perché corrisponde grossomodo al fatto che al passare del tempo la soluzione $U_0(t)\psi_0$ "si appiattisce" ed il suo supporto essenziale (la regione dello spazio Ω_t tale che $\int_{\Omega_t} |U_0(t)\psi(x)|^2 dx < \epsilon$) cresce. Si può anche notare anche che, per dato iniziale ψ_0 a supporto compatto, il supporto di $U_0(t)\psi_0$ non è contenuto in alcuna palla finita di \mathbb{R}^d . Per confronto, la soluzione dell'equazione delle onde ha supporto che cresce linearmente.

Un'altra proprietà interessante del propagatore libero si riferisce al comportamento per $t \rightarrow \pm\infty$ delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger libera. Questo

comportamento differisce poco (modulo un riscaldamento) dalla propagazione libera secondo la direzione data dalla trasformata di Fourier, e quindi sostanzialmente da una propagazione secondo la direzione della quantità di moto. Questa proprietà sarà molto utile nella discussione che faremo della teoria dello scattering in Meccanica Quantistica.

Teorema 3.13

Definiamo $T(t)$ per $\pm t > 0$ mediante

$$(T(t)\phi)(x) = e^{\mp\gamma(d)} e^{i\frac{x^2}{2t}} \left(\frac{1}{t}\right)^{\frac{d}{2}} \hat{\phi}\left(\frac{x}{t}\right).$$

Gli operatori $T(t)$ sono unitari in $L^2(\mathbb{R}^d)$ e si ha per ogni $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|[U_0(t) - T(t)]\phi\|_2 = 0. \quad 3.49$$

◇

Prima di dare la dimostrazione del Teorema 3.13 notiamo una sua conseguenza per il moto libero di una particella in Meccanica Quantistica.

Abbiamo visto che secondo l'interpretazione data da Born, $|\phi(x_0)|^2$ e $|\hat{\phi}(k_0)|^2$ sono la densità di probabilità che si ottenga x_0 (rispettivamente k_0) facendo una misurazione di posizione (rispettivamente di impulso) sul sistema descritto dalla funzione d'onda ϕ (normalizzata ad uno). Dalla formula per il propagatore libero si vede che la distribuzione di impulso non cambia nel tempo, e quindi l'impulso è una *costante del moto* per il moto libero.

Il Teorema 3.11 afferma che la distribuzione di probabilità nello spazio delle configurazioni tende asintoticamente a

$$\frac{1}{t^d} |\tilde{\phi}\left(\frac{x}{t}\right)|^2 dx = |\hat{\phi}(\xi)|^2 d\xi, \quad \xi = \frac{x}{t}. \quad 3.50$$

Notiamo che questa è la distribuzione della posizione di una particella classica che sta nell'origine al tempo 0 e la cui distribuzione dell'impulso è $|\hat{\phi}(\xi)|^2 d\xi$.

Dimostrazione del Teorema 3.13

Notiamo che è sufficiente dare la dimostrazione nel caso $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Infatti, tenendo conto che $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ è un sottospazio lineare denso di $L^2(\mathbb{R}^d)$ e che $U_0(t)$ e $T(t)$ sono operatori unitari, un'applicazione del teorema di Banach-Steinhaus permette di concludere che (3.49) vale per tutti i $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$.

Per dimostrare (3.50) nel caso $\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ notiamo che in questo caso possiamo sviluppare gli esponenziali in (3.47), (3.48) fino ad un ordine qualunque, con una stima uniforme sul resto. Si può verificare che le espressioni che risultano coincidono per $U_0(t)$ e $T(t)$ e che all'ordine n la stima della differenza è

$$\|((U_0(t) - T(t))\phi)_n\| \leq \frac{i}{n!} \left(\frac{x^2}{2t}\right)^{n+1} \int_0^1 \|(1-\theta)^n e^{i\frac{x^2\theta}{2t}} \phi(x)\|_2 d\theta. \quad 3.51$$

Per ogni $\phi \in \mathcal{S}$ il termine a destra in (3.51) converge a zero.

♡

Un'ulteriore stima che si deduce da (3.43) e che è importante nello studio delle proprietà delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger con un potenziale V che abbia opportune proprietà riguarda possibilità di dedurre stime sulla *risolvente* dell'operatore $-\Delta$.

Per un operatore H su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} la funzione a valori operatori risolvente $R(z)$ è definita da

$$R(z) = \frac{1}{H - z}, \quad z \in \sigma(H)$$

dove $\sigma(H) \subset \mathbb{C}$ è lo spettro di H (vedi cap.5). Per un operatore autoaggiunto (come Δ) lo spettro è un sottoinsieme dell'asse reale. Vale la relazione (trasformata di Laplace)

$$R(z) = -i \int_0^\infty e^{-it(H-z)} dt \quad \Im z > 0.$$

L'integrale converge assolutamente e quindi la risolvente è analitica nel semipiano superiore; analogamente si dimostra che essa è analitica nel semipiano inferiore. Non esiste il limite $\lim_{\Im z \rightarrow \pm 0} R(z)$ come operatore in $L^2(\mathbb{R}^d)$ (l'integrale di definizione non converge se $\Im z = 0$.) Ma, se $H = -\Delta$, si vede da (3.48) che l'integrale converge assolutamente se la risolvente è riguardata come operatore da L^p a L^{p^*} se $d - (\frac{1}{2} - \frac{1}{p}) > 1$ (qui p^* è l'esponente *duale*, definito da $\frac{1}{p} + \frac{1}{p^*} = 1$). Se questa condizione è soddisfatta, allora $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} R(x \pm i\epsilon)$ esiste ed è limitato come operatore tra L^p e L^{p^*} . Poiché, almeno formalmente, $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\frac{1}{x+i\epsilon} - \frac{1}{x-i\epsilon}) = 2\delta(x)$, si riconosce che la differenza tra questi limiti (se esistono) dà informazioni sullo spettro di H .

Notiamo che stime di tipo Hölder permettono di affermare che per ogni $p > 2$, pur di scegliere M sufficientemente grande, si ha $(\int dx (1 + |x|^2)^{-M} |\psi(x)|^p) < C(M) \|\psi\|_2$ dove $C(M)$ è una costante opportuna. Quindi esiste come operatore limitato su L^2

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} A_N R_0(x \pm i\epsilon) A_M, \quad R_0 = \frac{1}{-\Delta - z}$$

dove A_M è l'operatore di moltiplicazione per $(1 + |x|^2)^{-M}$. Da qui segue l'interesse di trovare stime (dispersive) del tipo (3.48) per operatori del tipo $-\Delta + V$. Nei capp. 5 e 10 daremo dettagli sulle proprietà e l'utilizzazione della risolvente nel caso $H = -\Delta + V$.

Notiamo che quando $V \neq 0$ l'esistenza e l'unicità della soluzione dell'equazione di Schrödinger (così come alcune sue proprietà) non possono essere ottenute tanto semplicemente e non è sempre possibile dare una forma esplicita alla soluzione per tempi lunghi.

Nel caso in cui V sia un operatore limitato, esista cioè una costante $C > 0$ tale che

$$\|V\phi\| \leq C\|\phi\| \quad \forall \phi \in \mathcal{H},$$

la soluzione di (3.37) può essere ottenuta mediante uno sviluppo in serie convergente. Scriviamo il potenziale nella forma ϵV (per introdurre un parametro d'iterazione; la convergenza sarà garantita per ogni valore del parametro). Ponendo $H_0 \equiv -\Delta/2$ è facile vedere che la soluzione formale

$$\phi_t \equiv e^{-it(H_0 + \epsilon V)} \phi_0$$

soddisfa l'equazione

$$\phi_t = e^{-itH_0} \phi_0 + i\epsilon \int_0^t ds e^{-i(t-s)H_0} V e^{-isH_0} \phi_0 \quad 3.52$$

(suggerimento: considerare l'equazione per la funzione $e^{-itH_0} e^{it(H_0 + \epsilon V)} \phi_0$). La (3.52) scritta nella forma equivalente

$$e^{-itH_0} \phi_t \equiv \psi_t, \quad \psi_t = \psi_0 + i\epsilon \int_0^t ds e^{isH_0} V e^{-isH_0} \psi_0$$

individua la *rappresentazione di interazione* frequentemente usata in Fisica Teorica. La (3.52) (sostanzialmente l'equazione fondamentale del calcolo) viene detta *equazione di Duhamel*. Iterando la (3.52) si ottiene la serie formale

$$\begin{aligned} \phi_t = e^{-itH_0} \phi_0 + \\ \sum_{k=1}^{\infty} (i\epsilon)^k \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \dots \int_0^{s_{k-1}} ds_k e^{-i(t-s_1)H_0} V e^{-i(s_1-s_2)H_0} V \dots e^{-i(s_{k-1}-s_k)H_0} V e^{-is_k H_0} \phi_0 \end{aligned} \quad 3.53$$

detta *serie di Duhamel*. Se V è un operatore limitato (non necessariamente di moltiplicazione!) la serie (3.53) converge nella topologia di \mathcal{H} . Infatti si ha

$$\|e^{-i(t-s_1)H_0} V e^{-i(s_1-s_2)H_0} V \dots e^{-i(s_{k-1}-s_k)H_0} e^{-is_k H_0} \phi_0\|_2 \leq v^k \|\phi_0\|_2, \quad v = \|V\|_{\infty},$$

e quindi

$$\begin{aligned} \left\| \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \dots \int_0^{s_{k-1}} ds_k e^{-i(t-s_1)H_0} V e^{-i(s_1-s_2)H_0} V \dots e^{-i(s_{k-1}-s_k)H_0} e^{-is_k H_0} \phi_0 \right\|_2 \\ \leq v^k \|\phi_0\|_2 \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \dots \int_0^{s_{k-1}} ds_k = \frac{t^k v^k}{k!} \|\phi_0\|_2. \end{aligned} \quad 3.54$$

Da queste stime segue che la serie formale (3.53) converge nella topologia di \mathcal{H} e quindi definisce per ogni t un elemento di \mathcal{H} .

Utilizzando nella serie formale che si ottiene da (3.53) nell'espressione del prodotto scalare (ϕ_t, ϕ_t) si ottiene facilmente $(\phi_t, \phi_t) = (\phi_0, \phi_0) \quad \forall t$; quindi per ogni t la soluzione fornisce un'isometria.

Utilizzando ancora una volta la serie (che abbiamo dimostrato essere convergente) si può verificare la proprietà di gruppo. Come serie fortemente convergente di funzioni fortemente continue (in t) la soluzione ottenuta risulta fortemente continua in t .

Abbiamo con questo dimostrato che, se V è un operatore limitato, la soluzione dell'equazione di Schrödinger (3.37) fornisce un gruppo continuo ad un parametro di trasformazioni unitarie; per costruzione il loro generatore è $H \equiv H_0 + V$.

Nella maggior parte dei problemi di interesse in fisica l'operatore V non è un operatore limitato e il metodo che abbiamo seguito non è più valido. Nel cap. 10 presenteremo stime che permettono di concludere, per una classe abbastanza ampia di potenziali (che coprono la maggior parte dei casi di interesse fisico), che la Hamiltoniana $H = H_0 + V$ dà un gruppo ad un parametro di operatori unitari e che esiste ed è unica, per ogni dato iniziale in \mathcal{H} , la soluzione della corrispondente equazione di Schrödinger.

Sotto opportune ipotesi sul potenziale, il comportamento asintotico nel tempo delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger riflette quello delle soluzioni per $V = 0$.

Una caso notevole in cui la soluzione dell'equazione di Schrödinger può essere scritta in forma esplicita (e quindi risulta evidente il fatto che corrisponda a trasformazioni unitarie) è rappresentato dalla dinamica dell'oscillatore armonico. La sua equazione (in opportune unità di misura) è

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta \phi + \frac{1}{2} |x|^2 \phi, \quad \Delta = \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

che corrisponde all'operatore $H_{\text{osc}} = -\frac{1}{2} \Delta + \frac{1}{2} |x|^2$ definito su un sottoinsieme denso di $L^2(\mathbb{R}^N)$. Questo operatore ha come autostati il prodotto delle funzioni di Hermite

$$h_{k_1}(x_1) h_{k_2}(x_2) \cdots h_{k_N}(x_N) \quad k_j = 1, \dots, N$$

e i corrispondenti autovalori sono $\prod_{j=1}^N (n_{k_j} + 1)$. Ricordiamo che le funzioni di Hermite $h_n(x)$ nella variabile $x \in \mathbb{R}$ formano una base ortonormale completa in $L^2(\mathbb{R})$; sono date esplicitamente da

$$h_n(x) = C_n \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

con C_n costante di normalizzazione scelta in modo tale che $\int h_n(x)^2 dx = 1$. Da queste espressioni si può dedurre la forma esplicita della soluzione generale

dell'equazione di Schrödinger relativa all'oscillatore armonico per dati iniziali in $L^2(\mathbb{R}^N)$. Torneremo su questa forma esplicita nell'ambito dello studio della formula di Feynmann-Kac.

Per altre Hamiltoniane di interesse in fisica in cui il potenziale non è limitato (per le quali quindi la serie di Duhamel non converge) la dimostrazione dell'esistenza di soluzioni richiede stime che in generale utilizzano le proprietà di regolarizzazione del nucleo integrale dell'operatore $(-\Delta + I)^{-1}$ (cioè il fatto che la funzione $F_f(x) \equiv \int (-\Delta + I)^{-1}(x, y)f(y)dy$ ha proprietà di regolarità maggiori di quelle della funzione f). Notare che $\hat{F}_f(p) = (p^2 + 1)^{-1}\hat{f}(p)$.

Una Hamiltoniana non limitata induce una derivazione non limitata su $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Anche in Meccanica Hamiltoniana i campi vettoriali corrispondono a derivazione non limitate (in particolare non possono essere applicati a funzione non differenziabili) e le equazioni generate non ammettono sempre soluzioni uniche o globali; in particolare un campo che non sia di classe Lipschitz può ammettere più di una soluzione in corrispondenza allo stesso stato iniziale.

In Meccanica Quantistica valgono teoremi di esistenza, unicità delle soluzioni e unitarietà dell'evoluzione nel tempo anche quando il potenziale è solo misurabile (purché sia limitato) e quindi il suo gradiente (che interviene nel campo vettoriale classico) non è neppure definito. D'altra parte, se il potenziale ha singolarità locali troppo forti, la famiglia di operatori unitari $U(t) = e^{-itH}$ può non esistere mentre l'equazione classica corrispondente può avere soluzioni uniche globali *per quasi tutti* i dati iniziali.

Un punto importante nell'analisi della struttura della Meccanica Quantistica è connesso all'equivalenza della *rappresentazione di Schrödinger*, in cui lo spazio di Hilbert \mathcal{H} viene concretamente rappresentato come $L^2(\mathbb{R}^N, dx)$, dove N è il numero dei gradi di libertà del sistema (definito come numero di gradi di libertà del sistema classico associato), e della *rappresentazione di Heisenberg*, in cui lo spazio di Hilbert è uno spazio astratto e gli operatori sono "matrici infinite" (questo significa che è stata data implicitamente una base ortonormale nello spazio, tipicamente una base che contiene tra i suoi elementi i rappresentativi degli stati stazionari del sistema in esame).

Quello che connette le due rappresentazioni è l'esistenza in entrambi i casi di una collezione di operatori (matrici infinite) $\hat{q}_k, \hat{p}_h, k, h = 1, \dots, N$ che soddisfano (almeno su un opportuno dominio) le relazioni *di commutazione canonica*

$$[\hat{q}_h, \hat{p}_k] = i\delta_{h,k}, \quad [\hat{q}_k, \hat{q}_k] = 0 = [\hat{p}_h, \hat{p}_k] \quad h, k = 1, \dots, n \quad 3.55$$

(abbiamo precisato che le (3.55) valgono su di un opportuno dominio perché, come vedremo in seguito, le \hat{q}_h e le \hat{p}_k non possono essere tutti operatori limitati). È naturale allora chiedersi se tutte le rappresentazioni dell'algebra di operatori definita dalle relazioni (3.40) siano tra loro equivalenti, nel senso che se $\pi(\hat{q}_h, \hat{p}_k)$ e $\pi'(\hat{q}_h, \hat{p}_k)$ sono due rappresentazioni irriducibili, su spazi di Hilbert

rispettivamente \mathcal{H} ed \mathcal{H}' , esiste un'isometria invertibile $V : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$ tale che

$$\pi'(\hat{q}_h, \hat{p}_k)V = V\pi(\hat{q}_h, \hat{p}_k). \quad 3.56$$

Tratteremo questo problema nel cap. 7 e vedremo in quel capitolo in che senso debba intendersi questa equivalenza.

Conviene notare che i teoremi che dimostreremo sull'esistenza di una propagazione unitaria per (3.37) *nel caso di potenziali non limitati* faranno uso delle proprietà degli operatori alle derivate parziali (proprietà di regolarità delle soluzioni, immersioni compatte tra spazi di funzioni, disuguaglianze di Sobolev, ad esempio).

Questo rende la rappresentazione di Schrödinger molto efficace per analizzare l'evoluzione sia per stati che per osservabili e rende conto del fatto che in Meccanica Quantistica non-Relativistica si fa uso quasi esclusivamente della rappresentazione di Schrödinger, anche quando si utilizzano relazioni algebriche tra gli operatori (ad esempio quando siano presenti gruppi continui di simmetria e si vogliono studiare le conseguenti costanti del moto, utilizzando la struttura di algebra di Lie dei generatori).

Nella trattazione di sistemi a infiniti gradi di libertà (ad esempio in Meccanica Statistica Quantistica e in Teoria Relativistica dei Campi quantizzati) il formalismo (algebrico) di Heisenberg è più frequentemente utilizzato, ed è al contrario più difficile utilizzare il formalismo di Schrödinger, dato che non esiste in dimensione infinita una misura di Lebesgue (una misura invariante per traslazioni) e conseguentemente vengono meno i teoremi classici di immersione e di regolarità.

Non potendo utilizzare in generale gli strumenti potenti di analisi funzionale, lo studio di sistemi infinito dimensionali in rappresentazione di Heisenberg si limita in generale a uno studio perturbativo formale, partendo dal caso di un sistema libero; i risultati sono espressi come serie di cui in generale non è noto se siano convergenti o almeno asintotiche.

Tuttavia, sostituendo la misura di Lebesgue con la misura di Gauss (per la quale in R^n con n finito i risultati di immersione e di compattezza sono più deboli, ma che d'altra parte ammette un'estensione al caso di R^∞), si può fare uso di metodi di analisi funzionale classica e utilizzare la rappresentazione di Schrödinger (o, più precisamente, una sua estensione) per dimostrare *in qualche caso particolare* l'esistenza del gruppo di operatori unitari che reggono il moto del sistema e le proprietà di regolarità delle soluzioni.

In [27] viene esposto uno studio di modelli relativistici semplici di teoria quantistica di campo in cui la (generalizzazione della) equazione di Schrödinger permette una soluzione non perturbativa del problema.

Nota 3.10

Si può notare che l'isomorfismo strutturale tra l'operazione *commutatore di due operatori* su uno spazio di Hilbert complesso \mathcal{H} e *parentesi di Poisson di due*

funzioni sullo spazio delle fasi porta ad un'analogia tra l'evoluzione in Meccanica Quantistica ed i gruppi ad un parametro di trasformazioni simplettiche. Infatti l'evoluzione nella rappresentazione di Schrödinger è data da trasformazioni unitarie che lasciano invariante la forma antisimmetrica $\langle \phi, \psi \rangle \equiv \Im(\phi, \psi)$. Se \mathcal{H} viene riguardato come somma diretta di due spazi di Hilbert reali

$$\mathcal{H}^0 = \mathcal{H}_r \oplus \mathcal{H}_i,$$

la struttura complessa dello spazio H può essere riguardata come struttura simplettica nello spazio di Hilbert reale \mathcal{H}^0 e l'evoluzione quantistica corrisponde formalmente ad un gruppo ad un parametro di trasformazioni simplettiche in uno spazio a infinite dimensioni il cui generatore formale è la forma quadratica

$$K(\psi) = \frac{1}{2}(\psi, -\Delta\psi) + (\psi, V\psi), \quad \psi = \psi_r + i\psi_i. \quad 3.57$$

Si ha infatti, *formalmente*,

$$i \frac{d\psi}{dt} = J \frac{\partial K}{\partial \bar{\psi}}, \quad \psi = \{\psi_r + \psi_i\}, \quad \bar{\psi} = \{\psi_r - i\psi_i\}. \quad 3.58$$

Questa scrittura formale non è in generale di utilità pratica, e comunque va notato che K è *solamente formalmente* differenziabile (per la struttura di Fréchet ottenuta riguardando \mathcal{H} come C^∞).

Sullo spazio di Hilbert \mathcal{H} possono essere costruite altre strutture simplettiche per associare alla Hamiltoniana H alcune equazioni hamiltoniane corrispondenti a teorie di campo classiche (queste equazioni sono spesso chiamate *idrodinamiche* per la loro analogia con le equazioni di campo della idrodinamica).

Ad esempio in $L^2(\mathbb{R}^1)$ si può utilizzare per costruire la forma simplettica l'operatore antisimmetrico $J \equiv \frac{\partial}{\partial x}$. Si deve notare che quest'operatore è chiudibile ma non limitato. Il suo spettro è continuo e copre l'intero asse immaginario e quindi l'operatore non ammette inverso limitato. Pertanto la forma simplettica definita dall'operatore J è singolare, e bisogna prestare attenzione a che tutte le espressioni che si introducono siano ben definite dal punto di vista matematico. Ad esempio ([Gar71]) con questa forma simplettica l'equazione KdV (di Korteweg, de Vries)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad 3.59$$

risulta Hamiltoniana con

$$H(u) = \int \frac{1}{2} \left(\left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|^2 + \frac{1}{6} u^4(x) \right) dx. \quad 3.60$$

In questo caso le parentesi di Poisson coinvolgono derivate funzionali e vanno maneggiate con cura.

Le espressioni diventano meno formali considerando il corrispondente sistema in $[0, 2\pi]$ con condizioni periodiche al bordo; in questo caso utilizzando la trasformata di Fourier discreta il sistema può essere realizzato in l^2 e la forma simplettica ha uno spazio nullo unidimensionale (ma rimane illimitata).

Con $u(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} u_n e^{inx}$, si possono scegliere come variabili canoniche $q_n \equiv u_n/n$, $p_n \equiv u_{-n}/n$, $n > 0$. Si noti che u_0 è una costante del moto e può essere posto uguale a zero. Con queste notazioni la parentesi di Poisson associata alla forma simplettica assume la forma

$$\{F, G\} = \frac{i}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\partial F}{\partial q_n} \frac{\partial G}{\partial p_n} - \frac{\partial F}{\partial p_n} \frac{\partial G}{\partial q_n} \right). \quad 3.61$$

Il sistema Hamiltoniano associato all'equazione KdV è *completamente integrabile* nel senso dato a questo termine per i sistemi Hamiltoniani, cioè ammette un insieme completo di integrali primi I_k , $k \in \mathbb{Z}$ in involuzione (siccome il numero di gradi di libertà, e quindi il numero di integrali primi, è infinito, la dizione *completo* richiederebbe qualche precisazione).

Per un insieme denso di dati iniziali $\phi_0(x) \in L^2(0, 2\pi)$ la soluzione dell'equazione KdV $\phi(t; x) \in L^2(S^1)$ con dato iniziale $\phi_0(x)$ può essere scritta come

$$\phi(t, x) = F_{\phi_0}(\{I_k\}, \{\theta_k(t)\}), \quad F_{\phi_0}(\{I_k\}, \{\theta_k(0)\}) = \phi(t, 0),$$

dove F_{ϕ_0} è funzione degli integrali primi (variabili d'azione) e degli angoli $\theta_k(t)$ canonicamente associati, e questi ultimi soddisfano equazioni lineari a coefficienti costanti.

Gli elementi di questo insieme di dati iniziali (denso in $L^2(0, 2\pi)$) non hanno speciali proprietà di regolarità come funzioni di x ; pertanto la soluzione (3.59) non è facilmente ottenibile con metodi di analisi funzionale (che si applicano in generale a dati iniziali con opportune proprietà di regolarità).



APPENDICE 3A: IL TEOREMA DI WIGNER

Diamo in questa appendice la dimostrazione del Teorema di Wigner I sull'implementabilità mediante trasformazioni unitarie o antiunitarie degli automorfismi di Wigner delle trasformazioni di raggi di uno spazio di Hilbert \mathcal{H} di dimensione (complessa) maggiore di uno. Seguiremo l'esposizione di V. Bargmann [Bar64].

Indichiamo con $\hat{\phi}$ il raggio definito dal vettore unitario ϕ (la collezione di tutti i vettori in \mathcal{H} della forma $\phi' = \omega\phi$, $|\omega| = 1$). In Meccanica Quantistica i raggi rappresentano gli stati puri del sistema in esame. Definiamo $\langle \hat{\phi}, \hat{\psi} \rangle \equiv |(\phi, \psi)|$. Questa definizione è indipendente dal vettore scelto per rappresentare il raggio, ed viene indicata convenzionalmente *come probabilità di transizione* tra lo stato puro $\hat{\phi}$ e lo stato puro $\hat{\psi}$.

Una simmetria del sistema è per definizione un'applicazione $T : \hat{\phi} \rightarrow \hat{\psi}$ che gode delle seguenti proprietà:

- a) T è definita per ogni raggio,
- b) $\langle T\hat{\phi}, \hat{\psi} \rangle = \langle \hat{\phi}, T\hat{\psi} \rangle \forall \hat{\phi}, \hat{\psi} \in \mathcal{H}$,
- c) l'applicazione T è uno-a-uno,
- d) l'applicazione T è surgettiva.

Con queste notazioni il teorema di Wigner può essere enunciato così.

Teorema (Wigner)

Se T è un'applicazione che soddisfa a) . . . d) allora esiste un'applicazione $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ tale che

$$U\hat{\phi} \in T\hat{\phi} \quad 3A.1$$

e tale che

- 1) $U(\phi + \psi) = U\phi + U\psi$
- 2) $U(\lambda\phi) = \xi(\lambda)\phi$
- 3) $(U\phi, U\psi) = \xi(\phi, \psi)$

dove in alternativa $\xi(\lambda) = \lambda$ oppure $\xi(\lambda) = \bar{\lambda}$ per tutti i λ .

L'operatore U è isometrico ed è lineare o antilineare secondo l'alternativa precedente. Un'applicazione U che soddisfa (3A.1) verrà detta *compatibile con* T .

◇

Dimostrazione

Il caso di dimensione (complessa) uno è banale. Assumiamo pertanto che la dimensione complessa di \mathcal{H} sia ≥ 2 . Consideriamo tre raggi $\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \hat{\phi}_3$. L'espressione

$$\Delta(\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \hat{\phi}_3) \equiv (\phi_1, \psi_2)(\phi_2, \psi_3)(\phi_3, \psi_1) \quad 3A.2$$

è indipendente dalla scelta delle fasi ed è pertanto una funzione dei raggi. Notare che se $\dim \mathcal{H} \geq 2$ quest'espressione può avere valori complessi, e questo distinguerà tra trasformazioni unitarie e antiunitarie.

Denotiamo con γ la funzione definita da

$$\Delta(T\hat{\phi}_1, T\hat{\phi}_2, T\hat{\phi}_3) = \gamma(\Delta(\hat{\phi}_1, \hat{\phi}_2, \hat{\phi}_3)). \quad 3A.3$$

Notiamo che una trasformazione isometrica unitaria o antiunitaria induce una trasformazione dei raggi che preserva $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Il Teorema di Wigner afferma che anche il viceversa è vero.

Convienne estendere T dai raggi unitari a tutti i raggi definendo

$$T(c\hat{\phi}) \equiv cT(\hat{\phi}), \quad c > 0. \quad 3A.4$$

Manteniamo la notazione T per l'applicazione così estesa. Indichiamo con ρ un generico raggio. È semplice dimostrare che quest'applicazione estesa ha le proprietà

$$T(c\rho) = cT(\rho), \quad \langle T\rho_1, T\rho_2 \rangle = \langle \rho_1, \rho_2 \rangle, \quad \|T\rho\| = \|\rho\|. \quad 3A.5$$

Notiamo preliminarmente che se $\{\hat{\phi}_1, \dots, \hat{\phi}_N\}$ è una collezione finita di raggi due a due ortogonali ($\langle \hat{\phi}_i, \hat{\phi}_j \rangle = \delta_{i,j}$) allora anche i raggi trasformati sono ortogonali. E se vale

$$\rho = \sum_1^N c_n \rho_n, \quad c_n > 0, \quad \forall 1 \leq n \leq N,$$

allora

$$T\rho = \sum_1^N c'_n T\rho_n, \quad |c'_n| = |c_n| > 0. \quad 3A.6$$

Fissiamo ora un raggio unitario $\hat{\phi}$ e sia $\hat{\phi}'$ definito da $T\hat{\phi} = \hat{\phi}'$. Scegliamo in modo arbitrario un rappresentativo ϕ in $\hat{\phi}$ e un rappresentativo ϕ' in $\hat{\phi}'$. Questa sarà la sola arbitrarietà nella costruzione. Notiamo che il gruppo delle trasformazioni unitarie agisce in modo transitivo sullo spazio di Hilbert, e pertanto esiste una trasformazione unitaria che porta ϕ' in ϕ . Possiamo quindi assumere, senza perdita di generalità, che $\phi' = \phi$.

Ogni vettore $u \in \mathcal{H}$ ha una decomposizione *unica* come

$$u = d\phi + \zeta, \quad (\zeta, \phi) = 0. \quad 3A.7$$

La strategia che utilizzeremo sarà di iniziare a costruire U nel caso $d = 2$ utilizzando le proprietà dell'applicazione T sui raggi generati dallo spazio vettoriale O dei vettori ortogonali a ϕ . Vedremo che questo dà luogo ad un'applicazione isometrica V in O lineare o antilineare dipendentemente dalle proprietà di trasformazione sotto T della funzione Δ in (3A.2).

La trasformazione indotta su tutto lo spazio (cioè per un a scelta arbitraria del numero complesso d in (3A.7)) si ottiene allora estendendo in modo lineare o antilineare per $d \in C$.

Se $u = \phi + \zeta$, $\zeta \in O$, $\|\zeta\| \neq 0$, è facile vedere che esiste un solo elemento ζ' tale che $\phi + \zeta' \in T\hat{u}$. Questa unicità, essenzialmente legata a disuguaglianze triangolari, è parte essenziale della costruzione data da Wigner.

Definiamo in O l'applicazione $V : \zeta' \equiv V\zeta$ e poniamo

$$U(\phi + \zeta) = \phi + V\zeta, \quad \zeta \in O. \quad 3A.8$$

Se $\zeta = 0$ poniamo $V\zeta = 0$. Notiamo innanzitutto che da

$$|(\phi + Vw, \phi + Vx)|^2 = |(\phi + w, \phi + x)|^2 \quad \forall x, w \in O,$$

segue

$$\Re(Vw, Vx) = \Re(w, x), \quad 3A.9$$

e se (w, x) è reale, allora $(Vw, Vx) = (w, x)$. Questo dimostra che V agisce come isometria in O .

Vogliamo dimostrare che l'applicazione V è lineare in O e $V(\alpha x) = \xi(\alpha)V(x)$ dove $\|\xi(\alpha)\| = \|\alpha\|$ è indipendente da x .

Se lo spazio di Hilbert \mathcal{H} ha dimensione complessa due, O ha dimensione complessa uno. In questo caso avremo $V(cw) = \xi(c)w$, $|c| = 1$. Consideriamo in O i vettori w e iw . Da (3A.9) segue $\Re(Viw, Vw) = 0$ e quindi $\xi(i) = \pm i$ (il segno dipende dall'applicazione V e quindi in ultima analisi dall'applicazione T considerata).

Da questo segue l'alternativa

$$\xi(i) = i \Rightarrow V(cw) = cV(w), \quad \text{oppure} \quad \xi(i) = -i \Rightarrow V(cw) = \bar{c}V(w). \quad 3A.10$$

(notare che $V(bw) = bV(w)$ se b è un numero reale). Se lo spazio di Hilbert ha dimensione complessa maggiore di due, e quindi O ha dimensione complessa maggiore di uno, siano f_1 e f_2 due versori ortogonali, e consideriamo il vettore $w = f_1 + f_2$. Allora, per ortogonalità, $Vw = f'_1 + f'_2$ e $V(\alpha w) = \xi_1(\alpha)f'_1 + \xi_2(\alpha)f'_2$; d'altra parte deve essere $V(\alpha w) = \xi_\omega(\alpha)w$. Ne segue $\xi_1(\alpha) = \xi_2(\alpha) (= \xi_\omega(\alpha))$. Notiamo le seguenti relazioni

$$\xi(\alpha + \beta) = \xi(\alpha) + \xi(\beta), \quad \xi(\alpha\beta) = \xi(\alpha)\xi(\beta), \quad \xi(\alpha^*) = \xi(\alpha)^*.$$

Abbiamo fin qui dimostrato che l'applicazione V ha le seguenti proprietà:

- 1) $V(x + w) = V(x) + V(w)$
- 2) $V(\alpha x) = \xi(\alpha)x$
- 3) $(Vx, Vw) = \xi(x, w)(x, w)$

dove la funzione ξ ha le proprietà descritte da (3A.10).

Possiamo ora estendere V a un'applicazione U su tutto \mathcal{H} in modo che le proprietà a), b), c) siano soddisfatte. Poniamo, per ogni numero complesso α

$$U(\alpha\phi + \zeta) = \xi(\alpha)\phi + V\zeta, \quad \zeta \in O.$$

Se $\alpha = 1$ la definizione coincide con la precedente. D'altra parte è banale verificare che le condizioni a), b), c) sono soddisfatte. Questo conclude la dimostrazione del teorema di Wigner.



È facile verificare che l'applicazione così costruita è unica, nel seguente senso: se la dimensione complessa dello spazio \mathcal{H} è maggiore di uno, se due applicazioni U_1 e U_2 additive ($(U(x+y) = U(x) + U(y) \quad \forall x, y \in \mathcal{H})$) sono compatibili con una stessa applicazione T tra raggi, allora esiste un numero complesso ω di norma uno tale che si abbia $U_2 = \omega U_1$.

APPENDICE 3B: OLONOMIA. FASE GEOMETRICA

L'olonomia è un concetto essenzialmente geometrico. Per un sistema che dipende da un agente esterno attraverso la variazione di uno o più parametri, alcune quantità possono non riassumere il valore di partenza al termini di un ciclo di variazione dei parametri.

Questo fenomeno è noto in Meccanica Classica; uno degli esempi classici è il trasporto parallelo di un vettore unitario il cui punto di applicazione percorre un circuito chiuso sulla sfera unitaria in R^3 .

Sia $\{r, e_1, e_2\}$ una terna di versori che individuano un sistema di riferimento; r è il versore della congiungente il punto di applicazione con il centro della sfera. Se il sistema di riferimento ruota con velocità angolare ω la legge del moto è

$$\dot{e} = \omega \wedge e.$$

La condizione di trasporto parallelo è $\omega = cr \wedge \dot{r}$ dove c è una costante. La legge del trasporto parallelo su una sfera è quindi

$$\dot{e} = c(r \wedge \dot{r}) \wedge e = -c(e, \dot{r})r. \quad 3B.1$$

Definendo un vettore unitario complesso ϕ sulla sfera mediante

$$\phi = \frac{e_1 + ie_2}{\sqrt{2}}, \quad (\bar{\phi}, \phi) = 1,$$

risulta

$$(\phi, \dot{\phi}) = 0. \quad 3B.2$$

Fissiamo ora arbitrariamente una base locale, cioè in ciascun punto (individuato dal vettore r) una base di versori u, v e il corrispondente vettore unitario complesso $n = u + iv$. È facile vedere che si ha

$$\dot{\phi}(t) = e^{-i\theta(t)} n(r(t)), \quad 3B.3$$

dove θ è l'angolo di cui u e v devono essere ruotati per coincidere con e_1, e_2 . Utilizzando (3B.2) e (3B.3) si vede che $\dot{\phi} = \Im(n, \dot{n})$ e quindi integrando sulla curva chiusa \mathcal{C}

$$\theta(\mathcal{C}) = \Im \oint_{\mathcal{C}} (n, dn) = - \oint_{\mathcal{C}} (v, du), \quad 3B.4$$

dove abbiamo indicato con ν la normale alla curva \mathcal{C} orientata verso l'esterno. Utilizziamo ora il teorema di Stokes per scrivere

$$\theta(\mathcal{C}) = \iint_{S:\partial S=\mathcal{C}} V, \quad 3B.5$$

dove V è la valutazione della due-forma $\mathfrak{I}m d\bar{n} \wedge dn$ sull'elemento di superficie della sfera unitaria.

Notare che la *olonomia* $\theta(\mathcal{C})$ non dipende dalla base u, v scelta, e che l'olonomia è espressa mediante una due-forma differenziale nello spazio dei parametri che descrivono il moto. Ne segue che per avere un'olonomia non nulla lo spazio dei parametri deve avere dimensione maggiore o uguale a due.

Scegliamo la base di vettori unitari (che corrisponde a coordinate sferiche)

$$u = \frac{r \wedge e_z}{|r \wedge e_z|}, \quad v = \frac{r \wedge u}{|r \wedge u|},$$

dove e_z è un vettore prefissato, e consideriamo il moto su una superficie sferica di raggio $|r|$. Abbiamo $V = \frac{(r, dS)}{|r|^3}$ e quindi

$$\theta(\mathcal{C}) = \iint_{S^3} \frac{(r, dS)}{|r|^3}, \quad 3B.6$$

dove abbiamo fatto uso della dualità in R^3 tra un vettore e una due-forma antisimmetrica. Dalla (3B.6) si vede che $\theta(\mathcal{C})$ è l'angolo solido sotteso da \mathcal{C} all'origine (o anche il flusso attraverso \mathcal{C} del campo magnetico generato da un dipolo posto all'origine). La formula (3B.5) può allora essere generalizzata al caso del moto su una superficie compatta non contraibile

Considerazioni analoghe possono essere fatte in generale in Meccanica Quantistica. Il campo vettoriale che individua il moto è qui generato da una Hamiltoniana che dipende da parametri $\alpha_1, \dots, \alpha_M$ e i vettori unitari su una sfera vengono sostituiti da vettori unitari in uno spazio di Hilbert (*sfera di Bloch*). In questo caso uno dei parametri è il tempo.

Supponiamo che gli altri parametri dipendano dal tempo in modo differenziabile e periodico con periodo τ , e supponiamo per ciascun valore di $t \in [0, \tau]$ la Hamiltoniana $H(t) \equiv H(\alpha_1(t), \dots, \alpha_M(t))$ abbia un autovalore semplice isolato $\lambda(t)$ che varia nel tempo con continuità.

Questo è il caso se la Hamiltoniana viene ottenuta mediante una piccola perturbazione periodica di periodo T di una Hamiltoniana indipendente dal tempo $H_0 = \nabla + V(x)$ che ha un autovalore semplice isolato λ con autovettore ϕ_0 . Per fissare le idee consideriamo il caso

$$H_\epsilon(t) = -\Delta + V + \epsilon V_1(t),$$

dove il potenziale V_1 è limitato e dipende dal tempo in modo periodico con periodo T . Senza perdita di generalità scegliamo $V_1(0) = 0$.

Sia $\phi_\epsilon(t)$ la soluzione dell'equazione

$$i \frac{d\phi_\epsilon(t)}{dt} = H_\epsilon(t)\phi_\epsilon(t), \quad \phi_\epsilon(0) = \phi_0.$$

Poiché $H_\epsilon(t)$ è una piccola perturbazione regolare di H vi sarà, per ϵ sufficientemente piccolo, un autovalore *isolato* $\lambda_\epsilon(t)$ di $H_\epsilon(t)$ che varia con continuità al variare di t . È anche possibile scegliere per ciascun valore di t un autovettore di $H_\epsilon(t)$ relativo all'autovalore $\lambda_\epsilon(t)$, che indichiamo con $\psi_\epsilon(t)$, tale che $\psi_0(t) = \phi_0(t)$ e che $|\psi_\epsilon(t) - \psi_0(t)|_2 < C\epsilon^2$.

Tenuto conto della periodicità dell'operatore $H_\epsilon(t)$ ne segue che, a meno di un errore di ordine due in ϵ , $\psi_\epsilon(T)$ e $\psi_\epsilon(0)$ differiscono per una fase del tipo $e^{i\theta_\epsilon(T)}$. Se $\epsilon = 0$, si ha $\theta_0(\tau) = \lambda_0 T$. Vogliamo trovare la differenza $\delta_\epsilon(T) = \theta_\epsilon(T) - \lambda_0 T$. Questa quantità dipende dalla variazione dei parametri nella Hamiltoniana ed è detta *fase di Berry* o anche *fase geometrica*.

Da queste considerazioni si evince che la definizione di fase di Berry è strettamente connessa al trascurare nella variazione dell'autofunzione termini di ordine due in ϵ e quindi è giustificata se ϵ è molto piccolo, quindi per una variazione *molto lenta* dei parametri.

La fase geometrica è *pertanto definita solo nel limite adiabatico*.

Nota 3B.1

Il motivo per cui la differenza tra due stati non è nulla (e di ordine ϵ^2) risiede nel fatto che le Hamiltoniane $H_\epsilon(t)$ *non commutano in generale*. Questo implica che $\psi_\epsilon(t)$ ha una componente (di ordine ϵ^2 ; questo è indice di *trasporto parallelo*) perpendicolare a $\phi_\epsilon(t)$. Questo è un fenomeno tipicamente quantistico ed è responsabile per il fatto che *per tempi molto più lunghi di T* la descrizione mediante un cambiamento di fase non è più valida. Se il potenziale dipende in modo periodico dal tempo, nel caso $H_\epsilon = -\Delta + \epsilon V(t)$ la funzione $\phi_\epsilon(t, x)$ *genericamente* converge a zero localmente.



Nota 3B.2

Nel caso di sistemi Hamiltoniani classici, se la Hamiltoniana per $\epsilon = 0$ ammette una soluzione periodica isolata la ricerca per ϵ piccolo e diverso da zero di una soluzione periodica di periodo $T(\epsilon)$ incognito viene effettuata con il metodo di Lyapunov-Schmidt cercando un punto fisso del funzionale d'azione di Lagrange. Questo strumento non è disponibile nel caso quantistico, e ci limiteremo a fare un'analisi perturbativa.



Prima di descrivere la problematica connessa al limite adiabatico, analizziamo in dettaglio il caso di un sistema che ha due gradi di libertà e quindi è descritto

nello spazio di Hilbert C^2 ; questo sistema, che viene utilizzato per descrivere il moto dello spin di una particella di spin $\frac{1}{2}$, è abbastanza semplice per permettere un'analisi (quasi) completa, e d'altra parte importante perché esso è alla base della teoria dell'informazione quantistica (rappresenta un *q-bit*).

Il sistema che descriviamo ha avuto una realizzazione sperimentale ad opera di Bitter e Dubbers mediante un fascio di neutroni, inizialmente polarizzati lungo l'asse z che percorrono una guida rettilinea lungo l'asse delle z . Il moto spaziale è rettilineo uniforme con velocità ϵ .

Nel sistema di riferimento in cui i neutroni sono fermi assumiamo che il campo magnetico ruoti lentamente attorno a una direzione nello spazio che fa con la verticale un angolo θ

$$B(t)_x = B \sin \theta \cos(2\pi t \epsilon), \quad B(t)_y = B \sin \theta \sin(2\pi t \epsilon), \quad B(t)_z = B \cos \theta, \quad 3B.7$$

dove ϵ è un parametro piccolo; considereremo il *limite adiabatico* $\epsilon \rightarrow 0$. Il vettore \hat{B} nel corso del tempo si muove seguendo una curva \mathcal{C} che è posta su un cono con angolo solido $\Omega(\mathcal{C}) = 2\pi(1 - \cos 2\pi t \epsilon)$.

Notiamo che questo sistema quantistico può essere analizzato nel seguente modo: il vettore che rappresenta lo stato ha lunghezza (norma) uno e quindi si muove in $C^2 \simeq R^4$ su di una varietà sferica di dimensione 3 e di raggio unitario (sfera di Bloch).

Se il campo magnetico fosse costante, il moto del punto rappresentativo seguirebbe un cerchio massimo \mathcal{C}_θ e sarebbe periodico (con un periodo che dipende dall'intensità del campo magnetico). Ci siamo ridotti così a un problema di dinamica classica.

In moto indotto dal campo magnetico variabile è un moto rotatorio con direzione e velocità angolare variabili nel tempo. Come moto classico è un moto complicato; su tempi lunghi possiamo cercare di trattarlo con il metodo della media dopo aver dimostrato che il sistema ha una misura invariante. Questo metodo in circostanze opportune può fornire una descrizione semplice a meno di termini che sono di ordine ϵ^2 uniformemente nel tempo. Ad esempio si può dimostrare che il metodo della media è applicabile nell'esempio semplice che abbiamo analizzato e quindi la fase di Berry dà in questo caso l'approssimazione all'ordine uno in ϵ a meno di termini che sono $o(\epsilon)$ *uniformemente nel tempo*.

La versione quantistica del metodo della media è *il metodo adiabatico* che discuteremo in qualche dettaglio nel cap. 13. Sotto opportune ipotesi, cui accenneremo in quel capitolo, di questo metodo si può dare una versione rigorosa nel senso che può essere data una maggiorazione accurata dei termini che si trascurano. L'ipotesi sullo spettro di H , e il fatto che il dato iniziale sia un autovettore all'autovalore isolato, sono condizione cruciale per il successo della versione che daremo del metodo adiabatico.

Iniziamo col fare un'analisi *non rigorosa*; questo è finalizzato a rendere intuitivo il procedimento e anche ad indicare cosa ci si può aspettare se il moto varia

in modo casuale secondo una determinata legge di probabilità, e al metodo della media classico viene sostituito l'utilizzo di proprietà ergodiche del sistema. Daremo in seguito una versione rigorosa.

Fissato un tempo T dividiamolo in K parti uguali ciascuna di lunghezza $T/K \equiv \delta$. Faremo poi tendere prima $K \rightarrow \infty$ e poi $T \rightarrow \infty$. Possiamo pensare di approssimare il moto descritto dalla Hamiltoniana $H(t)$ nell'intervallo $[0, T]$ con un moto generato successivamente nell'intervallo $[(k-1)\delta, k\delta)$, $k = 1, \dots, K$, dalle Hamiltoniane $H_k^\epsilon \equiv H_\epsilon((k-1)\delta)$.

Questo moto "approssimato" sarà descritto da

$$\psi(T) = e^{-i\delta H_K^\epsilon} \mathbf{1} e^{-i\delta H_{K-1}^\epsilon} \mathbf{1} \dots \mathbf{1} e^{-i\delta H_2^\epsilon} \mathbf{1} e^{-i\delta H_1^\epsilon} \phi_0. \quad 3B.8$$

Assumiamo per semplicità che tutte le Hamiltoniane H_k^ϵ abbiano spettro discreto. Per ciascun tempo $k\delta$ indichiamo con $\xi_{k,1}^\epsilon$ l'autovettore isolato $E_{k,1}^\epsilon$ della Hamiltoniana H_k^ϵ che consideriamo.

Inseriamo in (3B.8) a ciascun tempo $k\delta$ al posto dell'identità $\mathbf{1}$ un sistema completo di autovettori di H_k^ϵ , che indichiamo con ξ_{k,m_k}^ϵ , $m_k = 1, 2, \dots$. L'espressione per $\psi(T)$ assume allora la forma di somma di prodotti di termini, ciascuno corrispondente per ciascun tempo $k\delta$ alla scelta di un vettore della corrispondente base.

Ciascuno dei fattori è dato dal valore di aspettazione di $e^{-i\delta H_k^\epsilon}$ tra elementi della base di H_k^ϵ ed elementi della base di H_{k+1}^ϵ ed è quindi della forma

$$e^{-i\delta E_{k,m}^\epsilon}(\xi_{k+1,m}^\epsilon, \xi_{k,n}^\epsilon).$$

L'espressione ottenuta risulta sempre più complicata al crescere di K (e quindi al diminuire di δ ; noi vogliamo prendere il limite $\delta \rightarrow 0$).

Utilizzando il metodo della media si può vedere, almeno formalmente, che se ogni Hamiltoniana H_k ha spettro non degenerare e senza punti di accumulazione al finito, ciascuno dei termini nel prodotto che si riferiscono *ad elementi delle basi diversi da* $\xi_{k,1}^\epsilon$ (per qualche valore di k) sono di ordine δ^2 . Assumiamo che la somma dei loro prodotti tenda a zero quando si scelga opportunamente $K = K(T)$ e si prenda T abbastanza grande. A supporto di questa ipotesi si possono utilizzare argomenti formali (o un fare un uso accurato del teorema della media classico, dopo avere verificato che sussistono le condizioni di applicabilità).

La difficoltà nel rendere rigorosa un'analisi di questo tipo sta nella difficoltà di verificare la convergenza della serie uniformemente in K . La convergenza di somme parziali è di più facile dimostrazione ma va tenuto presente che in uno spazio di Hilbert di dimensione infinita la convergenza delle proiezioni di una successione di vettori su ciascun elemento di una base ortonormale completa non implica convergenza della successione di vettori. Il caso di uno spazio di Hilbert di dimensione finita (come nell'esempio dato) presenta minori difficoltà. Il contributo dei termini ottenuti scegliendo per ogni valore di k il vettore $\xi_{k,1}^\epsilon$ è

$$e^{-i\sum_k \delta E_{k,1}^\epsilon} \prod_{k=1}^K (\xi_{k+1,1}^\epsilon, \xi_{k,1}^\epsilon). \quad 3B.9$$

Per $\delta \rightarrow 0$ il fattore esponenziale converge a $e^{-i \int_0^\tau E_{n_0}^\epsilon(t) dt}$. Questo è il termine che indichiamo come *contributo dinamico alla variazione della fase*. Il termine $\Xi_K^\epsilon(\tau)$ è dovuto alla variazione nel tempo dello stato di riferimento; nell'ipotesi che i termini non diagonali diano contributo zero nel limite $K \rightarrow \infty$, in questo limite $\Xi_K^\epsilon(\tau)$ deve tendere a una fase.

Per stimare $\Xi_K^\epsilon(\tau)$ utilizziamo

$$\begin{aligned} \langle \xi_{k+1}^\epsilon, \xi_k^\epsilon \rangle &= \delta \langle \xi_k^\epsilon + \dot{\xi}_k^\epsilon, \xi_k^\epsilon \rangle + O(\delta^2) = 1 + \delta \langle \dot{\xi}_k^\epsilon, \xi_k^\epsilon \rangle + O(\delta^2) \\ &= e^{\delta \langle \dot{\xi}^\epsilon(t), \xi^\epsilon(t) \rangle} + O(\delta^2). \end{aligned} \quad 3B.10$$

Notando che $\xi_n^\epsilon(t)$ ha lunghezza costante, risulta che il fattore esponenziale nel primo termine è puramente immaginario e pertanto

$$\langle \xi_{k+1}^\epsilon, \xi_k^\epsilon \rangle = e^{i \Re \langle \delta \langle \dot{\xi}^\epsilon(t), \xi^\epsilon(t) \rangle \rangle} + O(\delta^2). \quad 3B.11$$

Notiamo che, al limite $\delta \rightarrow 0$, $\dot{\xi}^\epsilon$ è dato dalla legge di evoluzione del vettore unitario $\xi(t)$ per il flusso della Hamiltoniana dipendente dal tempo $H_\epsilon(t)$. Quindi al limite $\delta \rightarrow 0$ otteniamo

$$\phi^\epsilon(\tau) = e^{-i \int_0^\tau E_{n_0}^\epsilon(t) dt} \Xi^\epsilon, \quad \Xi^\epsilon = e^{i \int_0^\tau \Re \langle \dot{\xi}^\epsilon(t), \xi^\epsilon(t) \rangle dt} \phi(0).$$

Il fattore di fase geometrica (fase di Berry) $\Omega^\epsilon \equiv -i \log \Xi^\epsilon$ può come prima essere espresso come

$$\Omega^\epsilon = \int_0^\tau \Re \langle d\xi^\epsilon(t) \wedge \xi^\epsilon(t) \rangle dt \quad 3B.12$$

(la forma differenziale si intende nello spazio in cui sono coordinate il tempo e i parametri la cui variazione descrive la dipendenza di $H_\epsilon(t)$ da t .)

Si può notare che abbiamo fatto l'ipotesi che per ciascun valore di ϵ sufficientemente piccolo tutti gli autovalori siano non degeneri per ogni valore di t . Se l'autovalore corrispondente della Hamiltoniana diventa degenerare al tempo t_0 l'integrale in (3B.12) può diventare singolare in t_0 .

Diamo ora qualche cenno ad una trattazione rigorosa che utilizza il formalismo adiabatico. Dal punto di vista della matematica l'evoluzione adiabatica è un trasporto parallelo associato ai sottospazi spettrali di una Hamiltoniana $H_\epsilon(t)$ che dipende dal tempo.

È importante che i sottospazi che consideriamo siano distinguibili nel corso dell'evoluzione e pertanto il metodo si applica usualmente nel caso di una "piccola" perturbazione di una Hamiltoniana indipendente dal tempo, i cui sottospazi spettrali possano essere utilizzati come identificatori.

Il metodo consiste nella ricerca dalla dinamica che meglio approssima quella descritta da una Hamiltoniana dipendente dal tempo $H_\epsilon(t)$. Esso non è limitato

al caso in cui il sottospazio di interesse sia unidimensionale e può essere applicato anche a casi in cui sottospazi si intersecano nel corso del moto, ma allora l'approssimazione è peggiore (tipicamente polinomiale nel piccolo parametro ϵ che quantifica il discostarsi del moto da uno con generatore indipendente dal tempo), mentre nel caso di sottospazi isolati l'approssimazione è migliore di ϵ^N per ogni N (e talvolta è esponenziale).

Noi tratteremo solamente il caso in cui il sottospazio di interesse ha dimensione uno. Se λ_0 è il corrispondente autovalore, il moto imperturbato è periodico di periodo $2\pi/\lambda_0$.

La Hamiltoniana ha la forma $H_\epsilon(t) = H_0 + \epsilon H_1(t)$. Indicheremo con $P_\epsilon(t)$ il proiettore (ortogonale) su un autostato di $H_\epsilon(t)$ che varia nel tempo rimanendo a ciascun istante isolato rispetto alla parte restante dello spettro di $H_\epsilon(t)$. Si ha $\dot{P}_\epsilon(t) \equiv O(\epsilon)$. Cerchiamo una Hamiltoniana che dia un'evoluzione, parametrizzata da τ , scelta in modo tale che $\frac{dP}{d\tau} \equiv O(\epsilon^2)$ cosicché la nuova evoluzione approssima meglio l'evoluzione vera.

Dimostriamo che se scegliamo come nuova hamiltoniana

$$H_{ad}^\epsilon(t, P(t)) = H_\epsilon - \frac{i}{2}[\dot{P}_\epsilon(t), P_\epsilon(t)] \quad 3B.13$$

approssimiamo l'evoluzione a ordine ϵ per tempi di ordine ϵ^{-1} . Notiamo che sotto condizioni abbastanza generali l'operatore $H_{ad}^\epsilon - H_\epsilon$ è limitato e autoaggiunto.

Questo *teorema adiabatico* è stato dimostrato da M.Born e V.Fock [BF28] per il caso di hamiltoniane con spettro discreto e non degenero. La dimostrazione nel caso generale è dovuta a T.Kato [Kat58].

Indichiamo con $U_{ad}^\epsilon(t)$ l'operatore di evoluzione associato alla Hamiltoniana $H_{ad}^\epsilon(t)$. Faremo le seguenti ipotesi.

- i) $H_{\epsilon(t)}$ è una famiglia di operatori autoaggiunti su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} uniformemente limitata dal basso, con dominio indipendente da t .
- ii) Per ciascun valore di ϵ la funzione $H_\epsilon(t)$ è k -volte differenziabile in t come operatore su \mathcal{H} .
- iii) Lo spettro di $H_\epsilon(t)$ ha "buchi" e $P_\epsilon(t)$ è la proiezione spettrale su una banda dello spettro che ha distanza $\delta(t)$ dalla parte restante dello spettro, con $\inf_t \delta(t) = \delta_0 > 0$.

Sotto queste ipotesi si dimostra il seguente risultato ([ASY87]).

Teorema 3 B.1

a) Dato un intervallo I dell'asse reale che contiene l'origine e con la notazione

$$P_\epsilon(t) = U_\epsilon(t) P U_\epsilon^*(t), \quad P(t) = U_{ad}(t) P U_{ad}^*(t), \quad 3B.14$$

per ϵ abbastanza piccolo si ha

$$P_\epsilon(t) - P(t) = \epsilon C_\epsilon(T), \quad t \in [0, T], \quad 3B.15$$

dove C_ϵ è una funzione limitata crescente.

b) Se si prende $K = +\infty$ nell'ipotesi ii), allora

$$P_\epsilon(t) - P(t) = O(\epsilon^\infty), \quad t \in I \setminus \text{Supp}\left(\frac{dP}{dt}\right) \quad 3B.16$$

(il limite essendo inteso in norma). La costante $C_\epsilon(T)$ cresce con T e si ha in generale $\epsilon C_\epsilon(\epsilon^{-1}) = O(1)$.

◇

Diamo una traccia della dimostrazione, anche perché essa è un prototipo di dimostrazione di teoremi multiscale o adiabatici. Ricordiamo che vogliamo ottenere stime valide fino a tempi di ordine di grandezza ϵ^{-1} ; conviene quindi riscalarare il tempo e scrivere l'equazione nella forma

$$i \frac{\partial U_\epsilon(t)}{\partial t} \phi = \epsilon^{-1} H(t) U_\epsilon(t), \quad U_\epsilon(0) = \mathbf{1}. \quad 3B.17$$

Sotto le nostre ipotesi questa equazione ha soluzione unica e fornisce una famiglia fortemente continua di operatori unitari $U_\epsilon(s)$ (non un gruppo se la Hamiltoniana dipende dal tempo); inoltre $U_\epsilon(s)\phi$ è fortemente differenziabile in s per $\phi \in D(H_s)$ (che abbiamo supposto indipendente da s).

Considerazioni analoghe valgono per l'equazione *adiabatica*

$$i \frac{\partial U_{\text{ad}}(t)}{\partial t} \phi = \epsilon^{-1} H_{\text{ad}}(t, P)(t) U_{\text{ad}}(t), \quad U_{\text{ad}}(0) = \mathbf{1}, \quad 3B.18$$

dove H_{ad} è data in (3B.13).

Notiamo innanzitutto che l'evoluzione $U_{\text{ad}}(t, P)$ indotta dalla Hamiltoniana (3B.13) disaccoppia $P(t)\mathcal{H}$. Questo si deduce da

$$U_{\text{ad}}(t, P) P(t) = P(t) U_{\text{ad}}(t, P) \quad 3B.19$$

che viene dimostrata notando che la relazione è certamente vera per $t = 0$ e dimostrando, per calcolo esplicito, che la derivata rispetto al tempo della differenza dei due termini è nulla per ogni valore di t .

Il passo successivo consiste nell'ottenere stime a priori per l'operatore

$$\Omega(t) = U_{\text{ad}}^*(t, P) U_\epsilon(t). \quad 3B.20$$

Notare che $U_{\text{ad}}(t, P)$ è un operatore unitario, e quindi una stima di Ω dà una stima della differenza tra le due dinamiche. Utilizzando il teorema fondamentale

del calcolo e tenendo conto che $\Omega(0) = \mathbf{1}$ si vede che $\Omega(t)$ soddisfa l'equazione integrale di tipo Volterra

$$\Omega(t) = \mathbf{1} - \int_0^t K_\epsilon(s, P) \Omega(s) ds, \quad K_\epsilon(s, P) = U_{\text{ad}}^*(s, P) [\dot{P}(s), P(s)] U_{\text{ad}}(s, P). \quad 3B.21$$

Risolvendo quest'equazione per iterazione si ottiene, per $t \in I$,

$$\Omega(t) - \sum_{n=1}^N \Omega_n(t) = O(\epsilon^N), \quad \sup_{t \in I} \|\Omega_n(t)\| = O(\epsilon^{n-1}) \quad 3B.22$$

(ricordare che le equazioni (3B.17) e (3B.18) contengono a destra un fattore ϵ^{-1}). La (3B.22) non è ancora uno sviluppo in serie di potenze in ϵ perché l'operatore $K_\epsilon(s, P)$ dipende da ϵ . Per ottenere una serie di potenze in ϵ conviene ricordare che

$$P(t) = \frac{1}{2i\pi} \int_\gamma R(z, t) dz, \quad R(z, t) = (H(t) + z)^{-1}, \quad 3B.23$$

(con $\Im z \neq 0$ nell'espressione della risolvente), dove γ è un cammino chiuso che circonda la parte dello spettro sulla quale proietta $P(t)$ per tutti i tempi $t \in I$. Conviene anche utilizzare l'identità, facilmente verificabile da (3B.23),

$$Q(t) X(t) P(t) = -Q(t) ([H_{\text{ad}}(t), \tilde{X}(t)] + i\epsilon[\dot{P}(t), \tilde{X}(t)])P(t), \quad 3B.24$$

dove abbiamo utilizzato la notazione $Q(t) = \mathbf{1} - P(t)$. Per ogni operatore limitato X abbiamo posto

$$\tilde{X}(t) \equiv \frac{i}{2\pi} \int_\gamma R(z, t) X(t) R_{z,t}^{-1} dz. \quad 3B.25$$

Mediante questo procedimento si ottiene uno sviluppo di $\Omega(t)$ in potenze di ϵ ; i termini di ordine uno e due sono

$$\begin{aligned} \Omega_1(t) &= -i\epsilon U_{\text{as}}^*(t) \dot{P}(t) U_{\text{as}}(t), \\ \Omega_2(t) &= -i\epsilon \left[\int_0^t U_{\text{as}}^*(t) \dot{P}(t) U_{\text{as}}(t) dt \right]^2 (P - Q). \end{aligned}$$

Con queste stime la dimostrazione della parte a) del teorema 3B.1 è immediata poiché

$$\dot{\Omega}(t) = -K_\epsilon(t, P)\Omega(t), \quad \Omega(0) = \mathbf{1}.$$

Per dimostrare b) notiamo che le stime precedenti garantiscono che esiste una costante positiva c tale che

$$\left\| \int_0^t K_\epsilon(s) Y(s) ds \right\| \leq c\epsilon \sup_{0 \leq s \leq t} \{\|Y(s)\|, \|\dot{Y}(s)\|\}.$$

per ogni famiglia limitata $Y(t)$ di operatori. Da questo segue $\|\Omega_{n+1}(t)\| < \epsilon \|\Omega_n(t)\|$ e si deduce, poiché $K\epsilon$ è limitato,

$$\|\Omega_{n+1}(t)\| < c\epsilon \sup_{0 < s < t} \{\|\Omega_n(s)\|, \|\dot{\Omega}_n\|, \|\Omega_{n-1}\|\}$$

Da questo si ottiene in modo semplice la parte b) del teorema 3B.1.

La parte del teorema che riguarda il caso in cui $H(t)$ sia infinitamente differenziabile in t e $\dot{H}(t)$ sia zero al di fuori di un intervallo finito si ottiene dimostrando che in questo caso $\sup_{0 \leq t \leq \tau} (\mathbf{1} - P(t)) \Omega(t) P(t) = O(\epsilon^\infty)$; questo segue iterando l'equazione di Volterra.

♡

APPENDICE 3C: COMPORTAMENTO DELLE SOLUZIONI PER $t \rightarrow \pm\infty$

In questa Appendice utilizziamo le proprietà dispersive del nucleo integrale di $e^{it\Delta}$ per analizzare il comportamento delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger con hamiltoniana $H = -\Delta + V$ quando il potenziale è regolare e a supporto compatto (per la dimostrazione che segue queste condizioni possono essere invero molto indebolite). Utilizziamo la notazione $H_0 = -\Delta$.

Abbiamo già dimostrato che gli operatori e^{itH_V} costituiscono un gruppo di operatori unitari fortemente continuo. Vogliamo dimostrare che per ogni $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ esiste unico $\phi_\pm \in L^2(\mathbb{R}^3)$ tale che

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} |e^{-itH_0}\psi - e^{-itH_V}\phi_\pm|_2 = 0. \quad 3C.1$$

Questo significa che per ogni dato iniziale $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ esistono (unici) due elementi ϕ_\pm tale che, prendendo ϕ come dato iniziale per la hamiltoniana H_V e ψ per la hamiltoniana del moto libero, le due soluzioni tendono a coincidere nel remoto futuro (rispettivamente nel remoto passato).

Poiché $\limsup_{t \rightarrow \infty} \int_\Omega |e^{it\Delta}\psi(x)|^2 dx = 0$ per ogni insieme compatto Ω , la dimostrazione di 3C.1 risulta difficile. Conviene studiare anziché (3C.1) il problema (equivalente perché gli operatori sono unitari) dell'esistenza di ϕ_\pm tale che

$$\lim_{\pm t \rightarrow \infty} |\phi_\pm - e^{itH_V} e^{itH_0}\psi|_2 = 0 \quad 3C.2$$

o equivalentemente dell'esistenza di ψ_\pm tale che

$$\lim_{\pm t \rightarrow \infty} |\psi_\pm - e^{itH_0} e^{itH_V}\phi|_2 = 0. \quad 3C.3$$

Questi problemi sono equivalenti all'esistenza, su domini opportuni, degli operatori

$$W_\pm(H_V, H_0) = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_V} e^{itH_0} \quad 3C.4$$

e

$$W_{\pm}(H, H_V) = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_0} e^{itH_V}. \quad 3C.5$$

Questi operatori, se esistono, non hanno in generale come dominio tutto $L^2(R^3)$. Ad esempio, se $\phi_E \in L^2(R^3)$ soddisfa $H_V \phi_E = E \phi_E$ (è uno *stato legato* di $H_0 + V$) il limite in (3C.3) non esiste (il limite debole è il vettore nullo). Infatti, a causa della proprietà dispersiva di e^{-itH_0} , la norma di $e^{-itH_0} \phi_E$ ristretto a qualunque compatto tende a zero nel limite (quindi il limite debole di $e^{-itH_0} \phi_E$ è il vettore nullo) e questa proprietà non viene alterata dalla moltiplicazione per il fattore di fase e^{-iEt} . Pertanto il dominio dell'operatore (se quest'operatore esiste) non contiene gli stati legati di $H_0 + V$.

Torneremo nel cap. 17 con più dettagli sul problema dell'esistenza degli operatori $W_{\pm}(H_V, H_0)$ e $W_{\pm}(H_0, H_V)$ (operatori d'onda) per un generico potenziale V , e in generale sul problema dello *scattering* in Meccanica Quantistica. Qui ci limitiamo a dimostrare l'esistenza di questo operatore per V limitato e a supporto compatto utilizzando le proprietà dispersive che abbiamo dimostrato per $e^{it\Delta}$.

La dimostrazione segue la traccia di un teorema di Cook-Kuroda valido in condizioni molto più generali.

Notiamo che sono soddisfatte le seguenti condizioni

1) per un insieme denso D in $L^2(R^3)$ si ha

$$\forall \phi \in D, \exists t_0(\phi) : e^{-itH_V} \phi \in D(H_0) \cap D(H_V), \quad t_0 \leq t \leq \infty \quad 3C.6$$

dove $D(H)$ è il dominio dell'operatore H . Ad esempio si può prendere per D l'insieme delle funzioni due volte differenziabili a supporto compatto;

2) se $\phi \in D$, allora $V e^{-itH_0} \phi$ è continuo in t in $t_0 \leq t \leq \infty$;

3) se $\phi \in D$, allora

$$\int_{t_0}^{\infty} |V e^{-itH_0} \phi|_2 dt < \infty. \quad 3C.7$$

Per dimostrare la (3C.7) notiamo che dalle stime che abbiamo fatto segue

$$|(e^{-itH_0} \phi)(x)| \leq \left[\frac{1}{4\pi|t|} \right]^{\frac{3}{2}} \int |\phi(y)| dy \quad 3C.8$$

e pertanto per ogni t_0

$$\int_{t_0}^{\pm\infty} |V(x) e^{-itH_0} \phi|_2 dt \leq |\phi|_1 \int_{t_0}^{\pm\infty} \left[\frac{1}{4\pi|t|} \right]^{\frac{3}{2}} |V|_2 dt < \infty. \quad 3C.10$$

Notiamo ora che l'esistenza dei limiti che definiscono $W_{\pm}(H_V, H_0)$ segue da 1) – 3) e dal teorema fondamentale del calcolo applicato alla funzione a valori operatore $e^{-itH_V} e^{-itH_0}$ (integrando la derivata tra t_0 e $\pm\infty$).

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [ASY87] J. Avron, R. Seiler, L. Yaffe, *Comm. Math. Phys.* 110 (1987) 33-49.
- [Bar64] V. Bargmann, *Jour. Math. Phys.* 5 (1964) 862-869.
- [BF28] M. Born, V. Fock, *Z. für Physik* 51 (1928) 165-169.
- [Gar71] S. Gardner, *Jour. Math. Phys.* 12 (1971) 1948-1951.
- [Kad65] R.V. Kadison, *Topology* 3 suppl. 2 (1965) 178-195.
- [Kat58] T. Kato, *Phys. Soc. Jap.* 5 (1958) 435-439.
- [KR67] R.V. Kadison, J. Ringrose, *Comm. Math. Phys.* 1 (1967) 32-63.
- [Wig59] E.P. Wigner, *Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra*, Academic Press 1959.

CAPITOLO 4
ELEMENTI DI TEORIA DELLE C^* -ALGEBRE; AUTOMORFISMI E
DERIVAZIONI. CONDIZIONE K.M.S.

Abbiamo notato che una struttura naturale per la formulazione della Meccanica Quantistica è quella che associa alle osservabili una particolare classe di operatori su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , agli stati puri i proiettori ortogonali su sottospazi di \mathcal{H} di dimensione uno e ad altri stati operatori positivi di classe traccia, con traccia uno (le matrici densità).

Questa semplice caratterizzazione di stati ed osservabili può risultare inadeguata per descrivere sistemi con un numero infinito di gradi di libertà, come è il caso della teoria di Campi Quantizzati e della Meccanica Statistica Quantistica. Conviene quindi estendere il formalismo per comprendere anche questi casi; le strutture risultanti sono le C^* -algebre ed i loro automorfismi.

4.1 ELEMENTI DI TEORIA DELLE C^* -ALGEBRE

Notiamo innanzitutto che l'insieme degli operatori limitati su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} costituisce un'algebra su cui è definita un'involuzione $A \rightarrow A^*$ ed una norma $A \rightarrow |A|$, con

$$|A| = \sup_{\phi \in \mathcal{H}; |\phi|=1} |A\phi|.$$

Questa norma gode delle proprietà $|A^*A| = |A|^2$, $|A| = |A^*|$, $|AB| \leq |A||B|$; esse saranno poste alla base della nuova struttura.

Definizione 4.1

Una Banach $*$ -algebra è un'algebra \mathcal{A} che ammette una struttura di spazio di Banach con norma $|a|$ e un'involuzione $a \rightarrow a^*$ con $(\lambda a)^* = \bar{\lambda}a^*$ e $(ab)^* = b^*a^*$.

◇

Descriveremo i sistemi quantistici con una sottoclasse di algebre di Banach caratterizzate da condizioni sulla norma. Queste condizioni sono quelle soddisfatte dall'algebra degli operatori lineari su uno spazio di Hilbert, e sono in effetti così restrittive che potremo dimostrare che ogni algebra di questo tipo ammette una rappresentazione fedele come sottoalgebra degli operatori limitati su un opportuno spazio di Hilbert.

Imporremo anche spesso la condizione che l'algebra considerata ammetta un'identità. Questa limitazione non è essenziale per le considerazioni che svolgeremo, e il suo solo scopo è quello di rendere le dimostrazioni più semplici.

Le algebre che considereremo godono tuttavia sempre della proprietà di ammettere un'unità approssimata a sinistra, cioè una successione di elementi $\{a_n\}$ tali che

$$\forall b \in \mathcal{A} \quad \sup_{b \in \mathcal{A}} |a_n b - b| \leq c_n, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} c_n = 0.$$

Equivalentemente si può richiedere l'esistenza di un'identità approssimata a destra, ed in effetti di una successione che costituisce un'identità approssimata bilatera. Naturalmente se esiste un'identità e nell'algebra allora la successione $\{e, \dots, e, \dots\}$ è un'identità bilatera approssimata.

Ad esempio l'algebra $l^\infty(Z)$ non ammette identità ma la successione $\{v_m^N\}$ definita da

$$v_m^N = 1, \quad m \leq N, \quad v_m^N = 0 \quad n > N$$

è un'identità approssimata bilatera.

Definizione 4.2

Una C^* -algebra è una Banach*-algebra la cui norma soddisfa le condizioni

i) $|ab| \leq |a||b| \quad \forall a, b \in \mathcal{A}$

ii) $|a^*a| = |a|^2 \quad \forall a \in \mathcal{A}$

iii) $|e| = 1$

dove e è l'identità dell'algebra. Se \mathcal{A} non ha un'identità allora si chiede $\lim_{n \rightarrow \infty} |a_n| = 1$ per ogni unità approssimata.

◇

Nota 4.1

Dalle proprietà i), ii) si deduce un'ulteriore proprietà della norma, che risulta utile nelle dimostrazioni, cioè che $|a^*| = |a|$. Infatti da $|a^2| = |a^*a| \leq |a^*||a|$ segue $|a| \leq |a^*|$ se $|a| \neq 0$. Invertendo il ruolo di a e di a^* si deduce $|a^*| \leq |a|$ se $|a^*| \neq 0$. D'altra parte $|a^*| = 0 \Leftrightarrow |a| = 0$.

♣

Semplici esempi semplici di C^* -algebre sono dati da

- (1) L'algebra delle matrici $N \times N$ a termini complessi, con coniugazione data da $A \rightarrow A^*$ (l'aggiunto di A) e norma

$$|A| \equiv \sup_{u \in C^N, |u|=1} (u, Au).$$

- (2) L'algebra $B(\mathcal{H})$ degli operatori limitati su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , con coniugazione e norma data come all'esempio (1).

- (3) L'algebra delle funzioni continue e limitate a valori complessi $C_b(\Omega)$ su un aperto Ω di \mathbb{R}^N con coniugazione data dalla coniugazione complessa e norma data da

$$|f| \equiv \sup_{x \in \Omega} |f(x)|.$$

Definizione 4.3

Indichiamo con e l'identità dell'algebra \mathcal{A} . Un elemento $a \in \mathcal{A}$ è detto

normale se $a^*a = aa^*$,

hermitiano se $a = a^*$,

unitario se $a a^* = a^* a = e$,

positivo se esiste nell'algebra un elemento b tale che sia $a = b^* b$,

proiettore se $a = a^*$ e $a^2 = a$,

inverso di $b \in \mathcal{A}$ se $a b = b a = e$.

Se la C^* -algebra non ha l'identità, le definizioni di unitario e di inverso vengono opportunamente modificate utilizzando unità approssimate. \diamond

Definizione 4.4 – automorfismi

Uno $*$ -automorfismo di \mathcal{A} è un'applicazione invertibile $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ che preserva la struttura di C^* -algebra, l'identità (la classe di identità approssimate) e commuta con l'involuzione. \diamond

Definizione 4.5 – stati

Stato di una C^* -algebra è un funzionale lineare continuo che assume valori non negativi sugli elementi positivi di \mathcal{A} e valore uno sull'identità (o valori che tendono a uno su ogni identità approssimata). In generale utilizzeremo il simbolo ρ per indicare un generico stato. \diamond

Definizione 4.6

Per costruzione gli stati formano una struttura affine. Stati *puri* di un'algebra sono gli elementi estremali (non decomponibili) di questa struttura. Un teorema di Choquet garantisce che ogni stato appartiene all'insieme convesso sotteso dagli stati puri. \diamond

Nel caso dell'algebra commutativa $C_b(\Omega)$ gli stati sono le misure di Radon di massa totale uno. Gli stati puri sono le misure di Dirac δ_ω concentrate nel punto

$\omega \in \Omega$. Ogni funzione $g(\omega) \in L^1(\Omega, d\mu)$ con $g(\omega) \geq 0$ e $\int_{\Omega} g(\omega) d\mu = 1$ definisce uno stato sull'algebra $C_b(\Omega)$ ponendo

$$\rho_g : f \rightarrow \int f(\omega)g(\omega) d\mu, \quad \forall f \in C(\Omega). \quad 4.4$$

Gli stati si differenziano tra loro per le loro proprietà rispetto a successioni o a filtri. Ricordiamo che un filtro \mathcal{F} in una C^* -algebra \mathcal{A} è un insieme di elementi parzialmente ordinato in cui due qualunque elementi ammettono un estremo superiore in \mathcal{A} . Inoltre esiste un estremo superiore del filtro, cioè un elemento $C \in \mathcal{F}$ che per definizione è il più piccolo elemento di \mathcal{F} tale che $C - a \geq 0, \forall a \in \mathcal{F}$.

Definizione 4.7

Uno stato ρ è detto *normale* se

$$\sup_{a \in \mathcal{F}} \rho(a) = \rho(C). \quad 4.5$$

◇

Tutti gli stati dell'algebra delle matrici $N \times N$ a valori complessi sono normali. Per l'algebra delle funzioni continue sull'intervallo $[-1, 1]$ gli stati che corrispondono alla valutazione in un punto (ad esempio l'origine) non sono normali. Per vedere questo, basta considerare il filtro delle funzioni continue $f(x)$ tali che $f_{\alpha}(x) \leq 1, f_{\alpha}(0) = 0$.

Il loro estremo superiore è la funzione identicamente uguale ad uno, ma la valutazione nell'origine di questa funzione non coincide con il limite della valutazione delle f_{α} che è zero.

In quest'esempio, gli stati che corrispondono a misure assolutamente continue rispetto alla misura di Lebesgue sono stati normali. Questi stati corrispondono a funzioni positive, integrabili secondo Lebesgue e di integrale uno.

Essi possono essere estesi a stati normali sull'algebra L^{∞} delle funzioni essenzialmente limitate su $[-1, 1]$. Ne segue che $L^1[-1, 1]$ è contenuto nel duale di $L^{\infty}[-1, 1]$ ma non coincide con questo insieme.

Per avere un altro esempio di stato che non è normale, consideriamo la C^* -algebra (con identità) composta dalle successioni numeriche $v \equiv \{v_n\}, v_n \in C$, con prodotto $uv \equiv \{u_n v_n\}$ e con norma $|v| = \sup_n |v_n|$, tali che esista il limite $v_{\infty} \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} v_n$. La successione

$$v_1 \equiv \{1, 0, 0, \dots\}, \quad v_2 \equiv \{1, 1, 0, 0, \dots\}, \quad v_3 \equiv \{1, 1, 1, 0, 0, \dots\}$$

è un filtro e il suo estremo superiore è $\bar{v} \equiv \{1, 1, 1, 1, \dots\}$. Definiamo uno stato ρ nel modo seguente

$$\rho(v_k) = 0 \quad \forall k, \quad \rho(\bar{v}) = 1.$$

Esso non è normale, e si verifica anche facilmente che non è il limite di alcuna successione crescente di stati normali.

Abbiamo visto che gli stati normali su $C[-1, 1]$ possono essere estesi a stati normali su un'algebra più grande, $L^\infty[-1, 1]$, che ammette gli stati normali come preduale (ricordiamo che il preduale B_* di uno spazio di Banach B è uno spazio topologico tale che B possa essere identificato con lo spazio dei funzionali lineari continui su B_*). Una proprietà simile vale anche per le algebre non commutative, e porta, come vedremo più avanti, alla definizione di algebre di von Neumann e di W^* -algebre.

Definizione 4.8

Per una generica C^* -algebra \mathcal{A} utilizzeremo la seguente notazione.

Se il preduale esiste, lo denoteremo con il simbolo \mathcal{A}_* .

$\mathcal{A}_{1,+}^*$ è l'insieme degli stati (1 indica la normalizzazione, + la positività)

$\mathcal{A}_{*, 1,+}$ è l'insieme degli stati normali.

◇

Se l'algebra ammette un preduale \mathcal{A}_* gli elementi positivi di \mathcal{A}_* sono stati normali di \mathcal{A} .

Definizione 4.9

Notiamo che su una generica C^* -algebra \mathcal{A} sono definite in modo naturale due topologie

a) *Topologia uniforme*

Una base di intorni di $a \in \mathcal{A}$ è data da $\{b \in \mathcal{A}, |b - a| < \epsilon\}$ al variare di $\epsilon > 0$.

b) *Topologia debole*

Una base di intorni di $a \in \mathcal{A}$ è data da

$$\{b \in \mathcal{A}, |\rho(b) - \rho(a)| < \epsilon\}$$

al variare di $\epsilon > 0$ e di $\rho \in \mathcal{A}_{1,+}^*$. Quindi una successione $\{a_n\} \in \mathcal{A}$ converge debolmente se per ogni $\rho \in \mathcal{A}_{1,+}^*$ si ha

$$\lim_{n,m \rightarrow \infty} |\rho(a_n) - \rho(a_m)| = 0.$$

◇

Si può notare che la topologia uniforme è più fine di quella debole (contiene un numero maggiore di intorni). Equivalentemente la convergenza uniforme implica quella debole. Le due topologie sono equivalenti se e solo se \mathcal{A} è uno spazio vettoriale di dimensione finita.

Per una C^* -algebra vale la relazione seguente

$$|a|^2 \leq \sup_{\rho \in \mathcal{A}_{1,+}} [\rho(a^*a) + \rho(a a^*)].$$

Da questo segue che si ha convergenza uniforme se la convergenza debole è uniforme in ρ (da qui il nome).

Se l'algebra \mathcal{A} ammette un preduale \mathcal{A}_* si può definire un'altra topologia, quella $*$ -debole (detta anche *vaga*).

Definizione 4.10

La topologia $*$ -debole è la topologia che ammette come base d'intorni di $a \in \mathcal{A}$

$$\{b \in \mathcal{A}, \quad |\rho(a) - \rho(b)| < \epsilon\}$$

al variare di $\epsilon > 0$ e di $\rho \in \mathcal{A}_*$.

◇

Per definizione la topologia $*$ -debole è più debole della topologia *debole* (ha un numero minore di intorni); le due topologie coincidono solamente se l'algebra \mathcal{A} è autoduale, cioè $\mathcal{A} = (\mathcal{A}^*)^*$. L'importanza della topologia $*$ -debole risulta dal seguente teorema

Teorema 4.1 (Banach-Alaoglu)

Sia X uno spazio di Banach, X^* il suo duale. La palla unitaria di X^* (che indicheremo con X_1^*) è compatta per la topologia indotta da X .

◇

Dimostrazione

La topologia $*$ -debole per X^* è per definizione quella che rende continui tutti gli elementi di X ed è quindi la topologia prodotto di $B \equiv \prod_{x \in X} B_x$ quando su B_x venga posta la topologia di C (B_x è la palla unitaria di centro x).

Sia \hat{C} la compattificazione a un punto di C . Per costruzione \hat{C} è compatto, e quindi $\prod_{x \in X} \hat{C}_x$ è compatto nella topologia prodotto. Visto che B è chiuso in questa topologia, è dunque B compatto. Ma anche X_1^* è chiuso in B nella topologia $*$ -debole. Infatti, se $l_n(x) \rightarrow l(x)$, $|l_n(x)| \leq |x| \quad \forall n$ allora $|l(x)| \leq |x|$. Per definizione $|l| \equiv \sup_{x \neq 0} \frac{|l(x)|}{|x|} \leq 1$. Inoltre $l_n(e) = 1, \quad \forall n \Rightarrow l(e) = 1$.

Dunque X_1^* è compatto, e lo è anche $X_{1,+}^*$ perché successioni convergenti i cui termini sono tutti positivi convergono ad un elemento positivo.

♡

Poiché gli stati sono per definizione la parte positiva della palla unitaria del duale \mathcal{A}^* della C^* -algebra \mathcal{A} ne segue che l'insieme degli stati è compatto per la topologia indotta da \mathcal{A} , cioè per la topologia per cui una successione $\{\rho_n\}$ con $\rho_n \in \mathcal{A}_{1,+}^*$ è convergente se e solo se per ciascun $a \in \mathcal{A}$

$$\lim_{m,n \rightarrow \infty} |\rho_n(a) - \rho_m(a)| = 0. \quad 4.7$$

Ne concludiamo che da ogni successione di stati normalizzati ρ_n che soddisfi (4.7) è possibile estrarre una sottosuccessione che converge. Il limite ρ è uno stato normalizzato poiché $\rho(e) = \lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(e) = 1$ e per ogni $b \in \mathcal{A}^*$, $\rho(b^*b) \geq 0$ poiché $\rho_n(b^*b) \geq 0$ per ogni n .

È importante notare che se una successione è tutta composta da stati normali, lo stato limite può non essere uno stato normale. Un semplice esempio in tal senso è costituito da una successione di stati su $C^0(R)$ definiti da elementi di $L^1(R)$ che convergono nel senso delle misure alla stato consistente nella valutazione in un punto (il duale topologico di $C^0(R)$ è costituito dalle misure finite su R). Nello stesso modo su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} di dimensione infinita è possibile costruire successioni di matrici densità σ_n che convergono, nel senso che

$$\forall A \in B(\mathcal{H}) \quad \lim_{n,m \rightarrow \infty} |\text{Tr } \sigma_n A - \text{Tr } \sigma_m(A)| = 0$$

ma non esiste una matrice densità σ tale che per ogni A

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_n(A) = \sigma(A).$$

Un teorema di uso frequente è il seguente

Teorema 4.2 (Hahn-Banach)

Sia X uno spazio vettoriale, p un funzionale convesso su X a valori reali

$$p(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha p(x) + (1 - \alpha)p(y), \quad 0 < \alpha < 1.$$

Sia Y un sottospazio di X , ρ un funzionale positivo su X , con $\rho(x) \leq p(x) \quad \forall x \in X$. Allora ρ può essere esteso a un funzionale lineare $\tilde{\rho}$ su X dominato da p . \diamond

Dimostrazione

Sia $z \in X$, $z \notin Y$; estendiamo ρ al sottospazio generato da z e Y . L'estensione a tutto X viene poi fatta per induzione. Notiamo che per linearità se $y_1, y_2 \in Y$ e $a, b > 0$ si ha

$$\begin{aligned} b\rho(y_1) + a\rho(y_2) &= (a+b)\rho\left(\frac{b}{a+b}y_1 + \frac{a}{a+b}y_2\right) \\ &\leq (a+b)p\left(\frac{b}{a+b}y_1 + \frac{a}{a+b}y_2\right) \\ &\leq (a+b)p\left(\frac{b(y_1 - az)}{a+b} + \frac{a(y_2 + bz)}{a+b}\right) \\ &\leq bp(y_1 - az) + ap(y_2 + bz). \end{aligned} \quad 4.8$$

Dividendo per ab si ottiene

$$a^{-1}[\rho(y_1) - p(y_1 - az)] \leq b^{-1}[p(y_2 + bz) - \rho(y_2)]. \quad 4.9$$

Estendiamo adesso ρ a z definendo $\rho(z) = b$ dove b è scelto in modo che

$$\sup_{a>0, y \in Y} a^{-1}[\rho(y) - p(y - az)] \leq b \leq \inf_{a>0, y \in Y} a^{-1}[p(y + az) - \rho(y)]. \quad 4.10$$

Si ha allora per costruzione $\rho(x) \leq p(z)$ e quindi, estendendo ρ a $z \cup Y$ e tenendo conto che p è convesso si ha $\rho(\xi) \leq p(\xi)$ per ogni ξ nel sottospazio generato da z e da Y .

♡

Nota 4.2

Nelle applicazioni, in generale p è una norma (ad esempio la norma di X se X è uno spazio di Banach) e Y può essere costituito da un sottospazio di dimensione 1.

♣

In questo caso si ottiene l'importante corollario

Corollario 1

Sia \mathcal{A} una C^* -algebra con identità, a un suo elemento positivo. Esiste uno stato puro ρ tale che $\rho(a) = |a|$.

◇

Dimostrazione

Sia \mathcal{A}_0 il sottospazio di \mathcal{A} generato dall'identità e , e da a^*a . Definiamo su \mathcal{A}_0 il seguente funzionale lineare ρ

$$\rho(\alpha e + \beta a^*a) \equiv \alpha + \beta |a|^2 \quad \alpha, \beta \geq 0, \quad \alpha + \beta = 1. \quad 4.11$$

Per costruzione $\rho \in (\mathcal{A}_0)_{1,+}$. Utilizzando la disuguaglianza triangolare si vede che per ogni $y \in \mathcal{A}_0$ si ha $\rho(y) \leq |y|$. Per il teorema di Hahn-Banach, scegliendo $p(a) \equiv |a|$, esiste $\tilde{\rho} \in \mathcal{A}_{1,+}$ con $\tilde{\rho}(a) \leq |a|$ e

$$\tilde{\rho}(\alpha e + \beta a^*a) = \alpha + \beta |a|^2. \quad 4.12$$

Posto $\alpha = 0$ si deduce

$$\tilde{\rho}(a^*a) = |a|^2. \quad 4.13$$

Consideriamo ora l'insieme (convesso) Z_a degli stati che godono della proprietà (4.13). Quest'insieme non è vuoto per il teorema di Hahn-Banach. Poiché Z_a è convesso, per un teorema di Choquet esso ammette elementi estremali. Ciascuno di questi stati è puro per definizione e soddisfa la proprietà (4.13).

♡

Notiamo anche i seguenti semplici ulteriori corollari al teorema di Hahn-Banach

Corollario 2

Se $Y \subset X$, $\rho \in Y^*$, allora esiste $\tilde{\rho} \in X^*$ tale che $\tilde{\rho}$ ristretto a Y coincida con ρ e inoltre valga la relazione $|\tilde{\rho}|_{X^*} = |\rho|_{Y^*}$. La dimostrazione fa uso della funzione (convessa) $p(x) \equiv |\rho|_{X^*}|x|$.

◇

Corollario 3

Per ogni $y \in X$, $y \neq 0$ esiste $\rho \in X^*$ tale che $\rho(y) = |\rho|_{X^*}|x|$.
 (per la dimostrazione si può utilizzare il sottospazio degli elementi $\{cx, c \in C\}$
 e il corollario 1).

◇

Corollario 4

Sia Z un sottospazio di X , sia $y \in X$ a distanza finita da Z . Allora esiste $\rho \in X^*$, tale che $|\rho| = 1$, $\rho(y) \neq 0$ e che soddisfa $\rho(x) = 0 \quad \forall x \in Z$.

◇

4.2 RAPPRESENTAZIONI

Una rappresentazione è un omeomorfismo Π di \mathcal{A} a valori nello spazio degli operatori limitati su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} (con la norma definita in modo usuale). Nel caso in cui \mathcal{A} possiede un'identità e , deve aversi $\Pi(e) = I$. Ogni rappresentazione è continua; se infatti \mathcal{A} possiede un'unità, da $a^*a \leq |a|^2e$ segue $\Pi(a)^*\Pi(a) \leq |\Pi(a)|^2I$. Se \mathcal{A} non possiede un'identità, queste stime si ripetono con un'unità approssimata.

Una rappresentazione è detta *fedele* se è iniettiva. In caso contrario, il suo *nucleo* è un ideale bilatero J ed è la sottoalgebra costituita dagli elementi la cui immagine è l'elemento nullo di $B(\mathcal{H})$. Sul quoziente \mathcal{A}/J resta definita una norma

$$|\tilde{a}|_0 \equiv \inf_{b \in J} |a + b|$$

(abbiamo indicato con \tilde{a} la classe di equivalenza di a). Con questa norma, \mathcal{A}/J è una C^* -algebra.

Costruzione GNS [GN43, Seg47]

Sia ρ uno stato di \mathcal{A} . Il *nucleo* di \mathcal{A} rispetto a ρ , indicato con \mathcal{N}_ρ , è la sottoalgebra chiusa definita da

$$\mathcal{N} \equiv \{a \in \mathcal{A}, : \rho(a^*a) = 0\}.$$

Si tratta di un ideale bilatero. Infatti se $a \in \mathcal{A}_\rho$ allora si ha

$$\rho((ba)^*ba) = \rho(a^*b^*ba) \equiv \rho_a(b^*b) \leq |b^*b|\rho_a(e) = |b^*b|\rho(a^*a) = 0$$

dove abbiamo utilizzato il fatto che anche ρ_a è un funzionale lineare positivo. Consideriamo ora la forma sesquilineare

$$\langle b, a \rangle \equiv \rho(b^*a) \quad b, a \in \mathcal{A}.$$

Questa forma è ben definita su \mathcal{A}/\mathcal{N} (perché \mathcal{N} è un ideale) ed è non degenera. Infatti, indicando con $\tilde{\rho}$ lo stato su \mathcal{A}/\mathcal{N} indotto dal quoziente, e con \tilde{a} la classe di equivalenza di a , se

$$\tilde{\rho}(\tilde{a}\tilde{b}) = 0 \quad \forall b \in \mathcal{A}$$

allora $\rho(ab) = 0 \quad \forall b \in \mathcal{A}$, e quindi $a \in \mathcal{N}$, dunque $\tilde{a} = 0$.

Indicheremo con \mathcal{H}_ρ lo spazio di Hilbert ottenuto per chiusura di $\mathcal{A}/\mathcal{N}_\rho$ nella topologia indotta dal prodotto scalare $\langle b, a \rangle$. Per costruzione, $\mathcal{A}/\mathcal{N}_\rho$ è denso in \mathcal{H}_ρ . Indichiamo con i_ρ l'identificazione degli elementi di \mathcal{A} con elementi di \mathcal{H}_ρ .

Definizione 4.11

La rappresentazione GNS associata allo stato ρ è per definizione l'omeomorfismo Π_ρ definito da

$$\mathcal{A} \ni a \Rightarrow \Pi_\rho(a) \in B(\mathcal{H}), \quad \Pi_\rho(a)i_\rho(b) = i_\rho(ab).$$

◇

Si ha per costruzione $|\Pi_\rho(a)| \leq |a|$ e quindi $\Pi_\rho(a)$ può essere esteso ad un operatore chiuso limitato su $B(\mathcal{H}_\rho)$. Si può notare che Π_ρ è fedele se e solo se \mathcal{N}_ρ è vuoto.

Esempio

Sia \mathcal{A} l'algebra C_0 delle funzioni continue su $[0,1]$ e scegliamo lo stato ρ :

$$\rho(f) = \int_0^1 f(x) dx \quad f \in \mathcal{A}.$$

In questo caso si ha $\mathcal{N} = \emptyset$ (una funzione continua positiva non può avere integrale nullo) e la forma bilineare è

$$\langle f, g \rangle = \int_0^1 \bar{f}(x)g(x) dx.$$

Lo spazio \mathcal{H}_ρ è quindi lo spazio delle (classi di equivalenza delle) funzioni su $[0,1]$ a quadrato integrabile e $i_\rho(f) = f$.

Teorema 4.3 (Dixmier)

Ogni C^* -algebra \mathcal{A} ha una rappresentazione fedele come algebra di operatori su uno spazio di Hilbert H (non necessariamente separabile).

◇

Dimostrazione

Poiché gli stati separano l'algebra, esisterà una collezione di stati $\{\rho_\alpha\}$ (con α non necessariamente numerabile) tale che

$$J \equiv \bigcap_\alpha J_{\rho_\alpha} = \emptyset.$$

Visto che $\Pi_\rho(a) = 0$ implica $a \in J_\rho$, la rappresentazione $\bigoplus_\alpha \Pi_{\rho_\alpha}$ che agisce su $\bigoplus \mathcal{H}_{\rho_\alpha}$ è fedele.

♡

Abbiamo notato che per ogni C^* -algebra gli stati formano un insieme separante. Questo può non essere vero se si considerano solamente gli stati normali.

*Definizione 4.12 – Algebra W^**

Una algebra W^* è una C^* -algebra che gode delle due seguenti proprietà (tra loro equivalenti)

- 1) Ogni filtro crescente limitato converge al suo estremo superiore (quindi in particolare ogni stato è normale).
- 2) Per ogni $a \in \mathcal{A}$ esiste uno stato *normale* ρ tale che $\rho(a) \neq 0$.

◇

Una sottoclasse di algebre W^* particolarmente utile nella descrizione della Meccanica Quantistica sono le algebre di von Neumann. Premettiamo una definizione.

Definizione 4.13

Per una rappresentazione Π di una C^* -algebra \mathcal{A} in $B(\mathcal{H})$ indichiamo con \mathcal{A}'_{Π} il commutante di $\Pi(\mathcal{A})$, cioè il sottoinsieme di $B(\mathcal{H})$ composto dagli operatori che commutano con tutti gli elementi di $\Pi(\mathcal{A})$.

◇

Notiamo che \mathcal{A}'_{Π} è una C^* -algebra ed è facile verificare che essa è chiusa nella topologia debole degli operatori. Infatti, se $b_n a = a b_n$ per ogni n , e b_n converge a b nella topologia debole degli operatori, si ha, per ogni $\phi \in H$

$$(b_n^* \phi, a \phi) = (\phi, b_n a \phi) = (a^* \phi, b_n \phi)$$

e passando al limite $(b^* \phi, a \phi) = (a^* \phi, b \phi)$ che implica $ab - ba = 0$. I nuclei delle rappresentazioni di \mathcal{A} ammettono un ordinamento parziale, e così pure i corrispondenti spazi di Hilbert originati dalla costruzione GNS.

Anche le commutanti relative \mathcal{A}'_{Π} ammettono un ordinamento parziale, per inclusione, e questo permette di definire la commutante \mathcal{A}' come estremo superiore delle commutanti relative.

Se \mathcal{A} è abeliana si ha sempre $\Pi(\mathcal{A}) \subset \mathcal{A}'_{\Pi}$ e l'algebra è detta *massimale abeliana* se per ogni rappresentazione Π vale $\Pi(\mathcal{A}) = \mathcal{A}'_{\Pi}$.

Definizione 4.14 – algebre di von Neumann

Un'algebra di operatori su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} è detta *Algebra di von Neumann* se è chiusa nella topologia debole e contiene l'identità. Ogni algebra di von Neumann è una C^* -algebra con la naturale definizione di norma. Indicheremo in generale con il simbolo \mathcal{M} un'algebra di von Neumann.

◇

La relazione tra algebre W^* (che sono definite astrattamente) e algebra di von Neumann (che sono algebre di operatori) è data dal teorema seguente

Teorema 4.4 (Sakai)

Ogni rappresentazione di un'algebra W^* è un'algebra di von Neumann. In particolare ogni algebra W^* ha una rappresentazione fedele come algebra di von Neumann.

◇

Le algebre di von Neumann hanno proprietà di regolarità rispetto alle filtrazioni. In particolare si ha

Teorema 4.5 (Kadison)

Una C^* -algebra contenuta in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ è un'algebra di von Neumann se e solo se ogni filtro crescente di elementi positivi ha un estremo superiore.

◇

Una dimostrazione è ad esempio in [15].

Il centro di un'algebra di von Neumann \mathcal{M} , definita su $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ è l'intersezione dell'algebra con la sua commutante \mathcal{M}' (gli operatori in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ che commutano con tutti gli elementi di \mathcal{M}). Se il centro è composto solo da multipli dell'identità in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ si dice che \mathcal{M} è *un fattore*; indicheremo in generale un fattore con il simbolo \mathcal{F} .

Un'algebra di von Neumann, essendo chiusa nella topologia debole, contiene sempre proiettori, ed in effetti è generata dai suoi proiettori. Sui proiettori di \mathcal{F} è definita una funzione *peso* additiva su insieme ortogonali di proiettori. Il fattore \mathcal{F} si dice essere di tipo

- 1) I_N se il peso assume valori interi da 1 ad $N < \infty$.
- 2) I_∞ se il peso dei suoi proiettori ha valore nei numeri interi positivi.
- 3) II_1 se il peso assume tutti i valori nell'intervallo $[0,1]$.
- 4) II_∞ se il peso assume valori su tutto R^+ .
- 5) III se il peso di ciascuno dei suoi proiettori è $+\infty$.

I fattori di tipo I_N , II_1 e II_∞ ammettono uno stato traccia, cioè uno stato σ tale che $\sigma(ab) = \sigma(ba)$, $\forall a, b \in \mathcal{F}$.

I fattori di tipo I sono isomorfi all'algebra $B(\mathcal{H})$ di tutti gli operatori su uno spazio di Hilbert separabile \mathcal{H} , e il peso di un proiettore sotto quest'isomorfismo coincide con la dimensione hilbertiana del sottospazio su cui proietta.

Per i fattori \mathcal{F} che *non sono di tipo I* la dimensione hilbertiana di ogni proiettore è infinita.

Un esempio di algebre di tipo II_1 è il limite induttivo di algebra di matrici $2^n \times 2^n$ discusso nel seguito di questo capitolo.

I fattori di tipo II e III non appaiono nella trattazione della Meccanica Quantistica non relativistica per sistemi ad un numero finito di gradi di libertà. Essi

hanno invece un ruolo importante nella Meccanica Statistica Quantistica e nella Teoria dei Campi Quantizzati. Le algebre introdotte in queste teorie sono limiti induttivi di *algebre locali* (associate ad una regione finita dello spazio-tempo in una teoria relativistica e a un sottosistema in meccanica statistica); le algebre locali sono tipicamente di tipo II_1 in Meccanica Statistica e di tipo III in Teoria dei Campi.

I fattori di tipo I sono generati dai loro proiettori finito-dimensionali. La conseguenza di questo è un'importante proprietà dei loro stati normali. Si ha

Lemma 4.6 [Dan67]

I punti di aderenza (limiti per sottosuccessioni) nella topologia $*$ -debole degli stati normali di un fattore di tipo I sono stati normali.

Questa proprietà caratterizza i fattori di tipo I .

◇

Un risultato valido per una generica algebra di von Neumann è invece il seguente, al quale premettiamo una definizione.

Definizione 4.15

Siano \mathcal{M} e \mathcal{N} algebre di von Neumann. Un'applicazione $\mathcal{M} \rightarrow_{\beta} \mathcal{N}$ che manda \mathcal{M}^+ in \mathcal{N}^+ è detta *normale* se ad ogni filtro crescente $\{x_{\alpha}\}$ che ha x come estremo superiore fa corrispondere un filtro $\beta(x_{\alpha})$ che ha $\beta(x)$ come estremo superiore.

◇

Notare che la definizione di *stato normale* che abbiamo dato precedentemente è un caso particolare corrispondente a $\mathcal{N} \equiv C$. Allora si ha

Teorema 4.7

- 1) Ogni isomorfismo di algebre di von Neumann è normale.
- 2) Ogni algebra di von Neumann $\mathcal{M} \in B(H)$ è isomorfa a $p\mathcal{M}$ dove p è un proiettore e $p \in \mathcal{M} \cap \mathcal{M}'$.

◇

Per le C^* -algebre valgono importanti teoremi di densità, che unitamente al lemma 4.6 rendono possibile in vari casi determinare la regolarità di un'applicazione studiandola solamente su un insieme in cui essa ha una forma particolarmente semplice.

Teorema 4.8 (Kaplanski)

Sia \mathcal{M} l'algebra di von Neumann chiusura debole di una C^* -algebra $\mathcal{A} \in B(\mathcal{H})$. Allora

- a) La palla unitale in \mathcal{A} è densa nella palla unitale in \mathcal{M} .
- b) La parte autoaggiunta e la parte positiva di \mathcal{A} sono dense nelle corrispondenti parti di \mathcal{M} .

c) Se \mathcal{A} ha un'unità, allora gli unitari di \mathcal{A} sono densi negli unitari di \mathcal{M} .

◇

Alcuni risultati di densità corrispondono a teoremi classici validi per il caso commutativo. Ricordiamo ad esempio che se lo spazio X è compatto e ha la proprietà di Hausdorff, e se μ è una misura di Radon, l'insieme costituito dalle funzioni continue $C(X)$ forma una C^* -algebra la cui chiusura debole (nella rappresentazione su $L^2(X, d\mu)$) è l'insieme delle funzioni L^∞ (limitate modulo insiemi di misura zero). In questo contesto, un risultato classico di densità è il seguente.

Teorema 4.9 (Lusin)

Se X è localmente compatto e di Hausdorff, e μ è una misura di Radon, per ogni $f \in L^\infty$ e per ogni $\epsilon > 0$ esiste un insieme di Borel $Y \subset X$, con $\mu(X/Y) < \epsilon$, e una funzione $g \in C_0(X)$ tale che sia $g \equiv f$ in Y .

◇

Un risultato corrispondente nel caso non-commutativo è il seguente.

Teorema 4.10

Sia $\mathcal{A} \subset B(H)$ una C^* -algebra con $\mathcal{A}' \equiv \mathcal{M}$. Allora per ogni $x \in \mathcal{M}$, ogni proiettore $p_0 \in \mathcal{M}$, ogni scelta $n \in \mathbb{Z}$ e di $\{\xi_1, \dots, \xi_n\} \in H$ è possibile scegliere un proiettore $p \in \mathcal{M}$ con $p < p_0$ e $|(p - p_0)\xi_k| < \epsilon$, $k = 1, \dots, n$ ed un elemento $y \in \mathcal{A}$ tale che

$$xp = py \quad |y| \leq |xp| + \epsilon.$$

Inoltre, se $x \in \mathcal{M}_{s.a.}$ si può scegliere $y \in \mathcal{M}_{s.a.}$ ma allora si può garantire solo

$$|y| \leq \min \{2|x||p_0|, |x|\} + 2\epsilon$$

(abbiamo indicato con $\mathcal{M}_{s.a.}$ la collezione degli elementi autoaggiunti di \mathcal{M}).

◇

Nota 4.3

La perdita di grado d'approssimazione per la norma di y è caratteristica del caso non-commutativo.

♣

Una nozione che gioca un ruolo importante nell'utilizzazione delle teorie delle C^* -algebre in fisica è quella di *supporto essenziale* che estende al caso non commutativo la corrispondente nozione nel caso di funzioni.

Definizione 4.16

Se $a \in \mathcal{A} \subset B(\mathcal{H})$, la *proiezione spettrale di a* (o proiezione sul codominio di a) indicata con $[a]$ è la proiezione sul sottospazio chiuso $V_a \equiv \{a\phi, \phi \in \mathcal{H}\}$.

◇

Si ha il teorema

Teorema 4.11

Sia \mathcal{A} una C^* -algebra contenuta in $B(\mathcal{H})$. Allora

- i) $[a] \in \mathcal{A}''$
- ii) $[a] = [a^*a]$

◇

Dimostrazione

La relazione ii) segue dalla definizione. È dunque sufficiente considerare il caso $a > 0$. Ma allora si può verificare che

$$[a] = w - \lim_{n \rightarrow \infty} [\xi_n] \quad \xi_n \equiv \left(\frac{1}{n} + a\right)^{-1} [a] \quad 4.16$$

è un proiettore P_a . D'altra parte se ϕ è tale che $(\phi, a\psi) = 0, \forall \psi$ si ha $(\xi_n \phi, \psi) = 0 \forall n$, dunque $P_a \phi = 0$. Da questo segue ii).

♡

Dal teorema 4.11 segue un importante corollario.

Teorema 4.12 (decomposizione polare in \mathcal{M})

Sia \mathcal{M} un'algebra di Von Neumann. Per ogni $a \in \mathcal{M}$ esiste un unico $U \in \mathcal{M}$ con $U^*U = 1, U^*U = P_a$ tale che $a = U\sqrt{(a^*a)}$.

◇

Nota 4.4

Per la dimostrazione del teorema 4.12 si può far ricorso ad una decomposizione polare con un operatore V , e poi notare che V è definito a meno di moltiplicazione per un elemento unitario W nella commutante di \mathcal{M} . Questo permette di dimostrare che è possibile scegliere W in modo tale che $U^*U \in \mathcal{M}$ con $U = WV$.

♣

4.3 AUTOMORFISMI DI UNA C^* -ALGEBRA E SISTEMI DINAMICI

Nello studio della dinamica di un sistema descritto mediante una C^* -algebra \mathcal{A} interverranno gli automorfismi dell'algebra. Indicheremo con $Aut(\mathcal{A})$ il gruppo degli *-automorfismi (cioè degli automorfismi α tali che $(\alpha(a))^* = \alpha(a^*)$). Il gruppo $Aut(\mathcal{A})$ è un gruppo topologico dotato di diverse topologie. Noi utilizzeremo le due seguenti.

- a) La topologia *uniforme* definita dalla norma

$$|\alpha| = \sup_{a \in \mathcal{A}, |a| \leq 1} |\alpha(a)|.$$

b) La topologia *forte* definita mediante un sistema completo di intorni

$$N(\alpha_1; a_1, \dots, a_n; \epsilon) \equiv \{\alpha \in \text{Aut}(\mathcal{A}), |\alpha(a_j) - \alpha_1(a_j)| < \epsilon, j = 1, \dots, n\}.$$

Sia G un gruppo topologico e sia $G \ni g \rightarrow \alpha(g)$ un omeomorfismo di G in $\text{Aut}(\mathcal{A})$.

*Definizione 4.17 – sistema dinamico C^**

Se $\alpha(g)$ è continuo nella topologia forte la tripla $\{\mathcal{A}, G, \alpha\}$ viene detta *sistema dinamico C^** (uniforme se $\alpha(g)$ è continuo nella topologia uniforme). \diamond

Un caso notevole è quello in cui la C^* -algebra considerata è una W^* -algebra \mathcal{M} (in particolare un'algebra di von Neumann) quindi il duale di uno spazio di Banach $\mathcal{B} \equiv \mathcal{M}_*$. In questo caso esiste un'ulteriore topologia su \mathcal{M} , la topologia $*$ -debole. Ponendo

$$(\alpha_* b)(a) = b(\alpha(a)), \quad a \in \mathcal{M} \quad b \in \mathcal{B} \quad 4.17$$

per dualità resta definita una struttura di gruppo su \mathcal{M}_* e una topologia su $\text{Aut}(\mathcal{M})$ che chiameremo $*$ -debole. Ogni automorfismo di \mathcal{M} è continuo nella topologia $*$ -debole. Si può dimostrare che $g \rightarrow \alpha(g)$ si estende ad un'applicazione $*$ -debolmente continua di G in $\text{Aut}(\mathcal{M})$. La tripla $\{\mathcal{M}, G, \alpha\}$ è detta *sistema dinamico W^** .

Per sistemi dinamici continui nella topologia uniforme l'analogo del teorema di Wigner-Kadison che abbiamo discusso nel cap. 3 è il seguente teorema di Dixmier, che qui riportiamo senza dimostrazione [9].

Teorema 4.13 (Dixmier)

Sia G un gruppo di Lie reale semisemplice di dimensione finita, e sia $G \ni g \rightarrow \alpha_g$ un rappresentazione continua in norma di G negli $*$ -automorfismi di \mathcal{W} . Allora esiste una rappresentazione $g \rightarrow U(g)$ continua in norma nel gruppo degli unitari di \mathcal{W} tale che

$$\alpha_g(a) = U(g)aU^*(g), \quad a \in \mathcal{W}, \quad g \in G.$$

\diamond

Data un'algebra di von Neumann \mathcal{M} sullo spazio di Hilbert \mathcal{H} un gruppo localmente compatto G e il corrispondente sistema dinamico fortemente continuo $\{\mathcal{M}, G, \alpha_g\}$ non esiste in generale una sua implementazione mediante operatori unitari. Un caso nel quale questa rappresentazione esiste è quello in cui esiste in \mathcal{H} uno vettore ciclico invariante.

Teorema 4.14

La rappresentazione $g \rightarrow U(g)$ mediante operatori unitari esiste certamente se esiste in \mathcal{H} un vettore ciclico ξ_0 che corrisponde a uno stato ciclico invariante ϕ_0

$$\alpha_g^* \phi_0(a) \equiv \phi_0(\alpha_g(a)) = (\alpha_g(a)\xi_0, \xi_0) = (a\xi_0, \xi_0) = \phi_0(a) \quad \forall a \in \mathcal{M}. \quad 4.18$$

◇

Dimostrazione

Poniamo

$$U(g)a\xi_0 \equiv \alpha_g(a)\xi_0, \quad g \in G.$$

Questa definizione è ben posta e $U(g)$ è un'isometria sulla chiusura di $\{\mathcal{M}\xi_0\}$; infatti si ha

$$|U_g a \xi_0|^2 = (\alpha_g(a^*)\alpha_g(a)\xi_0, \xi_0) = (a^* a \xi_0, \xi_0). \quad 4.19$$

Poiché ξ_0 è ciclico, quest'isometria si estende ad un operatore unitario che denoteremo con il simbolo $U(g)$.

La proprietà di gruppo segue dalla definizione, e se $g_n \rightarrow e$ (e è l'unità del gruppo) $\alpha_{g_n}(a)\xi_0$ tende a $a\xi_0$ debolmente. Quindi $U(g) \rightarrow I$ debolmente e anche fortemente essendo l'applicazione unitaria. Si ha

$$U(g)aU^*(g)b\xi_0 = U(g)a\alpha_g^{-1}(b)\xi_0 = \alpha_g(a)b\xi_0 \quad 4.20$$

da cui si deduce, utilizzando ancora la ciclicità di ξ_0

$$U(g)aU^*(g) = \alpha_g(a) \quad a \in \mathcal{M}, \quad g \in G.$$

♡

In generale, anche se la rappresentazione mediante operatori unitari esiste, i suoi elementi non appartengono ad \mathcal{M} (eccezion fatta per il caso $\mathcal{M} \equiv B(H) \otimes M_N$). Questo avviene sempre invece se $G \equiv R$. In questo caso per il Teorema di Wigner il gruppo di automorfismi può realizzato mediante un gruppo continuo ad un parametro di operatori unitari.

Sia H il generatore di questo gruppo. Si ha

Teorema 4.15 (Araki, [Ara64])

Sia $t \rightarrow \alpha_t$, $t \in R$ un gruppo ad un parametro debolmente continuo di automorfismi di un'algebra di von Neumann \mathcal{M} realizzata in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , con vettore ciclico ξ_0 . Supponiamo che esista un operatore *positivo* H tale che

$$\alpha_t(a) = e^{itH} a e^{-itH}, \quad H\xi_0 = 0.$$

Allora $U(t) \equiv e^{itH}$ appartiene ad \mathcal{M} .

◇

Dimostrazione

Da $U(t)\mathcal{M}U(t)^* = \mathcal{M}$ segue $U(t)\mathcal{M}'U(t)^* = \mathcal{M}'$. Dato $x \in \mathcal{M}'$, con $a, b \in \mathcal{M}$ costruiamo la funzione

$$f(t) \equiv (aU(t)xU^*(t)\xi_0, b\xi_0) = (a(e^{itH}x)\xi_0, b\xi_0) \quad 4.21$$

(abbiamo fatto uso di $U^*(t)\xi_0 = 0$). Poiché per ipotesi $H \geq 0$, la funzione f può essere estesa ad una funzione limitata, analitica nel semipiano superiore ponendo

$$f(t + is) = (ae^{i(t+is)H}x\xi_0, b\xi_0).$$

D'altra parte, poiché $U(t)xU^*(t) \in \mathcal{M}'$ si ha anche

$$f(t) = (a\xi_0, bU(t)xU^*(t)\xi_0) = (a\xi_0, b(e^{-itH}x^*)\xi_0)$$

e pertanto f può anche essere estesa ad una funzione limitata, analitica nel semipiano inferiore. Ne concludiamo che f può essere estesa ad una funzione limitata ed intera, quindi a una costante.

Ne deduciamo

$$(U(t)xU(t)^*a\xi_0, b\xi_0) = (xa\xi_0, b\xi_0)$$

e pertanto, poiché ξ_0 è ciclico, $U(t) \in \mathcal{M}''$.

♡

Nota 4.5

La dimostrazione può essere estesa al caso in cui H è positivo ma non esiste un vettore ciclico invariante. Questa dimostrazione è notevolmente più complicata e la omettiamo; si trova ad esempio in [Sak91].

♣

Notiamo che in Fisica è spesso interessante studiare sistemi composti da una parte A) di cui si vuole studiare l'evoluzione e da una parte B) che non è accessibile alla misurazione ma che interagisce con A). Situazioni di questo genere si presentano in Meccanica Statistica Quantistica dove il sottosistema B) gioca il ruolo di termostato e anche nello studio della decoerenza di un sistema quantistico *aperto* in interazione cioè con un ambiente esterno.

Ad esempio questa situazione si presenta se $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$,

$$\mathcal{A} = B(\mathcal{H}) \quad \mathcal{A}_0 = B(\mathcal{H}_1) \otimes I$$

e l'evoluzione che si considera ha un generatore della forma

$$H = H_1 + H_2 + H_{int}$$

dove

$$e^{itH_1} \in B(\mathcal{H}_1), \quad e^{itH_2} \in B(\mathcal{H}_2),$$

e la hamiltoniana di interazione H_{int} non commuta con \mathcal{A}_0 . In questo caso, dal punto di vista algebrico è rilevante la definizione di *riduzione*.

Definizione 4.18 – sistema ridotto

Una *riduzione* (o *condizionamento*) di una C^* -algebra \mathcal{A} ad una sua sottoalgebra \mathcal{A}_0 è un'applicazione lineare $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}_0$ che preserva la positività e inoltre ha le seguenti proprietà

- a) $\Phi(e) = e$ (e è l'identità dell'algebra)
- b) $\Phi(x) = x$, se $x \in \mathcal{A}_0$.
- c) Se $a, c \in \mathcal{A}_0$ allora $\Phi(a b c) = a \Phi(b) c$.

Supponiamo adesso che sia dato un gruppo α_t di automorfismi di \mathcal{A} e definiamo una famiglia di automorfismi di \mathcal{A}_0 mediante

$$\beta_t b = \Phi(\alpha_t(b)), \quad b \in \mathcal{A}_0. \quad 4.22$$

In generale le applicazioni $t \rightarrow \beta_t$ non costituiscono gruppo e pertanto $\{\beta_t\}$ non costituisce un sistema dinamico, almeno nel senso della definizione 4.17. Nel caso in cui β_t risulti essere un gruppo, il sistema dinamico $\{\alpha_t\}$ si dice *Markoviano* (rispetto al condizionamento Φ).

Le aspettative condizionate hanno un ruolo particolarmente importante nel caso di gruppi di automorfismi che commutano con la dinamica. Questo è l'equivalente nel caso di algebre noncommutative del formalismo della riduzione per i sistemi dinamici classici. Il condizionamento sarà in generale rispetto alla C^* -algebra costituita dai punti fissi.

Sia \mathcal{A} un'algebra di von Neumann separabile, \mathcal{G} un gruppo di $*$ -automorfismi di \mathcal{A} , e sia \mathcal{B} l'algebra dei punti fissi. È facile vedere che si tratta di un'algebra di von Neumann. Indichiamo con $a \rightarrow g(a)$ l'azione dell'elemento g del gruppo sugli elementi dell'algebra. Vale il seguente Teorema.

Teorema 4.16 ([22])

Assumiamo che per ogni $a \in \mathcal{A}$ sia non vuota l'intersezione di \mathcal{B} con la chiusura debole dell'insieme convesso $\text{conv}(\mathcal{G}; \mathcal{A})$ generato dall'azione di \mathcal{G} su \mathcal{A} . Sotto queste ipotesi esiste l'aspettazione condizionata Φ da \mathcal{A} in \mathcal{B} . Se questa intersezione consiste in un solo elemento allora $\Pi(a) = g(a)$, $\forall g \in \mathcal{G}$.

◇

Da questo teorema segue un importante corollario

Corollario

Se \mathcal{C} è il centro di \mathcal{A} , e se \mathcal{G} è il gruppo di automorfismi interni, allora l'intersezione di \mathcal{C} con $\text{conv}(\mathcal{G}; \mathcal{A})$ è non vuota. In questo caso l'aspettazione condizionata Φ è detta *traccia centrale*. Si tratta di uno stato normale se \mathcal{A} è un fattore.

◇

4.4 DERIVAZIONI E GENERATORI

Notiamo che, sotto opportune condizioni di continuità, come nel caso dei sistemi dinamici classici, la versione infinitesima di un gruppo di automorfismi di una C^* -algebra è una $*$ -derivazione, che commuta cioè con la coniugazione e soddisfa la regola di Leibniz per la derivazione di un prodotto. Per verificare questo basta notare che

$$t^{-1}(\alpha_t(ab) - a b) \equiv t^{-1}(\alpha_t(a) - a) b + t^{-1}\alpha_t(a)(\alpha_t(b) - b). \quad 4.23$$

Definendo, per tutti gli elementi per i quali tale limite esiste in senso forte,

$$\delta(a) = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1}(\alpha_t(a) - a) \quad 4.24$$

si deduce

$$(\delta(a))^* = \delta(a^*), \quad \delta(a b) = \delta(a) b + a \delta(b).$$

Nel caso $\mathcal{A} \equiv B(\mathcal{H})$, se $\alpha_t(a) = U(t)aU^*(t)$ si ha

$$\delta(a) = i[h, a], \quad U(t) = e^{iht}$$

con dominio $D(\delta)$ composto da tutti gli operatori $a \in B(\mathcal{H})$ tali che $[h, a]$ sia densamente definito. Se h è limitato, $\alpha_t(a)$ è continuo (in t) in norma, e $|\delta(a)| \leq 2|h||a|$. Vale anche l'inverso di quest'affermazione:

Teorema 4.17 (Kadison, Sakai)

Se \mathcal{A} è un'algebra C^* e δ è una sua derivazione chiusa e limitata, allora in ogni rappresentazione Π di \mathcal{A} la derivazione δ si estende alla chiusura debole $\Pi(\mathcal{A})^-$ di $\Pi(\mathcal{A})$ ed esiste un elemento $h \in \Pi(\mathcal{A})^-$ tale che, per ogni $b \in \Pi(\mathcal{A})^-$ si ha $\delta(b) = i[h, b]$.

Inoltre se δ è una $*$ -derivazione chiusa e limitata, allora l'operatore h è autoaggiunto e limitato e quindi e^{ith} definisce un gruppo ad un parametro di operatori unitari continuo (in t) in norma.

◇

Una dimostrazione è ad esempio in [Sak66, Kad66].

Quando la derivazione δ non è continua in norma ma solo nella topologia debole, essa non è in generale associata a un gruppo ad un parametro di automorfismi. Una situazione intermedia è rappresentata da derivazioni che sono associate ad un gruppo a un parametro di automorfismi, ma questo gruppo non è implementabile mediante operatori unitari.

Se $t \rightarrow \gamma_t(a)$ è un gruppo di automorfismi continui in norma (in t) l'operazione

$$a \rightarrow \delta(a) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1}(\gamma_t(a) - a) \quad 4.25$$

è una $*$ -derivazione ed il suo dominio sono gli $a \in \mathcal{A}$ tali che il limite in (4.25) esiste in norma.

Definizione 4.19

La derivazione è *interna* se esiste $b \in \mathcal{A}$ tale che $\delta(a) = [b, a]$. Essa è debolmente interna nella rappresentazione Π su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} se esiste un operatore lineare b su H tale che $\Pi(\delta(a)) = [b, \Pi(a)] \forall a \in D(\delta)$.

◇

I seguenti teoremi sono importanti, anche se le ipotesi sono limitative per quanto riguarda sistemi fisici. Assumeremo sempre (tranne in casi in cui il contrario venga affermato esplicitamente) che l'algebra \mathcal{A} ammetta l'identità e , e che $e \in D(\delta)$. In questo caso dalla regola di Leibniz si deduce che $\delta(e) = 0$. Il seguente risultato è l'analogo, per algebre non commutative, del fatto che, se f è una funzione differenziabile di variabile reale, la sua derivata è nulla in un punto di massimo o di minimo.

Ricordiamo che, per il teorema di Hahn-Banach, per ogni $a \in \mathcal{A}$ esiste uno stato ϕ_a tale che $\phi_a(a) = |\phi||a|$.

Lemma 4.18

Sia δ una derivazione di una C^* -algebra \mathcal{A} . Se ϕ è uno stato e si ha

$$\phi(a) = |a|\phi, \quad a \in D(\delta)$$

allora

$$\phi(\delta(a)) = 0. \tag{4.26}$$

◇

Dimostrazione

Senza perdita di generalità possiamo assumere $|a| = |\phi_a| = 1$. Poniamo $y = (I - a)^{1/2}$. Allora

$$\begin{aligned} |\phi(\delta(a))|^2 &= |\phi(\delta(I - y^2))|^2 = |\phi(\delta(y^2))|^2 \\ &= |\phi(y \cdot \delta(y)) + \phi(\delta(y) \cdot y)|^2 \\ &\leq 4|\phi(y^2)^{\frac{1}{2}} \phi(\delta(y^2))^{\frac{1}{2}}| = 0 \end{aligned} \tag{4.27}$$

poiché $\phi(y^2) = \phi(I - a) = |\phi| - \phi(a) = 0$.

♡

Nota 4.6

Nelle notazioni che utilizzeremo nel cap. 6 per i semigrupperi, la (4.26) si esprime dicendo che δ e $-\delta$ sono dissipativi, o anche che δ è conservativo, rispetto allo stato ϕ .

♣

Teorema 4.19 (Sakai, [Sak60])

Ogni derivazione δ tale che $D(\delta) \equiv \mathcal{A}$ è limitata, e quindi interna per il teorema di Kadison-Sakai.

◇

Diamo qui di seguito due altri importanti teoremi indicando i lavori nei quali può essere trovata la loro dimostrazione

Teorema 4.20 (Ringrose, [Rin72])

Se $D(\delta) = \mathcal{A}$ in ogni rappresentazione Π esiste una derivazione $\hat{\delta}$ di $\Pi(\mathcal{A})$ che estende δ .

◇

Teorema 4.21 (Christensen ed Evans, [CE79])

Se δ è come nel Teorema 4.20 allora la derivazione è debolmente interna, e in ciascuna rappresentazione è possibile scegliere l'operatore che la implementa nella chiusura convessa degli elementi della forma $\delta(U) U^*$ dove U è un operatore unitario che appartiene a $\Pi(\mathcal{A})^W$.

◇

Nelle applicazioni è importante sapere sotto quali ipotesi possono essere applicate le regole di calcolo per la derivazione di funzioni composte. Per confronto, ricordiamo qui il seguente lemma nel caso commutativo

Lemma 4.22

Se \mathcal{A} è una C^* -algebra abeliana, e δ è una derivazione chiusa, se inoltre $a \in D(\delta)$ e $g \in C^1(\mathbb{R})$, allora $g(a) \in D(\delta)$ e si ha

$$\delta(g(a)) = g'(a)\delta(a). \quad 4.28$$

◇

Dimostrazione

La (4.28) è facilmente verificata se g è un polinomio. Per il teorema di Stone-Weierstrass se g è di classe C^1 si può trovare una successione di polinomi $P_n(t)$ tali che

$$\begin{aligned} \sup_{|t| \leq |a|} |g(t) - P_n(t)| &\longrightarrow_{n \rightarrow \infty} 0, \\ \sup_{|t| \leq |a|} |g'(t) - P'_n(t)| &\longrightarrow_{n \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

Allora

$$g(a) = \lim_{n \rightarrow \infty} P_n(a), \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \delta(P_n(a)) = \lim_{n \rightarrow \infty} P'_n(a) \cdot \delta(a) = g'(a) \cdot \delta(a)$$

Per ipotesi δ è chiusa. Quindi

$$g(a) \in D(\delta), \quad \delta(g(a)) = g'(a) \cdot \delta(a).$$

♡

Dunque per una C^* -algebra commutativa il dominio di una derivazione chiusa è chiuso per il calcolo funzionale C^1 .

Nel caso non-commutativo vale solo un risultato più debole. In particolare è necessario richiedere una maggiore regolarità per la funzione $g(t)$ e le affermazioni riguardano solamente gli elementi reali di \mathcal{A} . Vi sono infatti esempi di funzioni di classe C^1 su una C^* -algebra non commutativa per le quali non vale il calcolo funzionale C^1 . Vale tuttavia il seguente teorema.

Teorema 4.23 (Powers)

Sia δ una $*$ -derivazione di una C^* -algebra \mathcal{A} , e sia δ chiusa nella topologia uniforme. Sia $f(t)$ una funzione di variabile reale la cui trasformata di Fourier soddisfa

$$\int |p| |\hat{f}(p)| dp < +\infty. \quad 4.29$$

Sia a un elemento reale di \mathcal{A} . Allora $f(a) \in D(\delta)$ e si ha la regola di derivazione

$$\delta(f(a)) = \frac{i}{2\pi} \int p \hat{f}(p) \left(\int_0^1 e^{itpa} \delta(a) e^{ipa(1-t)} dt \right) dp \quad 4.30$$

◇

Dimostrazione

Procederemo per passi.

i) Sia $a = a^* \in D(\delta)$, e λ non appartenente allo spettro di a . Allora $a(\lambda I - a)^{-1} \in D(\delta)$. La dimostrazione viene effettuata utilizzando la rappresentazione spettrale di a e il fatto che δ è chiusa.

ii) Se $I \in \mathcal{A}$, allora $\delta(I) = 0$. Infatti, se a è positivo e invertibile si ha, per $\epsilon \rightarrow 0$

$$a[\epsilon I + a]^{-1} \rightarrow I, \quad \delta(a[\epsilon I + a]^{-1}) \equiv -\epsilon[\epsilon I + a]^{-1} \delta(a)[\epsilon I + a]^{-1} \rightarrow 0.$$

Essendo δ chiusa, ne segue $\delta(I) = 0$.

iii) Se $a = a^* \in D(\delta)$, allora $e^{ipa} \in D(\delta)$ e si ha

$$\delta(e^{ipa}) = ip \int_0^1 e^{itpa} \delta(a) e^{i(1-t)pa} dt.$$

Infatti dalla teoria spettrale si ha

$$e^{ipa} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{ipa}{n}\right)^{-n}$$

e per la regola di Leibniz per polinomi

$$\delta\left(\left(I - \frac{ipa}{n}\right)^{-n}\right) = ip \sum_n \left(n^{-1} \left(I - \frac{ipa}{n}\right)^{-n}\right)^{\frac{m+1}{n}} \delta(a) \left(\left(I - \frac{ipa}{n}\right)^{-n}\right)^{1 - \frac{m+1}{n}}$$

da cui si deduce (4.30).

♡

Un caso importante è quello in cui la derivazione sia associata ad un gruppo ad un parametro di automorfismi.

Definizione 4.20

Se esiste un gruppo ad un parametro di automorfismi γ_t di \mathcal{A} tale che per ogni $a \in D(\delta)$ si abbia $\delta(a) = \lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1}(\gamma_t(a) - a)$, allora la derivazione δ è detta essere un *pregeneratore* e la sua chiusura $\bar{\delta}$ è il *generatore* di γ_t .

◇

In casi di interesse in Fisica le derivazioni che vengono introdotte non sono limitate. Esse vengono tuttavia spesso ottenute come limite di derivazioni chiuse e limitate (e quindi interne). Questo permette, in casi favorevoli, di dimostrare che esse sono dei pregeneratori, e occasionalmente che esse sono (debolmente) interne.

Un passo intermedio è costituito dal trovare condizioni affinché a una derivazione possa essere associato un operatore simmetrico h tale che, su $D(\delta)$ valga $\delta(a) = [h, a]$. Una condizione utile e in generale facile da verificare è data dal seguente teorema.

Teorema 4.24 (Bratteli)

Sia δ una derivazione chiusa simmetrica definita su una sottoalgebra \mathcal{A} di $B(\mathcal{H})$, con \mathcal{H} separabile. Sia Ω ciclico per \mathcal{A} e poniamo $\omega(a) = (\Omega, a\Omega)$. Allora sono equivalenti

i)

$$\exists C > 0 : |\omega(\delta(a))| \leq C[\omega(a^*a) + \omega(aa^*)]^{\frac{1}{2}} \quad \forall a \in D(\delta); \quad 4.31$$

ii) esiste h simmetrico chiuso, con $D(h) = \mathcal{A}\Omega$ tale che $\forall a \in \mathcal{A}, \forall \phi \in D(h)$ vale

$$\delta(a)\phi = i[h, a]\phi.$$

Inoltre, se $I \in \mathcal{A}$, allora $2|h\Omega|^2 \leq C^2$.

◇

Dimostrazione

ii) \rightarrow i): se $a \in \mathcal{A}$,

$$\omega(\delta(a)) = (H\Omega, a\Omega) + (a^*\Omega, H\Omega) \leq |H\Omega|(|a\Omega| + |a^*\Omega|).$$

i) \rightarrow ii): poniamo

$$\tilde{H} \equiv H \oplus \bar{H}, \quad \hat{H} \equiv \{a\Omega, a^*\Omega\} \quad \forall a \in \mathcal{A}.$$

Definiamo η su \hat{H} mediante

$$\eta\{a\Omega, a^*\Omega\} = i\omega(\delta(a)). \quad 4.32$$

Notare che (4.32) è ben posta; infatti se $a\Omega = 0$ da i si ha $\omega(\delta(a)) = 0$. L'operazione η è continua nella topologia di H (poiché per costruzione ω è uno stato normale) e quindi esistono $\{\phi_1, \phi_2\} \in \tilde{H}$ tali che

$$i\omega(\delta(a)) = (\phi_1, a\Omega) + (a^*\Omega, \phi_2)$$

Per ipotesi $(\delta(a))^* = \delta(a)^*$. Dunque

$$2i\omega(\delta(a)) = (\phi_1 - \phi_2, a\Omega) - (a^*\Omega, \phi_1 - \phi_2) = 0.$$

Definiamo ora h nel modo seguente

$$D(h) \equiv \mathcal{A}\Omega, \quad ha\Omega = i\delta(a)\Omega + a \frac{\phi_1 - \phi_2}{2}. \quad 4.33$$

Poiché $I \in \mathcal{A}$, si ha

$$h\Omega = \frac{\phi_1 - \phi_2}{2} \equiv \Omega_\delta.$$

Verifichiamo che la definizione in (4.33) è ben posta. Infatti, se $a\Omega = 0$ dalla (4.32) si deduce

$$2i\omega(\delta(a)) + (a^*\Omega, \phi_1 - \phi_2) = 0$$

e dunque $ha\Omega = 0$. L'operatore h è densamente definito poiché ω è ciclico. Verifichiamo che h così definito è simmetrico.

$$\begin{aligned} (ha\Omega, b\Omega) - (a\Omega, hb\Omega) &= i\omega(\delta(a^*b)) + (\Omega_\delta, a^*b\Omega) - (\Omega_\delta, a^*b\Omega)\delta \\ &= i\omega(\delta(a^*b)) - \frac{i}{2}[\omega((a^*b)) + \omega(\delta(a^*b))] = 0. \end{aligned} \quad 4.34$$

Si ha ancora

$$\begin{aligned} \delta(a)b\Omega &= [\delta(ab) - \delta(b)]\Omega = ihab\Omega - ab\Omega_\delta - iahb\Omega + ab\Omega_\delta \\ &= i[H, a]b\Omega \end{aligned} \quad 4.35$$

e quindi, per la ciclicità di Ω , la (4.35) vale su un insieme denso. Inoltre, se l'identità appartiene ad \mathcal{A}

$$|h\Omega|^2 = |\Omega_\delta|^2 \leq \frac{1}{2}|\eta|^2 \leq \frac{C^2}{2}.$$

♡

Talora può non essere noto a priori che la derivazione δ sia chiusa o almeno chiudibile. Il seguente teorema è utile per garantire chiudibilità.

Teorema 4.25

Sia \mathcal{A} una C^* -algebra e δ una $*$ -derivazione densamente definita. Supponiamo che esista una collezione Λ di stati tali che

$$|\omega(\delta(a))| < c_\omega|a| \quad \forall \omega \in \Lambda, \quad c_\omega < \infty,$$

e che la rappresentazione $\oplus_{\omega \in \Lambda} \Pi_\omega$ sia fedele, dove Π_ω è la rappresentazione GNS associata allo stato ω . Allora δ è chiudibile. \diamond

Dimostrazione

Poniamo

$$\omega_{x,z}(a) \equiv \omega(xaz), \quad x, z \in D(\delta).$$

Allora $\omega_{x,z} \in D(\delta^*)$. Infatti, per la regola di Leibniz,

$$\omega(x\delta(a)z) = \omega(\delta(xaz)) - \omega(\delta(x)az) - \omega(xa\delta(z)). \quad 4.36$$

Il primo termine a destra è dominato in norma da $|xaz|$ ed è pertanto continuo nella topologia di \mathcal{A} . Il secondo e il terzo termine sono continui in a poiché $x, z \in D(\delta)$ e ω è uno stato. Per costruzione

$$\omega_{x,z}(a) = (\Pi_\omega(x^*)\Omega_\omega, \Pi_\omega(a)\Pi_\omega(z)\Omega_\omega).$$

Per ipotesi, $\oplus_{\omega \in \Lambda} \Pi_\omega$ è fedele, e ancora per ipotesi $D(\delta)$ è denso; quindi la collezione degli stati $\omega_{x,z}$ separa \mathcal{A} e l'insieme della loro combinazioni lineari è denso nell'insieme degli stati di \mathcal{A} nella topologia W^* -debole. Dunque δ^* è densamente definita, e δ è chiudibile. \heartsuit

Nota 4.7

Come caso particolare, δ è chiudibile se è densamente definita ed esiste uno stato fedele ω tale che $\omega.\delta = 0$. Notiamo che se δ è un pregeneratore, la relazione $\omega.\delta = 0$ implica che ω è lasciato invariante dall'azione duale del gruppo ad un parametro di automorfismi associato a δ . \clubsuit

È anche importante avere delle condizioni che assicurino che δ sia un pregeneratore. Discuteremo più in dettaglio nel cap. 6 questo problema nell'ambito dello studio dei semigrupp e delle dissipazioni. Una condizione affinché una derivazione chiusa sia un pregeneratore è data da un teorema di Nelson. Premettiamo una definizione.

Definizione 4.21

L'elemento $a \in \mathcal{A}$ è analitico per δ se esiste $t > 0$ tale che

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n |\delta^n(a)| < \infty$$

\diamond

Vale allora il seguente criterio di uso molto comune.

Teorema 4.26 (Nelson)

Se la derivazione δ è densamente definita e chiudibile, le seguenti affermazioni sono tra loro equivalenti

- i) δ è un pregeneratore (cioè la sua chiusura genera un gruppo ad un parametro di automorfismi continuo in norma);
- ii) δ ha un insieme denso di vettori analitici ed è conservativo.

◇

Dimostrazione

i) \rightarrow ii): se $t \rightarrow \alpha_t$ è un gruppo ad un parametro di automorfismi della C^* -algebra \mathcal{A} continuo in norma, allora il suo generatore è conservativo. Infatti, se $\sigma(a) = |\sigma||a|$, si deduce

$$\sigma(\delta(a)) = \lim_{t \rightarrow \infty} (\sigma(\alpha_t(a)) - \sigma(a)) = \lim_{t \rightarrow \infty} (\sigma(\alpha_t(a)) - |\sigma||a|).$$

Ma $|\alpha_t(a)| = |a|$, dunque $|\sigma(\alpha_t(a))| \leq |\sigma||a|$. Ne concludiamo $\sigma(\delta(a)) \leq 0$ per ogni a reale. D'altra parte anche $-\delta$ è un generatore; quindi $\sigma(\delta(a)) = 0$ per ogni a reale e quindi per linearità per ogni a .

Dimostriamo ora che vi è un insieme denso di vettori analitici. Sia $\alpha_t = e^{t\delta}$ e poniamo per ogni $a \in \mathcal{A}$

$$a_n \equiv \sqrt{\frac{n}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} \alpha_t(a) dt. \quad 4.37$$

È facile verificare che a_n è intero analitico per ogni n . Notare in particolare che ponendo

$$\alpha^f(a) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \alpha_t(a) dt$$

risulta $\delta(\alpha^f(a)) = -\alpha^{f'}(a)$. Inoltre $a_n \rightarrow a$ in norma per $n \rightarrow \infty$. Dunque la collezione degli elementi a_n è densa in \mathcal{A} .

ii) \rightarrow i): questa è una conseguenza del teorema di Hille-Yosida che studieremo nel cap. 6. Una dimostrazione diretta si può ottenere notando che una costruzione del tipo (4.37) permette di ottenere elementi interi da elementi analitici, e l'insieme così ottenuto è ancora denso.

Sugli elementi interi la serie $\sum_n \frac{1}{n!} t^n \delta^n(a) \equiv T_t(a)$ converge uniformemente per ogni $t \in \mathbb{R}$ e definisce un gruppo che è continuo in norma in t per ogni a . Per continuità l'applicazione $a \rightarrow T_t(a)$ si estende per ogni t all'intera algebra, e l'estensione è ancora un gruppo. Se δ è conservativo, T_t è un automorfismo per ogni t .

♡

Utilizziamo il teorema di Nelson per studiare il seguente esempio, di interesse sia in Meccanica Statistica che in Teoria dei Campi.

Sia X un reticolo in R^d , con \mathcal{F} i sottoinsiemi finiti di X , e Λ un elemento di \mathcal{F} . Sia x un punto del reticolo e per ogni x poniamo $\mathcal{A}_{\{x\}} \equiv M_n$ (l'algebra delle matrici $n \times n$). Poniamo

$$\mathcal{A}_\Lambda \equiv \otimes_{x \in \Lambda} \mathcal{A}_x \quad 4.38$$

e notiamo le inclusioni naturali

$$\Lambda \subset \Sigma \rightarrow \mathcal{A}_\Lambda \otimes I_{\Sigma \ominus \Lambda} \subset \mathcal{A}_\Sigma. \quad 4.39$$

Definiamo \mathcal{A} come limite induttivo delle \mathcal{A}_Λ , $\Lambda \in \mathcal{F}$ rispetto all'inclusione.

Definizione 4.22

Definiamo *interazione* una funzione Φ da \mathcal{F} ad \mathcal{A} con le seguenti proprietà

a) $\forall \Lambda \in \mathcal{F}, \quad \Phi(\Lambda) \in \mathcal{A}_\Lambda$

b) $\Phi^*(\Lambda) = \Phi(\Lambda).$

◇

Poniamo inoltre, per $\Lambda \in \mathcal{F}$ e per tutti gli $a \in \cup_{\Lambda \in \mathcal{F}} \mathcal{A}_\Lambda$

$$\delta_\Lambda(a) = i[H_\Lambda, a], \quad H_\Lambda = \sum_{W \in \Lambda} \Phi(W). \quad 4.40$$

Notiamo che, per costruzione,

$$\Lambda \cap \Sigma = \emptyset \rightarrow \mathcal{A}_\Lambda \in \mathcal{A}'_\Sigma. \quad 4.41$$

Supponiamo che per ogni $\lambda > 0$ si abbia

$$\|\Phi\|_\lambda \equiv \sum_n e^{\lambda n} \left[\sup_{x \in X} \sum_{X \in \Lambda, |\Lambda|=n+1} \Phi(\Lambda) \right] < \infty \quad 4.42$$

dove $|\Lambda|$ è il numero di punti in Λ . Poniamo inoltre, per $\Lambda \in \mathcal{F}$

$$\delta_\Lambda(a) = i[H_\Lambda, a]. \quad 4.43$$

Notiamo che, per (4.41), per ogni $a \in \cup_{\Sigma \in \mathcal{F}} \mathcal{A}_\Sigma$ l'espressione $[H_\Lambda, a]$ non dipende da Λ per Λ sufficientemente grande. Pertanto resta definita da (4.40) una derivazione δ su tutto $\cup_{\Sigma \in \mathcal{F}} \mathcal{A}_\Sigma$. Notiamo che per ogni $\Lambda \in \mathcal{F}$ \mathcal{A}_Λ è un'algebra di matrici, e quindi la traccia (normalizzata a valere uno sull'identità) esiste ed è uno stato normale. Questa costruzione è compatibile con l'inclusione (4.39) ed è pertanto estendibile a tutta \mathcal{A} e definisce uno stato ω_0 che ha la proprietà di traccia

$$\omega_0(ab) = \omega_0(ba), \quad \forall a, b \in \mathcal{A}. \quad 4.44$$

Estendiamo per continuità ω_0 ad uno stato ω sull'intera algebra \mathcal{A} . Per matrici finite A, B si ha $\text{Tr}[A, B] = 0$ e pertanto

$$\omega(\delta(a)) = 0 \quad \forall a \in D(\delta). \quad 4.45$$

Poiché ω separa \mathcal{A} , dal teorema 4.24 segue che la derivazione δ è chiudibile nella rappresentazione Π_ω associata allo stato ω . Per calcolo esplicito, utilizzando (4.42), si verifica che ogni elemento di $\cup_{\Sigma \in \mathcal{F}} \mathcal{A}_\Sigma$ è un elemento analitico per δ . Dunque valgono le ipotesi del teorema di Nelson, e δ è un pregeneratore.

Il gruppo ad un parametro di automorfismi di $\Pi_\omega(\mathcal{A})$ generato da δ è una dinamica definita come limite delle dinamiche *locali* generate dalle H_Λ , $\Lambda \in \mathcal{F}$. Da (4.45) segue anche che esiste nella chiusura debole di $\Pi_\omega(\mathcal{A})$ un operatore simmetrico, chiuso, densamente definito \hat{H} tale che

$$\delta(\Pi_\omega(a)) = i[\hat{H}, \Pi_\omega(a)]. \quad 4.46$$

Il dominio di definizione di \hat{H} contiene $\Pi_\omega(D(\delta))\Omega$ (dove Ω è il vettore che la costruzione GNS associa allo stato ω).

Sia formalmente

$$T_t = e^{it\hat{H}} \quad 4.47$$

così che, sempre formalmente

$$\alpha_t(\Pi_\omega(a)) = \sum_n \frac{i^n t^n}{n!} [\hat{H}, \dots [\hat{H}, \Pi_\omega(a)]] \dots = T_t \Pi_\omega(a) T_{-t}. \quad 4.48$$

Per costruzione $T_t\Omega = \Omega$, e quindi T_t è definito da (4.48) come serie convergente sugli elementi interi di $\Pi_\omega(\mathcal{A})$ (un insieme denso). Utilizzando il fatto che δ è conservativo si verifica $|T_t\Omega| = |\Omega|$ e nello stesso modo si dimostra che T_t è un'isometria invertibile su di un insieme denso nello spazio di Hilbert \mathcal{H} della rappresentazione Π_ω , e quindi si estende per continuità ad un operatore unitario. Con un procedimento simile viene verificata la proprietà di gruppo $T_t \cdot T_s = T_{t+s}$. Infine la continuità forte viene verificata notando che la convergenza della serie (4.48) sugli elementi interi garantisce la continuità di $T_t(a)$ come funzione di t nella topologia forte di \mathcal{H} per ogni a intero, e poi su tutto $\Pi_\omega(\mathcal{A})$ per continuità. Dunque $t \rightarrow T_t$ viene realizzato da un gruppo ad un parametro di operatori unitari in H , continuo in t nella topologia forte. Ne segue, dal teorema di Stone, che \hat{H} è autoaggiunto.

Nota 4.8

Conviene notare che, pur essendo \hat{H} il generatore della dinamica limite definita nella rappresentazione GNS associata allo stato traccia ω , esso *non è il limite formale* di $\Pi_\omega(H_\Lambda)$ quando $\Lambda \rightarrow X$; questo limite non esiste.

Tuttavia si può far vedere che si ottiene convergenza *compensando* con una famiglia di operatori $Z_\Lambda \in \Pi'_\omega(\mathcal{A})$. Infatti si può scegliere Z_Λ in modo tale che

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} [\Pi_\omega(H_\Lambda), \Pi_\Omega(a)] = [\hat{H}, \Pi_\omega(a)].$$



Un altro esempio di applicazione del teorema di Nelson, di interesse nella teoria dei campi quantizzati, è il seguente, che ricalca nella struttura l'esempio precedente ma si avvale di specifiche proprietà per costruire una rappresentazione basata su uno stato diverso dallo stato traccia (cioè lo *stato di vuoto*).

Nell'esempio precedente scegliamo $n = 2$, cioè associamo ad ogni punto del reticolo l'algebra B_2 delle matrici due per due. Consideriamo l'automorfismo definito su B_2 da

$$\alpha_t(a) \equiv e^{iNt} a e^{-iNt}, \quad N = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ed esteso a \mathcal{A} per prodotto diretto. L'algebra B_2 è generata dall'identità e da A, A^* dove

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

È facile verificare che

$$\alpha_t(A) = e^{it} A, \quad \alpha_t(A^*) = e^{-it} A^*.$$

Il generatore infinitesimo di

$$\alpha_t^\Lambda = \otimes \alpha_t^k, \quad k \in \Lambda$$

è $N_\Lambda \equiv \sum_{k \in \Lambda} N_k$. È possibile definire il gruppo di automorfismi limite α_t ma esso non è continuo in t in norma (α_t^Λ è continuo ma non uniformemente continuo). Tuttavia se Π_0 è la rappresentazione GNS associata allo stato

$$\omega_0 \equiv \otimes \xi_n, \quad N \xi_n = 0 \quad \forall n$$

si ha che $\Pi_0(N_\Lambda)$ converge in risolvente quando $\Lambda \rightarrow X$ ad un operatore \hat{N} autoaggiunto, con spettro i numeri interi e si ha

$$\lim_{\Lambda \rightarrow X} \Pi_0(\alpha_t^\Lambda) \equiv \Pi_0(\alpha_t(a) = e^{it\hat{N}} \Pi_0(a) e^{-it\hat{N}}). \quad 4.49$$

Nota 4.9

Naturalmente, essendo questo un caso particolare del precedente, il gruppo ad un parametro di automorfismi limite ha anche un pregeneratore nella rappresentazione associata allo stato traccia, ma l'operatore che lo genera non è limitato dal basso (e ha uno spettro continuo).



4.5 CONDIZIONE K.M.S.

Una condizione particolarmente importante per i sistemi dinamici C^* è la condizione K.M.S. (dai nomi Kubo, Martin e Schwinger) della quale daremo adesso dei brevi cenni.

Questa condizione è stata inizialmente introdotta in Meccanica Statistica Classica come condizione al bordo di insiemi crescenti (che invadono lo spazio) che garantisce l'unicità della soluzione di un insieme infinito di equazioni differenziali che determinano lo stato di equilibrio termodinamico di un sistema di infinite particelle a densità limitata.

Successivamente Haag, Hugenholz e Winnik notarono che la condizione K.M.S. poteva essere sostituita al postulato di Gibbs come principio per l'esistenza e la struttura dello stato fondamentale per un sistema termodinamico descritto mediante la Meccanica Statistica Quantistica. Con il vantaggio che, mentre il postulato di Gibbs può essere formulato solo per un sistema finito, e richiede per sistemi infiniti l'introduzione del procedimento di passaggio al "limite termodinamico", la condizione K.M.S. può essere formulata direttamente per sistemi infiniti. Nel contesto della Meccanica Statistica, sia Classica che Quantistica, il parametro β che appare nella condizione K.M.S. gioca il ruolo di inverso della temperatura.

Data la sua struttura astratta, la condizione K.M.S. è utilizzata anche nella Teoria Quantistica dei Campi, per dimostrare l'eventuale esistenza e unicità dello stato fondamentale e l'eventuale implementabilità del gruppo di Lorentz inhomogeneo mediante un gruppo di operatori unitari. In questo contesto il parametro β gioca il ruolo di "coordinata dell'asse dei tempi immaginario" e viene utilizzata per tradurre il problema dell'invarianza della teoria (o del processo sottostante) per il gruppo di Lorentz $O(1, d)$ nel problema di invarianza per il gruppo unitario $O(d + 1)$ che è compatto.

Noi in questo capitolo l'utilizzeremo soprattutto per descrivere condizioni sotto le quali un gruppo ad un parametro di automorfismi di una C^* -algebra risulta essere implementato da un gruppo di operatori unitari.

A titolo d'esempio, sia \mathcal{A} un'algebra di matrici $N \times N$. Indichiamo con Tr l'operazione di traccia, e data una matrice simmetrica H e una matrice positiva B indichiamo con ϕ lo stato su \mathcal{A} definito da

$$\phi_A(x) \equiv \frac{\text{Tr } Bx}{\text{Tr } B} \quad x \in \mathcal{A} \quad 4.50$$

e con α_t il gruppo di automorfismi con generatore H

$$\alpha_t(x) \equiv e^{itH} x e^{-itH}. \quad 4.51$$

Un calcolo elementare mostra che la condizione K.M.S. che definiremo ora è soddisfatta col parametro β se e solo se $B = e^{-\beta H}$.

L'interesse di questa costruzione sta nel fatto che se l'algebra \mathcal{A} che consideriamo è limite induttivo di algebre finito-dimensionali \mathcal{A}_n la condizione K.M.S. potrebbe essere soddisfatta per ogni intero n ed essere pertanto associata per ogni n finito ad un gruppo ad un parametro di operatori unitari ed a uno stato d'equilibrio, mentre lo stato limite non può essere espresso mediante una traccia e il gruppo di automorfismi può essere esterno.

Se peraltro la condizione K.M.S. è soddisfatta anche nel limite, questo può portare a dimostrare che il gruppo ad un parametro limite di automorfismi ammette un generatore, che non può essere in generale espresso come limite dei generatori per ciascun valore finito di n .

Per introdurre la condizione K.M.S., consideriamo un sistema dinamico C^* che indichiamo con $\{\mathcal{A}, \alpha_t\}$.

Definizione 4.23

Un elemento $x \in \mathcal{A}$ è detto *analitico* per α_t se la funzione $t \rightarrow \alpha_t(x)$ ha un'estensione, necessariamente unica, a una funzione analitica intera $\zeta \rightarrow \alpha_\zeta(x)$ $\zeta \in \mathcal{C}$.

◇

Se $x \in \mathcal{A}$ definiamo ($n = 1, 2, \dots$)

$$x_n \equiv \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{\pi}} \int \alpha_t(x) e^{-n^2 t} dt.$$

È facile vedere che per ciascun intero n l'elemento x_n è analitico per α_t , e si ha $x_n \rightarrow x$ in norma per $n \rightarrow \infty$. Ne deduciamo che l'insieme \mathcal{A}^a di vettori analitici è denso in norma in \mathcal{A} ed è facile anche vedere che si tratta di una *-sottoalgebra di \mathcal{A} .

Le stesse conclusioni valgono se si tratta di un sistema dinamico W^* o di un sistema dinamico su un'algebra di von Neumann.

Definizione 4.24

Dato un sistema dinamico $\{\mathcal{A}, \alpha_t\}$ si dice che uno stato ϕ *soddisfa la condizione K.M.S. (per il gruppo α_t) al valore β del parametro* ($0 < \beta < \infty$) (abbreviato ϕ è uno stato β -K.M.S.) se per ogni $x \in \mathcal{A}^a$ e ogni $y \in \mathcal{A}$ si ha

$$\phi(y \alpha_{\xi+i\beta}(x)) = \phi(\alpha_\xi(x) y), \quad \xi \in R. \quad 4.52$$

◇

Estendiamo questa definizione in modo da coprire anche i casi $\beta = 0$ e $\beta = \infty$. Se $\beta = 0$ diciamo che ϕ soddisfa la condizione K.M.S. a $\beta = 0$ se ϕ è uno stato che soddisfa

$$\phi(y \alpha_\zeta(x)) = \phi(\alpha_\zeta(x) y) \quad \forall x \in \mathcal{A}^a \quad y \in \mathcal{A}. \quad 4.53$$

Se $\beta = \infty$ diciamo che ϕ soddisfa la condizione K.M.S. all'infinito se per ogni $x \in \mathcal{A}^a$ e ogni $y \in \mathcal{A}$ la funzione analitica $f(\zeta) \equiv \phi(y \alpha_\zeta(x))$ soddisfa

$$|f(\zeta)| \leq \|x\| \|y\| \quad \text{se} \quad \Im \zeta \geq 0. \quad 4.54$$

In questo caso lo stato ϕ viene detto, per motivi che vedremo, *stato di energia zero* (ground state, stato fondamentale).

Proposizione 4.27

Sia \mathcal{A}, α_t un sistema dinamico C^* e $0 \leq \beta \leq \infty$. Allora le seguenti condizioni su uno stato ϕ di \mathcal{A} sono tra loro equivalenti

- 1) ϕ è uno stato β -K.M.S.
- 2) ϕ soddisfa la condizione K.M.S. per un insieme denso di elementi $x \in \mathcal{A}^a$.
- 3) per ogni coppia $x, y \in \mathcal{A}$ esiste una funzione limitata continua $f_\phi(\zeta)$ nella striscia

$$\Omega_\beta \equiv \{\zeta \in \mathcal{C}, 0 \leq \Im \zeta \leq \beta\}$$

che è olomorfa nell'interno di Ω e soddisfa al bordo

$$f_\phi(t) = \phi(y \alpha_t(x)), \quad f_\phi(t + i\beta) = \phi(\alpha_t(x) y). \quad 4.55$$

Se $\beta = \infty$ questa condizione va sostituita con

$$f_\phi(t) = \phi(y \alpha_t(x)), \quad t \in \mathbb{R}; \quad \|f_\phi\| \leq \|x\| \|y\|. \quad 4.56$$

◇

Dimostrazione

Le implicazioni 1) \rightarrow 2) \rightarrow 3) sono evidenti. Per dimostrare 3) \rightarrow 1) assumiamo che la condizione sia soddisfatta per tutti gli y e tutti gli x in un insieme denso di \mathcal{A}^a . Se $\beta < \infty$ sia $\{x_n\}$ una successione che converge a x . Questo fornisce una successione di funzioni analitiche $\{f_n\}$ nella striscia $0 < \Im \zeta < \beta$, continue al bordo e tali che

$$f_n(\xi) = \phi(y \alpha_\xi(x_n)), \quad f_n(\xi + i\beta) = \phi(\alpha_\xi(x_n) y).$$

Ciascuna f_n è limitata in Ω_β . Per il teorema di Pragmen-Lindelof abbiamo

$$\begin{aligned} |f_n(\xi) - f_m(\xi)| &\leq \sup_{\xi \in \partial\Omega_\beta} |f_n(\xi) - f_m(\xi)| \\ &= \sup \{|\phi(y \alpha_t(x_n - x_m))|, |\phi(\alpha_t(x_n - x_m) y)|\} \\ &\leq \|y\| \|x_n - x_m\|. \end{aligned} \quad 4.57$$

Ne segue che la successione $\{f_n\}$ converge uniformemente ad una funzione f in $C_b(\Omega)$ che è olomorfa nell'interno di Ω e soddisfa al bordo le condizioni volute. Nel caso $\beta = \infty$ definiamo (per $\xi \in \mathbb{R}$) $f_n(\xi) \equiv \phi(y \alpha_\xi(x_n))$ e notiamo che la condizione K.M.S. all'infinito dà

$$|f_n(\zeta) - f_m(\zeta)| \leq \|x_n - x_m\| \|y\|$$

per $\zeta \geq 0$. Ne segue che la successione $\{f_n\}$ converge ad una funzione $f(\zeta)$ in $C_b(\Omega)$ olomorfa nell'interno. Inoltre $f(t) = (y \alpha_t(x)) \quad \forall t$ e $\|f\| \leq \|x\| \|y\|$. \heartsuit

Una proprietà importante della condizione K.M.S. risulta dalla seguente Proposizione.

Proposizione 4.28

Se $\{\mathcal{A}, \alpha_t\}$ è un sistema dinamico C^* e ϕ è uno stato che soddisfa la condizione K.M.S. relativamente al gruppo α_t per un valore β del parametro ($0 \leq \beta \leq \infty$), allora ϕ è invariante per il gruppo di automorfismi α_t . \diamond

Dimostrazione

Per $0 < \beta < \infty$ scegliamo y in (4.52) essere l'identità (se l'algebra non ammette identità, utilizziamo una successione di identità approssimate). Dalla (4.56) si ha per ogni $x \in \mathcal{A}^a$

$$\phi(\alpha_{\zeta+i\beta}(x)) = \phi(\alpha_\zeta(x)).$$

Quindi la funzione analitica $f(\zeta) \equiv \phi(\alpha_\zeta(x))$ è limitata nella striscia Ω_β e periodica di periodo β . Pertanto è limitata in \mathcal{C} e quindi costante per il teorema di Liouville. Poiché \mathcal{A}^a è denso in \mathcal{A} ne segue che ϕ è invariante per α_t .

Se $\beta = 0$ lo stato è invariante per definizione. Se $\beta = \infty$ prendendo per y l'identità si ottiene che per ogni $x \in \mathcal{A}^a$ la funzione $f : \zeta \rightarrow \phi(\alpha_\zeta(x))$ soddisfa $|f(\zeta)| \leq \|x\|$ per $\Im \zeta \geq 0$.

Poiché $\phi = \phi^*$ si ha $\alpha_\zeta(x) = \phi(\alpha_\zeta(x^*))$. Pertanto anche per $\zeta \leq 0$ si ha $|f(\zeta)| \leq \|x\|$. Ne segue che f è una funzione intera limitata di ζ ed è pertanto costante; anche in questo caso ϕ è invariante per α_t . \heartsuit

L'invarianza di uno stato ϕ per un automorfismo implica che nella rappresentazione indotta da questo stato l'automorfismo è interno.

Teorema 4.29

Se uno stato ϕ della C^* -algebra \mathcal{A} è invariante per un automorfismo α , allora nella rappresentazione G.N.S. data da $\Pi_\phi(\mathcal{A})$ sullo spazio \mathcal{H}_ϕ indotta da ϕ , l'automorfismo è interno, esiste cioè un operatore unitario U_ϕ tale che

$$\Pi_\phi(\alpha(a)) = U_\phi \Pi_\phi(a) U_\phi^* \quad \forall a \in \mathcal{A}.$$

\diamond

Dimostrazione

Sia Ω il vettore ciclico che rappresenta lo stato ϕ nello spazio di Hilbert \mathcal{H}_ϕ introdotto attraverso la rappresentazione G.N.S.. Definiamo U_ϕ ponendo per ogni $a \in \Pi_\phi \mathcal{A}$

$$U_\phi \Pi_\phi(a) \Omega \equiv \Pi_\phi(\alpha(a)) \Omega. \quad 4.58$$

La definizione è ben posta per l'invarianza di ϕ ; infatti

$$|\Pi_\phi((\alpha(a))\Omega)|^2 = (\Omega, \Pi_\phi((\alpha(a^*))\Pi_\phi((\alpha(a))\Omega)) = (\Omega, \Pi_\phi(a^*)\Pi_\phi(a)\Omega) = |\Pi_\phi(a)\Omega|^2 \quad 4.59$$

Questo dimostra anche che U_ϕ così definito è un'isometria invertibile, e poiché è per costruzione definito densamente si può estendere ad un operatore unitario che indichiamo con lo stesso simbolo. Ponendo $a = e$ per costruzione si ha $U_\phi\Omega = \Omega$. Inoltre, prendendo $a = a_1 a_2$,

$$\begin{aligned} \Pi_\phi\alpha(a_1)\Pi_\phi\alpha(a_2)\Omega &= U_\phi \Pi_\phi(a_1 a_2)\Omega \\ &= U_\phi \Pi_\phi(a_1) \Pi_\phi(a_2)\Omega \\ &= U_\phi \Pi_\phi(a_1)U_\phi^* U_\phi \Pi_\phi(a_2)\Omega = U_\phi \Pi_\phi(a_1)U_\phi^* \Pi_\phi(\alpha(a_2))\Omega. \end{aligned} \quad 4.60$$

Ne segue

$$U_\phi \Pi_\phi(a_1)U_\phi^* = \Pi_\phi(\alpha(a_1))$$

su un insieme denso di vettori e quindi su tutto lo spazio di Hilbert. \heartsuit

Corollario

Se un gruppo a un parametro di automorfismi α_t di una C^* -algebra \mathcal{A} lascia invariante uno stato ϕ , nella rappresentazione G.N.S. indotta da ϕ il gruppo di automorfismi è generato da un gruppo di operatori unitari. Se in questa rappresentazione il gruppo di automorfismi è debolmente continuo anche il gruppo di operatori unitari è debolmente continuo e per il teorema di Stone esiste in \mathcal{H}_ϕ un operatore autoaggiunto h_ϕ tale che per ogni $a \in \mathcal{A}$ si ha

$$\Pi_\phi(\alpha_t(a)) = e^{ith_\phi}\Pi_\phi(a)e^{-ith_\phi}. \quad 4.61$$

\diamond

Nell'ambito del teorema la condizione K.M.S. dà un criterio per l'esistenza di un stato fondamentale.

Teorema 4.30

Sia \mathcal{A} α_t $t \in \mathbb{R}$ un sistema dinamico C^* . Le seguenti condizioni su uno stato ϕ sono tra loro equivalenti:

- 1) ϕ è invariante sotto α_t e, se indichiamo con $\Pi_\phi, U_\phi(t) = e^{ith_\phi}, \mathcal{H}_\phi, \Omega_\phi$ la rappresentazione ciclica covariante associata a ϕ , si ha $h_\phi \geq 0$;
- 2) ϕ soddisfa la condizione K.M.S. all'infinito.

\diamond

Dimostrazione

Dimostriamo le due implicazioni 1) \rightarrow 2) e 2) \rightarrow 1).

1) \rightarrow 2): se $h_\phi \geq 0$, possiamo definire, per $a, b \in \mathcal{A}$ una funzione f analitica e limitata nel semipiano superiore mediante

$$f(z) \equiv (e^{izh_\phi} \Pi_\phi(a), P_\phi(b)). \quad 4.62$$

Da $e^{-\beta h_\phi} \leq I$ si ha $|f| \leq \|a\| \|b\|$; inoltre per ogni t reale si ha $f(t) = \phi(y^* \alpha_t x)$.
2) \rightarrow 1): consideriamo la funzione analitica (4.61) nel caso $b = a$. Per ipotesi $|f(z)| \leq \|a\|^2$ per $\Im z \geq 0$. Pertanto $e^{-h_\phi} \leq I$ e da questo segue $h_\phi \geq 0$. ♡

Un risultato interessante è il seguente, che dà una condizione sul sistema dinamico sotto la quale è garantita l'esistenza di uno stato K.M.S. per qualunque $0 \leq \beta \leq \infty$ se si conosce l'esistenza di un tale stato per un valore finito β_0 del parametro.

Premettiamo una definizione.

Definizione 4.25

Sia $\{\mathcal{A}, \alpha_t\}$ un sistema dinamico. Esso è *approssimativamente interno* se esiste un filtro $\{h_\lambda\}$ di elementi autoaggiunti in \mathcal{A} tali che per ogni elemento *analitico* a si abbia

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \|\alpha_z(a) - \alpha_z^\lambda(a)\| = 0, \quad \alpha_z(\lambda) \equiv e^{izh_\lambda} a e^{-izh_\lambda} \quad 4.63$$

uniformemente in z nei compatti di C . ◇

Nota 4.10

Sistemi dinamici che hanno la proprietà di essere approssimativamente interni sono comuni in molti contesti. Un caso di interesse nei modelli in Fisica è il quello in cui l'algebra \mathcal{A} è la chiusura di un filtro crescente $\{\mathcal{A}_\lambda\}$ di algebre finite dimensionali (\mathcal{A} è detta in tale caso essere *approssimativamente finito-dimensionale*, o sinteticamente essere una AF-algebra). Ciò è vero in particolare nella descrizione di fermioni su un reticolo. Se ciascuna delle \mathcal{A}_λ è lasciata invariante da α_t è facile vedere che in questo caso in sistema dinamico risulta approssimativamente interno. ♣

Per i sistemi dinamici che sono approssimativamente interni valgono i due teoremi seguenti.

Teorema 4.31

Sia $\{\mathcal{A}, \alpha_t\}$, $t \in R$ un sistema dinamico C^* approssimativamente interno. Supponiamo che $I \in \mathcal{A}$ e che per ogni h_λ l'estremo inferiore dello spettro sia un autovalore. Allora \mathcal{A} possiede uno stato fondamentale (ground state), cioè uno stato che soddisfa la condizione K.M.S. all'infinito.

◇

Dimostrazione

Sia $\{h_\lambda\}$ un insieme di operatori autoaggiunti che soddisfa (4.62). Senza perdita di generalità assumiamo che $h_\lambda \geq 0$ per ogni λ e che 0 sia un autovalore. Esiste quindi un insieme di stati ϕ_λ tali che $\phi_\lambda(h_\lambda) = 0$ per ogni λ . Poiché $I \in \mathcal{A}$ lo spazio degli stati è compatto per la topologia *-debole, passando eventualmente ad una sottosuccessione possiamo assumere che la successione ϕ_λ converga ad uno stato ϕ .

Notiamo ora che ϕ_λ è uno stato fondamentale per h_λ . Infatti se $a, b \in \mathcal{A}$ e $\Im z \geq 0$ si ha

$$|\phi_\lambda(a \alpha_z^\lambda(b))| = |\phi_\lambda(ae^{izh_\lambda} b e^{-izh_\lambda})| = |\phi_\lambda(ae^{izh_\lambda} b)| \leq \|a\| \|b\|$$

dove abbiamo tenuto conto dell'invarianza di ϕ_λ . Per ogni $b \in \mathcal{A}^a$ e $a \in \mathcal{A}$ si ha

$$\begin{aligned} |\phi(a\alpha_z(b))| &\leq |(\phi - \phi_\lambda)(a\alpha_z(b))| + |\phi_\lambda(a(\alpha_z(b) - a\alpha_z^\lambda(b)))| + \phi_\lambda(a\alpha_z^\lambda(b)) \\ &\leq |(\phi - \phi_\lambda)(a\alpha_z(b))| + \|a\| |(\alpha_z(b) - \alpha_z^\lambda(b))| + \|a\| \|b\|. \end{aligned}$$

4.64

Nel limite si ha per $\lambda \rightarrow \infty$

$$|\phi(a\alpha_z(b))| \leq \|a\| \|b\|.$$

♡

Teorema 4.32

Sia $\{\mathcal{A}, \alpha_t\}$, $t \in \mathbb{R}$ un sistema dinamico C^* approssimativamente interno. Supponiamo che $e \in \mathcal{A}$. Se esiste uno stato K.M.S. a un valore *finito* β_0 del parametro, allora esiste uno stato K.M.S. per *ogni* valore del parametro $0 \leq \beta \leq \infty$.

◇

Dimostrazione

Supponiamo che ϕ soddisfi la condizione K.M.S. per un valore β_0 del parametro, e sia h_λ come nel teorema precedente. Scegliamo $\beta \geq 0$ e poniamo $K_\lambda = e^{\frac{1}{2}(\beta_0 - \beta)h_\lambda}$. Consideriamo l'insieme di stati $\{\psi_\lambda\}$ definiti da

$$\psi_\lambda(a) = \frac{\phi(K_\lambda a K_\lambda)}{\phi(K_\lambda)^2}.$$

Possiamo come prima supporre che una sottosuccessione converga a uno stato ψ di \mathcal{A} . Sia $a \in \mathcal{A}^a$ e $b \in \mathcal{A}$.

Utilizzando la condizione K.M.S. a β_0 e il fatto che

$$K_\lambda^{-1} a K_\lambda = \alpha_{i\frac{\beta - \beta_0}{2}}^\lambda(a),$$

otteniamo

$$\begin{aligned}\phi(K_\lambda \alpha_{i \frac{\beta - \beta_0}{2}}^\lambda(a) b K_\lambda) &= \phi(a K_\lambda b K_\lambda) \\ \phi(K_\lambda b \alpha_{i \frac{\beta - \beta_0}{2}}^\lambda(\alpha_{i \beta_0}(a))) K_\lambda &= \phi(K_\lambda b K_\lambda \alpha_{i \beta_0}(a)).\end{aligned}$$

Dividendo per $\phi(K_\lambda^2)$ e passando al limite si ottiene

$$\psi(\alpha_{i \frac{\beta - \beta_0}{2}}(a) b) = \psi(b \alpha_{i \frac{\beta + \beta_0}{2}}(a)).$$

Sostituendo a con $\alpha_{i \frac{\beta - \beta_0}{2}}(a)$ si ottiene

$$\psi(a b) = \psi(b \alpha_{i \beta}(a)).$$

♡

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [Ara64] G. Araki, Progr. Th. Phys. 32 (1964) 956-965.
- [CE79] E. Christensen, D. Evans, J. London Math. Soc. 20 (1979) 358-368.
- [Dan67] G. Dell'Antonio, Comm. Pure Appl. Math 20 (1967) 413-429.
- [GN43] I. Gel'fand, M. Neimark, Math. Sbornik 12 (1943) 197-217.
- [Kad66] R.V. Kadison, Ann. Math. 83 (1966) 280-293.
- [Rin72] J.R. Ringrose, J. London Math. Soc. 5 (1972) 432.
- [Sak60] S. Sakai, Tohoku Math. Journ. 12 (1960) 31-33.
- [Sak66] S. Sakai, Ann. Math. 83 (1966) 273-279.
- [Sak91] S. Sakai, *Operator algebras in dynamical systems*, Cambridge Univ. Press 1991.
- [Seg47] I. Segal, Bull. Amer. Math. Soc. 53 (1947) 73-88.

CAPITOLO 5

ELEMENTI DI TEORIA DEGLI OPERATORI SU SPAZI DI HILBERT

Se A è un operatore su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , con dominio $D(A)$, per definizione il dominio $D(A^*)$ dell'aggiunto A^* è il sottoinsieme di H composto da quegli elementi ϕ tali che $(\phi, A\psi)$, $\psi \in D(A)$ sia continuo in ψ nella topologia di \mathcal{H} . Quindi se $\phi \in D(A^*)$ per il teorema di rappresentazione di Riesz esiste $\xi_\phi \in \mathcal{H}$ tale che

$$(\phi, A\psi) = (\xi_\phi, \psi) \quad \forall \psi \in D(A). \quad 5.1$$

Assumeremo sempre che $D(A)$ sia denso; sotto questa condizione l'elemento ξ_ϕ risulta definito in modo univoco. Su $D(A^*)$ definiamo allora A^* nel seguente modo

$$A^*\phi \equiv \xi_\phi \quad \forall \phi \in D(A^*). \quad 5.2$$

Da (5.1) e (5.2) segue

$$(A^*\phi, \psi) = (\phi, A\psi) \quad \psi \in D(A), \quad \phi \in D(A^*). \quad 5.3$$

Si noti che in generale non vi è relazione tra $D(A)$ e $D(A^*)$. Si può anche verificare da (5.3) che se $D(A)$ è denso, A^* è un operatore chiuso (diamo nell'appendice a questo capitolo una terminologia di base relativa agli operatori su uno spazio di Hilbert).

Definizione 5.1

Un operatore A è *autoaggiunto* se

$$D(A) = D(A^*), \quad A = A^*. \quad 5.4$$

◇

Definizione 5.2

Un operatore A definito su un dominio $D(A)$ è *essenzialmente autoaggiunto* se la sua chiusura (nella norma del grafico) \bar{A} , definita in generale su un dominio più grande $D(\bar{A})$, è un operatore autoaggiunto.

◇

La autoaggiuntezza essenziale è importante nella pratica; infatti gli operatori di interesse in Fisica vengono in generale definiti su domini naturali che sono spesso più piccoli dei domini dell'operatore autoaggiunto considerato.

Consideriamo ad esempio nello spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ l'operatore $A \equiv \frac{d^2}{dx^2}$ definito inizialmente sulle funzioni di una variabile reale che sono in $C_0^\infty(\mathbb{R})$

(infinite volte differenziabili e con supporto compatto). La sua chiusura \bar{A} nella norma del grafico è definita su tutte le funzioni che sono a quadrato integrabile insieme alla loro derivata seconda. Sulle funzioni con questa proprietà abbiamo

$$\bar{A}\phi(x) = \frac{d^2}{dx^2}\phi(x).$$

Dalla definizione, integrando per parti due volte si vede facilmente che \bar{A} è un operatore autoaggiunto completamente determinato da A , cioè dalla sua restrizione a $C_0^\infty(\mathbb{R})$.

Definizione 5.3

Un operatore A si dice *simmetrico* se

$$(\phi, A\psi) = (A\phi, \psi) \quad \forall \psi, \phi \in D(A)$$

◇

Ogni operatore A che sia autoaggiunto è necessariamente simmetrico; vedremo nel capitolo 9 le ostruzioni a che un operatore simmetrico sia autoaggiunto. Diamo ora una caratterizzazione degli operatori autoaggiunti

Teorema 5.1

Sia A chiuso e simmetrico densamente definito. Le seguenti tre affermazioni sono tra loro equivalenti

- (i) A è autoaggiunto,
- (ii) $\ker(A^* \pm iI) = \{0\}$,
- (iii) $\text{Ran}(A \pm iI) = \mathcal{H}$.

◇

Abbiamo posto

$$\ker A \equiv \{\phi \in D(A), A\phi = 0\}$$

$$\text{Ran } A \equiv \{A\phi, \phi \in D(A)\}$$

Il *kernel* viene anche detto *nucleo* ed il *Range* viene anche detto *codominio*.

Dimostrazione

(i) \rightarrow (ii):

Sia $\phi \in \ker(A^* + i)$. Quindi $(A^* + i)\phi = 0$. poiché A è autoaggiunto, vale anche $A\phi = -i\phi$. Dunque

$$i\|\phi\|^2 = i(\phi, \phi) = (A^*\phi, \phi) = (\phi, A\phi) = -i(\phi, \phi) = -i\|\phi\|^2.$$

Ne concludiamo che $\phi = 0$.

(ii) \rightarrow (iii):

Notiamo che, poiché A^* è chiuso (abbiamo assunto che A sia densamente definito) si ha

$$\text{Ran}(A \mp iI)^\perp = \ker(A^* \pm iI).$$

Dobbiamo quindi solo dimostrare che $\text{Ran}(A \pm iI)$ è chiuso. Diamo la dimostrazione per $(A - iI)$. Sia $\phi \in D(A)$. Allora

$$\|(A - iI)\phi\|^2 = \|A\phi\|^2 + \|\phi\|^2 + i(\phi, A\phi) - i(\phi, A\phi) = \|A\phi\|^2 + \|\phi\|^2 \quad 5.5$$

dove abbiamo utilizzato $D(A) \subset D(A^*)$ e il fatto che A^* è un'estensione di A (poiché A è simmetrico).

Consideriamo una successione

$$\phi_n \in D(A), \quad (A - iI)\phi_n \rightarrow \psi_0,$$

e supponiamo che ϕ_n converga a $\psi \in \mathcal{H}$ e che la successione $A\phi_n$ sia convergente. poiché A è chiuso, esiste $\xi \in \mathcal{H}$ tale che $A\phi_n \rightarrow \xi$. Per ogni n si ha

$$(A - iI)\phi_n - A\phi_n + i\phi_n = 0,$$

dunque

$$\psi = A\xi - i\xi, \quad \xi \in D(A).$$

Questo dimostra che $\psi \in \text{Ran}(A - iI)$

(iii) \rightarrow (i):

Sia $\phi \in D(A^*)$. Per ipotesi, $\text{Ran}(A - iI) = \mathcal{H}$, dunque

$$\exists \eta \in D(A), \quad (A - iI)\eta = (A^* - iI)\phi. \quad 5.6$$

poiché $D(A) \subset D(A^*)$ ne segue $(A^* - iI)(\phi - \eta) = 0$. Ma $\ker(A^* - iI) = \text{Ran}(A + iI)^\perp = \{0\}$. Dunque $\phi = \eta$ e ne segue $\phi \in D(A)$. Allora $A^* \subset A$ e poiché $A \subset A^*$ (ciò in quanto A è simmetrico e chiuso), ne segue $A = A^*$. \heartsuit

Nota 5.1

Dal teorema precedente segue che se A è essenzialmente autoaggiunto, e quindi $\bar{A} \equiv A^*$, gli operatori $(\bar{A} + iI)^{-1}$ e $(\bar{A} - iI)^{-1}$ sono limitati, commutano fra loro e risulta

$$(\bar{A} \pm iI)^{-1} = [(\bar{A} \mp iI)^{-1}]^*. \quad 5.7$$

Dunque $(\bar{A} + iI)^{-1}$ e $(\bar{A} - iI)^{-1}$ sono operatori normali (sono limitati e commutano con il proprio aggiunto). Come conseguenza, se A è essenzialmente autoaggiunto, l'operatore

$$U_{\bar{A}} \equiv (\bar{A} - iI)(\bar{A} + iI)^{-1} \quad 5.8$$

è unitario e si ha

$$\bar{A} = i \frac{U_{\bar{A}} - I}{U_{\bar{A}} + I}. \quad 5.9$$

Definizione 5.4

L'operatore unitario U_A viene detto *trasformata di Cayley* dell'operatore autoaggiunto A .

◇

Si vede che l'operatore A è limitato se e solo se lo spettro dell'operatore di Cayley associato non contiene -1 .

Nota 5.2

Nel teorema di caratterizzazione si potrebbe considerare, invece di $A \pm iI$, gli operatori $A + \alpha I$ e $A + \beta I$ con $\Im \alpha > 0$ e $\Im \beta < 0$. Le dimostrazioni procederebbe nello stesso modo, utilizzando il fatto che se A è chiuso e simmetrico vale

$$\|(A + \alpha I)\phi\|^2 = \|(A - \Re \alpha I)\phi\|^2 + (\Im \alpha)^2 \|\phi\|^2$$

♣

Vale il seguente Teorema

Teorema 5.2

Sia A chiuso e simmetrico densamente definito. Allora la dimensione di $\ker(A^* + \lambda I)$ è costante (come funzione di λ) sia nel semipiano superiore aperto che in quello inferiore dal piano complesso (le dimensioni possono essere diverse nei due semipiani).

◇

Cenno alla dimostrazione

La parte cruciale nella dimostrazione consiste nel dimostrare che se $|\Im \eta| < \gamma |\Im \lambda|$ con γ sufficientemente piccolo, allora

$$\ker(\lambda + \eta - A^*) \cap \ker(\lambda - A^*)^\perp = \{0\}. \quad 5.10$$

Infatti da (5.10) segue subito che i due spazi hanno la stessa dimensione, eventualmente infinita. La dimostrazione del teorema segue allora per iterazione, ricoprendo i due semipiani con aperti che non intersecano l'asse reale.

Per dimostrare (5.10) notiamo che essa, sotto le ipotesi fatte su λ e γ , è equivalente a

$$(\text{Ran}(\lambda - A))^- \cap (\text{Ran}(\lambda + \eta - A))^\perp = \{0\}. \quad 5.11$$

Sia $\phi \in \text{Ran}(\lambda - A)^-$. Allora esiste una successione u_n tale che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = \phi, \quad u_n = (\lambda - A)\xi_n \quad \|\xi_n\| > c\|\phi\| \quad 5.12$$

e basta dimostrare che

$$\text{Ran}(\lambda - A) \cap (\text{Ran}(\lambda + \eta - A))^\perp = \{0\}.$$

Se $u = (\lambda - A)\zeta$ deve essere allora

$$((\lambda - A)\zeta, (\lambda + \eta - A)\psi) = 0 \quad \forall \psi \in D(A);$$

scegliendo $\psi = \zeta$ si ha

$$\|(\lambda - A)\zeta\|^2 + \eta((\lambda - A)\zeta, \zeta) = 0.$$

Questo è impossibile per $|\eta| = \gamma|\Im \lambda|$ con γ sufficientemente piccolo poiché

$$\|(\lambda - A)\zeta\| > c\|\zeta\|.$$

♡

Nota 5.3

Se per ogni $\phi \in D(A)$ si ha

$$(A\phi, \phi) \geq M\|\phi\|^2$$

(cioè se A è limitato dal basso) si possono ripetere in ogni intorno sul piano complesso di $\{\lambda : \Im \lambda = 0, \Re \lambda < M\}$ le considerazioni per fatte nel corso della dimostrazione del Teorema 5.2, utilizzando ora il fatto che, se $\lambda < M$ si ha

$$\|(A - \lambda)\phi\| \geq (M - \lambda)\|\phi\|.$$

♣

Se ne deduce

Lemma 5.3

Sia A chiuso, simmetrico e il suo spettro sia limitato dal basso da M . Allora la dimensione di $\ker(\lambda - A^*)$ è costante come funzione di λ nel complemento della semiretta $\Im \lambda = 0, \Re \lambda \geq M$, dove

$$M \equiv \inf_{\|\phi\|=1} (\phi, A\phi).$$

◇

Lemma 5.4

Se A è chiuso, simmetrico e densamente definito, e $\text{Ran}(\lambda - A) = H$ per almeno un valore reale di λ , allora A è autoaggiunto.

◇

Conviene infine notare che valgono le seguenti *identità di risolvente*.

Se A è simmetrico e λ_1 e λ_2 sono nell'insieme risolvente di A si ha

$$\frac{1}{A - \lambda_1 I} = \frac{1}{A - \lambda_2 I} + \frac{1}{A - \lambda_1 I}(\lambda_2 - \lambda_1)\frac{1}{A - \lambda_2 I}.$$

Questa identità si verifica facilmente notando che essa è una relazione tra operatori chiusi e limitati, ed è certamente vera quando questi operatori siano applicati all'insieme denso costituito dai vettori della forma $(A - \lambda_1 I)(A - \lambda_2 I)\psi$. Due altre caratterizzazioni degli operatori autoaggiunti sono importanti e verranno frequentemente utilizzate nel seguito.

a) *Teorema 5.5* (spettrale)

Un operatore A su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} è autoaggiunto se e solo se esiste uno spazio di misura X , con misura μ , una funzione misurabile reale $a(m)$ su X ed un operatore unitario (isometrico invertibile con inverso isometrico) U da $L^2(X, \mu)$ a \mathcal{H} tali che

$$AU = Ua.$$

dove abbiamo indicato con a l'operatore di moltiplicazione per la funzione $a(m)$. Inoltre se A è un operatore limitato si ha $\|A\| = \|a\|_\infty$. ◇

b) *Teorema 5.6* (Stone)

L'operatore A è autoaggiunto se e solo se è il generatore di un gruppo $U(t)$ ad un parametro di operatori unitari fortemente continuo in t (o equivalentemente debolmente continuo) ◇

Nota 5.4

Dal teorema di Stone si vede che in Meccanica Quantistica l'autoaggiuntezza gioca lo stesso ruolo che è giocato in Meccanica Classica dalla completezza di un campo vettoriale. ♣

Iniziamo con la dimostrazione del teorema spettrale. Nel corso della dimostrazione utilizzeremo i seguenti teoremi¹

i) *Teorema di Riesz-Fischer*

$L^2(M, \mu)$ è uno spazio di Hilbert.

ii) *Teorema di Riesz*

Sia I un intervallo dell'asse reale, e $C(I)$ la classe delle funzioni continue reali su I . Se $\tilde{\mu}$ è un funzionale lineare continuo su $C(I)$ allora esiste una misura di Borel su I tale che

$$\tilde{\mu}(f) = \int_I f(m) d\mu(m), \quad f \in C(I)$$

¹Rimandiamo per la dimostrazione di questi teoremi a testi di Analisi Funzionale.

(si noti che ogni funzione continua è misurabile per ogni misura di Borel). \diamond

Utilizzando i teoremi di Riesz-Fischer e di Riesz dimostriamo il teorema spettrale.

Dimostrazione del teorema spettrale

Notiamo innanzitutto che dati due spazi di Hilbert \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 e due operatori A_1 su \mathcal{H}_1 e A_2 su \mathcal{H}_2 e un operatore unitario $U : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, se A_1 è autoaggiunto anche $A_2 \equiv UA_1U^*$ è autoaggiunto. Inoltre

$$D(UAU^*) = UD(A), \quad (UAU^*)^* = UA^*U^*.$$

La parte descritta dall'implicazione “*se*” del teorema si dimostra allora facilmente notando che sullo spazio $L^2(X, \mu)$ è autoaggiunto l'operatore di moltiplicazione per una funzione misurabile reale $a(m)$. Infatti, sia A l'operatore

$$(Af)(m) = a(m)f(m)$$

definito su dominio

$$D(A) = \{\phi \in L^2(X, \mu), \quad a(m)\phi(m) \in L^2(X, \mu)\}$$

si vede facilmente che $A^* = A$ e che gli operatori $(A \pm iI)^{-1}$ sono uniformemente limitati e il loro codominio coincide con $L^2(X, \mu)$. Si vede anche che A è chiuso e densamente definito. Infatti, sia P_K l'insieme su cui $|a(m)| \leq K$ allora P_K tende ad avere misura piena quando $K \rightarrow \infty$ (poiché $a(m)$ è misurabile) e d'altra parte le funzioni con supporto in P_K sono nel dominio dell'operatore A . Quindi l'operatore A soddisfa i requisiti per essere autoaggiunto.

Verifichiamo ora la parte descritta dall'implicazione “*solo se*” del teorema nel caso di A limitato ed autoaggiunto.

Per ipotesi l'operatore A è limitato; indichiamo con $\|A\|$ la sua norma e poniamo

$$I \equiv [-\|A\|, \|A\|].$$

Notiamo anche che se P è un polinomio di grado N si ha

$$\|P(A)\| \leq \sup_{\lambda \in I} |P(\lambda)|; \tag{5.13}$$

infatti se $P(x) = \sum_1^N c_n x^n$ si ha

$$P(A) = \sum_1^N c_n A^n.$$

Per dimostrare la (5.13) si noti che per $\phi \in \mathcal{H}$ indicando con E il proiettore ortogonale sul sottospazio (di dimensione al più $N+1$) generato da $\{\phi, A\phi, \dots, A^N\phi\}$ si ha, per costruzione

$$P(EAE)\phi = P(A)\phi. \quad 5.14$$

Ma EAE è una matrice di rango finito, e dunque

$$\|P(EAE)\| \leq \sup_{\lambda \in I} |P(\lambda)|, \quad 5.15$$

da cui discende (5.13). Da (5.13) si vede anche che $\|A\| \rightarrow \|P(A)\|$ è una funzione continua f sull'intervallo I .

Per il lemma di Weierstrass ogni funzione continua su I è approssimabile uniformemente mediante polinomi. Indichiamo con $P_n(x)$ una successione di polinomi che approssimano uniformemente la funzione $f(x)$ in I .

Per (5.13) la successione $P_n(A)$ converge in norma e poiché $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ è chiuso per convergenza in norma, esiste un operatore $f(A) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ tale che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_n(A) = f(A). \quad 5.16$$

poiché la convergenza è uniforme, se

$$f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} P_n(x), \quad g(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(x), \quad 5.17$$

si ha

$$f(A)g(A) = (fg)(A) = (gf)(A), \quad 5.18$$

quindi le funzioni continue da I a $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ definite da (5.15) formano un'algebra normata commutativa. Ne segue che l'applicazione

$$C(I) \ni f \rightarrow f(A) \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \quad 5.19$$

è un omeomorfismo di algebre commutative; essa inoltre preserva la naturale operazione di coniugio

$$f(A)^* = \bar{f}(A)$$

in quanto questa identità è vera banalmente per polinomi.

Vogliamo dimostrare che questo omeomorfismo è realizzato da una corrispondenza unitaria tra \mathcal{H} e lo spazio di Hilbert $L^2(I, \mu)$ per un'opportuna scelta della misura μ .

Sia ϕ un arbitrario elemento di \mathcal{H} , $\|\phi\| = 1$. Per ogni funzione continua positiva f su I definiamo

$$\mu_\phi^A(f) \equiv (\phi, f(A)\phi). \quad 5.20$$

poiché f è positiva, esiste una funzione continua reale g tale che $f(x) = g^2(x)$. Pertanto

$$(\phi, f(A)\phi) = \|g(A)\phi\|^2 \geq 0 \quad 5.21$$

Per il teorema di Riesz, esiste allora una misura di Borel su I tale che

$$(\phi, f(A)\phi) = \int_I f(\lambda) d\mu_\phi. \quad 5.22$$

Sia \mathcal{H}_ϕ il sottospazio generato da $\phi, A\phi, A^2\phi, \dots$. Per costruzione, \mathcal{H}_ϕ è lasciato invariante dall'azione di A e di ogni potenza di A , e poiché A è autoaggiunto e quindi coincide con A^* , si ha

$$(A\psi, \zeta) = 0 \quad \psi \in \mathcal{H}_\phi, \quad \zeta \in \mathcal{H}_\phi^\perp$$

così che l'operatore A è ridotto dallo spazio \mathcal{H}_ϕ .

Vogliamo dimostrare che esiste un'isometria invertibile V_ϕ

$$\mathcal{H}_\phi \xrightarrow{V_\phi} L^2(I, \mu_\phi) \quad 5.23$$

tale che

$$V_\phi\phi = \iota, \quad V_\phi A_R V_\phi^{-1} = \lambda I. \quad 5.24$$

Abbiamo indicato con A_R la restrizione di A al sottospazio invariante \mathcal{H}_ϕ e con ι la funzione costante su I normalizzata in modo tale che risulti $\mu_\phi(\iota) = 1$. Notiamo anzitutto che se $f(A)\phi = 0$ si ha

$$0 = \|f(A)\phi\|^2 = \int |f(\lambda)|^2 d\mu_\phi(\lambda) \quad 5.25$$

e pertanto $f(A)\phi$ rappresenta l'elemento nullo di \mathcal{H}_ϕ . Ne segue che V_ϕ è definita da un insieme denso di \mathcal{H}_ϕ ad un insieme denso di $L^2(I, \mu_\phi)$. Inoltre si ha

$$(g(A)\phi, f(A)\phi) = \int_I \bar{g}(\lambda) f(\lambda) d\mu_\phi \quad 5.26$$

per ogni coppia di funzioni continue g, f . Pertanto V_ϕ è un'isometria e si estende ad un operatore unitario da \mathcal{H}_ϕ a $L^2(I, \mu_\phi)$.

Se $\mathcal{H}_\phi = \mathcal{H}$ (cioè se ϕ è ciclico per le funzioni continue di A), abbiamo dimostrato l'asserto, e la funzione a è la coordinata in I .

Se \mathcal{H}_ϕ è un sottospazio proprio di \mathcal{H} , scegliamo un secondo elemento $\psi \in \mathcal{H}_\phi^\perp$ e consideriamo la riduzione di A al sottospazio \mathcal{H}_ψ generato per azione dei polinomi in A su ψ . Notare che per costruzione \mathcal{H}_ψ è perpendicolare a \mathcal{H}_ϕ .

Procedendo come prima, otteniamo un'isometria invertibile tra \mathcal{H}_ψ e $L^2(I, \mu_\psi)$ dove μ_ψ è definito da

$$\mu_\psi(f) = (\psi, f(A)\psi), \quad f \in C(I). \quad 5.27$$

Se $\mathcal{H}_\phi \oplus \mathcal{H}_\psi = \mathcal{H}$ abbiamo trovato un'isometria invertibile V tra \mathcal{H} e $L^2(I, \mu_\phi) \oplus L^2(I, \mu_\psi)$ tale che

$$VAV^{-1} = \lambda. \quad 5.28$$

dove il simbolo $\lambda \cdot$ sta ad indicare la moltiplicazione per la coordinata λ . Introducendo in I una misura μ tale che per ogni Boreliano B risulti

$$\int_B d\mu = \int_B d\mu_\phi + \int_B d\mu_\psi,$$

possiamo riscrivere la isometria trovata come isometria tra \mathcal{H} ed $L^2(I, \mu)$.

Se $\mathcal{H}_\phi \oplus \mathcal{H}_\psi \neq \mathcal{H}$, possiamo ripetere l'operazione con un terzo elemento di \mathcal{H} che sia perpendicolare a $\mathcal{H}_\phi \oplus \mathcal{H}_\psi$. Procedendo per induzione (numerabile se \mathcal{H} è separabile, altrimenti bisogna far uso del Lemma di Zorn) otteniamo un'isometria invertibile U tra \mathcal{H} e $L^2(I, \mu)$ per un opportuna misura $\mu(\lambda)$. Questa isometria soddisfa per costruzione

$$UAU^{-1} = \lambda. \quad 5.29$$

Ciò conclude la dimostrazione del teorema spettrale nel caso in cui A sia un operatore autoaggiunto limitato.

♡

Il teorema spettrale permette di estendere agli operatori chiusi e limitati il calcolo funzionale per funzioni continue. Notare che ogni operatore chiuso e limitato su di uno spazio di Hilbert \mathcal{H} può essere espresso come somma sul campo complesso di operatori limitati e autoaggiunti, e che il calcolo funzionale per funzioni reali continue si estende in modo naturale a funzioni continue a valori complessi.

Vale la pena notare che mentre il calcolo funzionale è *intrinseco*, la rappresentazione mediante spazi di misura *dipende dalla scelta* fatta per i vettori ϕ, ψ, \dots utilizzati nella costruzione. Si può dimostrare che le misure su I che vengono costruite seguendo scelte diverse sono tutte equivalenti (nel senso delle misure) e quindi *il calcolo funzionale può essere esteso alle funzioni di classe L^∞ in modo intrinseco*.

È possibile anche dimostrare che la topologia L^∞ che viene così introdotta corrisponde alla topologia debole degli operatori limitati su \mathcal{H} . In particolare i proiettori in \mathcal{H} sono immagini secondo W di funzioni indicatrici di boreliani di I ed appartengono alla chiusura debole di $C(A)$

L'estensione a L^∞ si può ottenere nel modo seguente.

Sia $\{\phi_\alpha, \alpha = 1, \dots, n \dots\}$ una collezione di vettori ortogonali in \mathcal{H} tali che

$$\bigoplus_\alpha \mathcal{H}_\alpha = \mathcal{H}, \quad \mathcal{H}_\alpha \equiv \mathcal{H}_{\phi_\alpha} \quad 5.30$$

e che l'operatore A venga ridotto dagli \mathcal{H}_α . Sia f una funzione limitata μ_α misurabile e definiamo su \mathcal{H}_α un operatore

$$\hat{f}_\alpha \equiv V_\alpha^{-1} f V_\alpha \quad 5.31$$

e poniamo poi

$$f(A) \equiv \oplus_{\alpha} \hat{f}_{\alpha}. \quad 5.32$$

La definizione è ben posta e induce una corrispondenza tra funzioni reali essenzialmente limitate su X e operatori limitati autoaggiunti su \mathcal{H} . Ricordando che $L^{\infty}(X)$ appartiene al duale di tutte le misure di Borel, la corrispondenza L^{∞} e $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ non dipende dalla scelta delle funzioni ϕ_{α} . Se $\xi(B)$ è la funzione caratteristica di un boreliano B di X , l'operatore

$$E_B \equiv U \xi_B U_{-1} \quad 5.33$$

è un proiettore. Si verifica facilmente che se $B_1 \subset B_2$ allora $E_1 \leq E_2$ e che $E(I) = I$.

Definizione 5.5

Alla famiglia di proiettori in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ che viene associata dall'operatore A ai boreliani di $[-\|A\|, +\|A\|]$ viene dato il nome di *schiera spettrale* di A .

Viene spesso utilizzata la notazione

$$E_{\lambda} \equiv E(-\infty, \lambda] \quad 5.34$$

e

$$f(A) = \int f(\lambda) d\mu(\lambda) \quad 5.35$$

che equivale a $(\phi, f(A)\phi) = \int_I f(\lambda) d\mu_{\phi}(\lambda)$.

◇

Nota 5.5

Si può ripetere questa costruzione e definire la schiera spettrale anche per operatori *normali* limitati che sono per definizione operatori chiusi e limitati tali che

$$A A^* = A^* A. \quad 5.36$$

In particolare sono normali gli operatori unitari. Il caso degli operatori normali si può riportare al caso di operatori autoaggiunti e commutanti tra loro mediante la posizione

$$C \equiv \frac{1}{2}(A + A^*), \quad B \equiv \frac{i}{2}(A - A^*) \quad D(C) = D(B) = D(A^*). \quad 5.37$$

♣

Nel caso di N operatori A_1, A_2, \dots, A_N autoaggiunti limitati e tra loro commutanti il calcolo funzionale per funzioni continue si costruisce in modo totalmente analogo a quanto fatto nel caso di un solo operatore.

Utilizziamo il Lemma di Weierstrass di approssimazione di funzioni continue in N variabili mediante polinomi. In questo caso il compatto è

$$[-\|A_1\|, \|A_1\|] \times [-\|A_2\|, \|A_2\|] \times \dots \times [-\|A_N\|, \|A_N\|].$$

Il calcolo funzionale si costruisce anche in questo caso considerando un generico elemento $\phi \in \mathcal{H}$ e ponendo $\mathcal{H}_\phi = \cup_P P(A_1, \dots, A_n)\phi$.

Poiché gli A_k commutano tra loro segue che \mathcal{H}_ϕ riduce tutti gli A_k , e procedendo anche qui per induzione si costruisce una misura μ su R^N tale che per ogni funzione continua f si abbia

$$\int f(m_1, \dots, m_N) d\mu_\phi = (\phi, f(A_1, \dots, A_N)\phi).$$

Per continuità si definisce $g(A_1, \dots, A_N)$ per ogni funzione di classe L^∞ su R^N . Passando poi a funzioni caratteristiche di insiemi di Borel in R^N si possono definire i proiettori spettrali e le schiere spettrali corrispondenti. Utilizzando la notazione

$$E_{\lambda_1, \dots, \lambda_N} \equiv E((-\infty, \lambda_1] \times \dots \times (-\infty, \lambda_N]),$$

si può scrivere la decomposizione spettrale

$$f(A_1, \dots, A_N) = \int f(\lambda_1, \dots, \lambda_N) dE_\lambda \quad \lambda \equiv \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$$

intendendo con questa notazione che per ogni $\psi \in \mathcal{H}$

$$(\psi, f(A_1, \dots, A_N)\psi) = \int f(\lambda_1, \dots, \lambda_N) d\mu_\psi.$$

Si può dimostrare anche qui che la schiera spettrale non dipende dai vettori utilizzati nella sua costruzione.

Va rilevato anche che le espressioni precedenti non sono limitate al caso in cui gli operatori A_k siano funzionalmente indipendenti (nel senso del calcolo funzionale descritto sopra). Se ad esempio $N = 2$ e si ha $A_2 = g(A_1)$, allora vale la formula

$$f(A_1, A_2) = \int f(\lambda_1, \lambda_2) dE_\lambda, \quad 5.38$$

ma per ogni $\psi \in \mathcal{H}$ la misura $(\psi, E_\lambda \psi)$ è portata in R^2 dall'insieme definito dalla relazione

$$\lambda_2 = g(\lambda_1). \quad 5.39$$

Estendiamo ora il teorema spettrale ad operatori autoaggiunti non limitati.

Per $\phi \in D(A)$ si ha

$$((iI - A)\phi, (iI - A)\phi) \geq \|\phi\|^2 \quad 5.40$$

e ne consegue che $(iI - A)$ è iniettivo. poiché per ipotesi A è chiuso, anche $\text{Ran}(iI - A)$ è chiuso. Inoltre $\text{Ran}(iI - A)$ è denso in \mathcal{H} per l'ipotesi fatta che A sia autoaggiunto. Dunque

$$\text{Ran}(iI - A) = \mathcal{H} \quad \Rightarrow \quad (iI - A)^{-1} \in B(\mathcal{H}).$$

In modo analogo si dimostra che $(iI + A^*)^{-1} \in B(\mathcal{H})$, e che

$$(iI - A)^{-1}(iI + A^*)^{-1} = (iI + A^*)^{-1}(iI - A)^{-1}. \quad 5.41$$

Dunque $(iI - A)^{-1}$ è limitato e normale, e quindi esiste un'isometria invertibile V da $L^2(M, \mu)$ a \mathcal{H} tale che

$$V^{-1}(iI - A)^{-1}V = c(m)$$

con $c(m)$ limitata e misurabile (rispetto a μ). Allo stesso modo risulta che $V^{-1}(iI + A)^{-1}V = -\bar{c}(m)$.

Ricordando la definizione di operatore di Cayley (l'espressione (5.9)), ne segue che definendo

$$u(m) \equiv -\frac{\bar{c}(m)}{c(m)}, \quad a(m) \equiv i\frac{u(m) - 1}{u(m) + 1}$$

si ha

$$A = Va(m)V^{-1}, \quad D(A) = \left\{ \int |a(m)f(m)|^2 d\mu(m) < \infty, \quad V\phi = f(m) \right\}. \quad 5.42$$

Almeno nel caso separabile, la misura μ può essere vista come misura su R^K con $K \leq +\infty$. Il minimo valore di K nell'intervallo I è detto *molteplicità spettrale* dell'operatore nell'intervallo I .

Se si può scegliere $K = 1$, si dice che l'operatore ha spettro semplice (di molteplicità uno).

Nota 5.6

Anche nel caso in cui A sia chiuso ma non sia autoaggiunto, l'operatore di Cayley U_A è un isometria parziale dal $\ker(A^* + iI)$ a $\ker(A^* - iI)^\perp$. Ne segue che A è illimitato se e solo se il numero -1 appartiene allo spettro di U_A .

Vedremo nel cap. 9 il ruolo dell'operatore di Cayley nella costruzione di eventuali estensioni autoaggiunte di A .



Dimostriamo ora il Teorema di Stone, del quale richiamiamo l'enunciato: *l'operatore A è autoaggiunto se e solo se esso è il generatore di un gruppo $U(t)$, $t \in R$ di operatori unitari, fortemente continuo in t .* La dimostrazione segue da vicino quella del teorema di Hille e Yoshida che daremo nel cap. 6, con alcune varianti dovute al fatto che qui trattiamo gruppi unitari.

Nota 5.7

Per gruppi di operatori unitari le proprietà di continuità debole e di continuità forte coincidono; infatti

$$\|(U(t) - U(s))\phi\|^2 = 2 - \Re \langle \phi, U(t-s)\phi \rangle \quad 5.43$$

♣

Dimostrazione del teorema di Stone

La condizione è palesemente sufficiente. Infatti, per il teorema spettrale, si ha

$$V e^{itH} V^{-1} = e^{itf(m)} \quad \text{su} \quad \frac{1}{2} L^2(R, d\mu). \quad 5.44$$

Ma allora

$$\langle \phi, [e^{itH} - I]\phi \rangle = \int (e^{itf(m)} - 1) d\mu_\phi \quad \mu_\phi(R) = 1,$$

e per il teorema della convergenza dominata si ha

$$\lim_{t \rightarrow 0} \int (e^{itf(m)} - 1) d\mu_\phi = 0. \quad 5.45$$

Dimostriamo ora che la condizione è necessaria.

Definiamo

$$B\phi \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{U(t) - I}{t} \phi \quad 5.46$$

per ogni ϕ per il quale il limite esista. Indichiamo con $D(B)$ la collezione di tali vettori.

Dobbiamo dimostrare che $B^* = -B$. Porremo poi $B = iH$. Definiamo

$$R_\lambda \phi = \int_0^\infty e^{-t\lambda} U(t) \phi dt, \quad \phi \in D(B), \quad \Re \lambda > 0; \quad 5.47$$

l'integrale esiste (nel senso di Bochner) perché la funzione $U(t)$ è continua. Si verifica facilmente che R_λ è un operatore chiuso e

$$R_\lambda \in \mathcal{B}(\mathcal{H}), \quad \|R_\lambda\| \leq (\Re \lambda)^{-1}.$$

Si ha

$$\frac{U(h) - I}{h} R_\lambda \phi = \int_0^\infty \frac{e^{-\lambda(t-h)} - e^{-\lambda t}}{h} U(t) \phi dt \quad 5.48$$

e pertanto, facendo tendere h a zero

$$\lambda \int_0^\infty e^{-\lambda t} U(t) \phi dt - \phi = \lambda R_\lambda \phi - \phi.$$

Per continuità

$$\text{Ran } R_\lambda \in D(B), \quad (\lambda I - B)R_\lambda = I. \quad 5.49$$

Si ha $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda R_\lambda = I$ e pertanto B è densamente definito. Se $\phi \in D(B)$ allora $U(t)\phi \in D(B)$ e $BU(t) = U(t)B$ su $D(B)$. Ne segue che $U(t)\phi$ è differenziabile per ogni $\phi \in D(B)$.

Ma allora (è a questo punto che utilizziamo il fatto che gli operatori U sono unitari) si ha

$$0 = \frac{d}{dt}(U(t)\phi, U(t)\phi) = (B\phi, \phi) + (\phi, B\phi) \quad 5.50$$

da cui segue

$$B \subset -B^*.$$

Se d'altra parte $\phi \in B$, si ha

$$R_\lambda B\phi = \int_0^\infty e^{-t\lambda} U(t)B\phi dt = \int_0^\infty e^{-t\lambda} \frac{d}{dt} U(t)\phi dt.$$

Integrando per parti,

$$R_\lambda B\phi = \int_0^\infty \lambda e^{-t\lambda} U(t)\phi dt + e^{-t\lambda} U(t)\phi \Big|_0^\infty \quad 5.51$$

e dunque

$$R_\lambda(\lambda I - B)\phi = \phi, \quad \forall \phi \in D(B), \quad \Re \lambda > 0. \quad 5.52$$

Quindi, combinando (5.49) e (5.52) si ha

$$R_\lambda = (\lambda I - B)^{-1} \quad \text{se } \Re \lambda > 0. \quad 5.53$$

Sostituendo nell'analisi precedente t con $-t$ (anche questo è caratteristico del gruppo),

$$R_\lambda^* = (\bar{\lambda}I + B)^{-1}. \quad 5.54$$

Da (5.53) si ottiene

$$(\bar{\lambda}I - B^*)^{-1} = (\bar{\lambda}I + B)^{-1}$$

e dunque

$$D(B) = D(B^*), \quad -B^* = B.$$

Ciò termina la dimostrazione del teorema di Stone.

♡

Data l'importanza della proprietà di autoaggiuntezza, risulta importante dare criteri sufficienti affinché un operatore ne goda. Ne vedremo alcuni nel cap. 10, legati soprattutto alla teoria delle perturbazioni di operatori autoaggiunti, e in particolare del laplaciano.

A conclusione di questo capitolo, diamo alcuni risultati relativi allo studio della convergenza di una successione di operatori.

Definizione 5.6

Una successione di operatori A_n su un spazio di Hilbert H si dice *convergere fortemente in risolvente* ad un operatore A (in notazione $(A_n \rightarrow_{s.r.} A)$) se per ogni

$$z \notin (\cup_n \sigma(A_n)) \cup \sigma(A)$$

si ha

$$(A_n - z)^{-1} \rightarrow (A - z)^{-1} \quad 5.55$$

dove la convergenza è intesa nel senso della topologia forte degli operatori.

◇

Un criterio *sufficiente* per avere convergenza forte in risolvente è dato dalla seguente proposizione.

Proposizione 5.7

Se esiste un insieme $E \subset D(A_n)$ denso in $D(A)$, tale che per ogni $f \in E$ la successione $A_n f$ converge uniformemente ad Af , allora la successione converge fortemente in risolvente.

◇

Dimostrazione

Se $f \in E$ poniamo $h \equiv (A - z)f$. Allora

$$(A - z)^{-1}h - (A_n - z)^{-1}h = (A_n - z)^{-1}(A_n - A)f \quad 5.56$$

e si ha

$$[(A_n - z)^{-1} - (A - z)^{-1}]h \rightarrow 0$$

per un insieme denso, poiché $(A_n - A)f \rightarrow 0$ e $(A_n - z)^{-1}$ è limitato. Ma gli operatori $(A - z)^{-1}$ e $(A_n - z)^{-1}$ sono equilimitati. Dunque

$$\|[(A_n - z)^{-1} - (A - z)^{-1}]\phi\| \rightarrow 0 \quad \forall \phi \in \mathcal{H}.$$

♡

Notiamo che, se gli operatori A_n ed A sono limitati dal basso, il risultato rimane valido sotto ipotesi più deboli: l'insieme E deve adesso solo essere denso nel dominio della forma quadratica associata all'operatore A . Questo è il contenuto del Teorema 5.9 che ha un interesse indipendente. Prima di enunciare questo teorema, dimostriamo

Proposizione 5.8

Se una successione di operatori chiusi e limitati A_n soddisfa $A \geq A_n \forall n$ con A chiuso e limitato dal basso, allora

$$(A_n - A) \rightarrow_{s.r.} 0 \quad \Leftrightarrow \quad (A_n - A) \rightarrow_w 0. \quad 5.57$$

◇

Ricordiamo che una successione $\{B_n\}$ di operatori limitati converge debolmente ad un operatore B (convergenza che indichiamo con $B_n \rightarrow_w B$) se, per ogni $\phi \in \mathcal{H}$, si ha $(\phi, B_n \phi) \rightarrow (\phi, B \phi)$.

Dimostrazione

$$\|(A_n - A)\phi\| \leq \|(A - A_n)^{1/2}\| \|(A - A_n)^{1/2}\phi\| \quad \forall \phi \in \mathcal{H}.$$

Per gli operatori chiusi e limitati vale il calcolo funzionale, quindi si può estrarre la radice quadrata di un operatore positivo. Ma

$$\|(A - A_n)^{1/2}\phi\|^2 = (\phi, (A - A_n)\phi).$$

La dimostrazione si estende facilmente al caso in cui gli operatori A_n siano illimitati e la convergenza vale su un sottoinsieme comune dei domini che sia denso nello spazio di Hilbert.

♡

Teorema 5.9

Siano A_n, A operatori chiusi, con $A_n \geq A$ ed A sia limitato dal basso. Indichiamo con $Q(A)$ l'insieme dei vettori $\phi \in \mathcal{H}$ tali che $(\phi, |A|\phi) < \infty$. Se esiste un insieme E denso in \mathcal{H} tale che $E \subset Q(A_n) \forall n$, allora la relazione

$$(f, A_n f) \rightarrow (f, A f) \quad \forall f \in E$$

implica

$$A_n \rightarrow_{s.r.} A.$$

◇

Dimostrazione

Per ipotesi $A_n^{-1}f$ è limitato in $Q(A)$. Dunque A_n^{-1} converge debolmente ad A^{-1} . Dalla proposizione precedente segue allora che A_n^{-1} converge fortemente ad A^{-1} .

♡

Una interessante applicazione del teorema precedente è:

Teorema 5.10

Poniamo

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^N), \quad H_0 = -\Delta, \quad U(x) \geq 0, \quad W(x) < 0.$$

Sia $\mathcal{K} \equiv Q(H_0) \cap Q(U)$ (denso in \mathcal{H}) e per $\phi \in \mathcal{K}$ sia

$$-((\phi, W\phi) \leq a(\phi, (H_0 + U)\phi) + b(\phi, \phi)$$

con $a < 1$. Indichiamo con $U_N(x) = \max\{U(x), N\}$, $-W_R = \max\{-W(x), -R\}$ le funzioni U, W troncate ai valori N e $-R$ rispettivamente. Allora

- 1) $H = H_0 + U + W$ è essenzialmente autoaggiunto, limitato inferiormente e per tutti i vettori ϕ per i quali l'espressione è definita si ha

$$(\phi, H\phi) = (\phi, H_0\phi) + (\phi, U\phi) + (\phi, W\phi).$$

- 2) $\lim_{N \rightarrow \infty}^{s.r.} \lim_{R \rightarrow \infty}^{s.r.} H_{N,R} = H, \quad H_{N,R} = H_0 + U_N + W_R.$

◇

Dimostrazione

Sia $H_N = H_0 + U_N + W$. Notare che $H_{N,R} < H_N \quad \forall R$ e che $H > H_N \quad \forall N$. Inoltre si ha

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (\phi, H_N\phi) = (\phi, H\phi), \quad \phi \in Q(H_0) \cap Q(U),$$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} (\psi, (H_N + W_R)\psi) = (\psi, H_N\psi) \quad \psi \in Q(H_0).$$

Possiamo allora applicare ripetutamente il teorema 5.9 prima alla successione $H_0 + U_N + W_R, \quad R \rightarrow \infty$ e poi alla successione $H_N, \quad N \rightarrow \infty$.

♡

APPENDICE 5A: RICHIAMI DI TEORIA DEGLI OPERATORI

Diamo in quest'appendice alcuni brevi richiami alla teoria degli operatori su un spazio di Hilbert \mathcal{H} .

Definizione 5A.1 – Grafico

Se A è un operatore con dominio $D(A) \subset \mathcal{H}$ il *grafico* di A è l'insieme ordinato di coppie $\{\phi, A\phi\}$. Esso verrà indicato con il simbolo $\Gamma(A)$.

◇

Un operatore è *chiuso* se $\Gamma(A)$ è chiuso come sottoinsieme di $\mathcal{H} \oplus D(A)$. Un operatore è *chiudibile* se ammette un'estensione chiusa.

Teorema 5A.1

Se A è definito su tutto \mathcal{H} allora A è chiuso se e solo se è limitato.

◇

Non diamo qui la dimostrazione di questo importante teorema. Diamo invece un utile corollario, e la sua dimostrazione.

Corollario

Se A è simmetrico e $D(A) = \mathcal{H}$, allora A è limitato.

◇

Dimostrazione

Dimostriamo che se A è simmetrico, è anche chiuso.

Supponiamo che $\{x_n, Ax_n\}$ converga a $\{x, y\}$. Dobbiamo dimostrare che $x \in D(A)$, $Ax = y$. La prima affermazione segue dal fatto che il dominio di A è tutto \mathcal{H} .

Sia allora $z \in \mathcal{H}$. Si ha, utilizzando la simmetria

$$(z, y) = \lim_{n \rightarrow \infty} (z, Ax_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} (Az, x_n) = (Az, x) = (z, Ax)$$

ed essendo z generico, segue $y = Ax$.

♡

Diamo un esempio di un operatore non chiudibile.

Sia $\{\phi_n\}$ una base ortonormale completa in $D(A)$, $f \in \mathcal{H}$, $f \neq 0$ e assumiamo che f non sia una combinazione lineare *finita* delle ϕ_k . Sia D l'insieme composto da f e dalle combinazioni lineari finite delle ϕ_k e poniamo $D(A) = D$ con la seguente azione

$$A\left(af + \sum_1^N d_k \phi_k\right) = af. \quad 5A.1$$

Si ha, per costruzione, $\{f, f\} \in \Gamma(A)$. Inoltre

$$A\left(\sum_1^N d_k \phi_k\right) = 0, \quad \forall \{d_k\}, \quad \forall N.$$

Per la completezza delle ϕ_k , esistono $\{\delta_k\}$, $\sum_k |\delta_k|^2 < \infty$ tali che

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} \delta_k \phi_k.$$

Dunque $\{f, 0\} \in \Gamma(A)$. Ma allora $\Gamma(A)$ non è il grafico di una funzione, poiché associa ad un elemento di \mathcal{H} due elementi di \mathcal{H} , cioè 0 e f .

♡

Definizione 5A.2 – aggiunto

Si dice *aggiunto* A^* di A l'operatore che ha come dominio la collezione degli elementi $\phi \in \mathcal{H}$ tali che $(\phi, A\psi)$ sia continuo in ψ nella topologia di \mathcal{H} .

Notare che per il teorema di rappresentazione di Riesz da questo segue che esiste ξ_ϕ tale che $(\psi, A\phi) = (\xi_\phi, \phi)$. Tale ξ_ϕ è definito in modo unico se $D(A)$ è denso in \mathcal{H} . Altrimenti è unico come elemento del sottospazio $\bar{D}(A)$. Su questo dominio A^* agisce come segue

$$(\psi, A\phi) = (A^*\psi, \phi) \quad \forall \phi \in D(A). \quad 5A.2$$

◇

Lemma 5A.2

Si ha

- (i) A^* è chiuso
 (ii) A è *chiudibile* se $D(A^*)$ è denso in \mathcal{H} . In questo caso si ha

$$\bar{A} = (A^*)^* \equiv A^{**}.$$

- (iii) Se A è chiudibile, allora $(\bar{A})^* = A^*$.

◇

La verifica di questo Lemma è lasciata come esercizio.

Corollario

Segue da (ii) che se A è simmetrico, allora esso è chiudibile. Infatti, se A è simmetrico, si ha $D(A) \subset D(A^*)$ dunque se $D(A)$ è denso, lo è anche $D(A^*)$.

◇

D'ora in poi ci occuperemo quasi esclusivamente di operatori chiusi e simmetrici. A questa classe appartengono gli operatori di Schrödinger che analizzeremo; questo è dovuto al fatto che il Laplaciano appartiene a questa classe e l'aggiunta di un potenziale abbastanza regolare non altera questa proprietà.

Definizione 5A.3

Si definisce insieme *risolvente* $\rho(A)$ l'insieme dei numeri complessi λ per i quali l'operatore $(\lambda I - A)^{-1}$ esiste ed è limitato.

◇

Nota 5A.1

Conviene notare che l'insieme risolvente è un insieme *aperto*. Infatti, se $\lambda_0 \in \rho(A)$, e se $\lambda - \lambda_0 = \epsilon$ è sufficientemente piccolo, si ha

$$(\lambda I - A)^{-1} = \sum_k (\lambda_0 I - A)^{-1} (\epsilon(\lambda_0 I - A)^{-1})^k. \quad 5A.3$$

Poiché $(\lambda_0 I - A)^{-1}$ è per ipotesi limitato, con ϵ sufficientemente piccolo si ha

$$\|\epsilon(\lambda_0 I - A)^{-1}\| < 1,$$

e la serie (5A.3) converge uniformemente, definendo così un operatore limitato.

♣

Definizione 5A.4 - spettro

Lo *spettro* $\sigma(A)$ è il complemento nel piano complesso dell'insieme risolvente.

◇

Nota 5A.2

Dalla definizione segue che per ogni $K > 0$ l'insieme

$$\sigma(A) \cap \{\lambda : |\lambda| \leq K\} \quad 5A.4$$

è un insieme chiuso e limitato e quindi compatto.



Definizione 5A.5 – raggio spettrale

Il raggio spettrale dell'operatore A è per definizione

$$r(A) \equiv \sup_{\lambda \in \sigma(A)} |\lambda|. \quad 5A.5$$



Lemma 5A.3

Si ha

$$r(A) = \|A\|. \quad 5A.6$$



Dimostrazione

In generale, per operatori su spazi di Banach,

$$r(A) = \liminf_{n \rightarrow \infty} (|A^n|)^{\frac{1}{n}}.$$

Per operatori su spazi di Hilbert vale la disuguaglianza

$$\|A^{n+m}\| \leq \|A\|^m \|A\|^n.$$



Nota 5A.3

Le definizioni di risolvente, spettro, raggio spettrale, si estendono ad operatori su spazi di Banach. Se X è uno spazio di Banach, A è un operatore chiuso su X , allora A^* definito su X^* da

$$(A^*\phi)(x) \equiv \phi(Ax)$$

è un operatore lineare. Più in generale, se X e Y sono spazi di Banach e $A : X \rightarrow Y$, un duale di A è definito da

$$A^* : Y^* \rightarrow X^*, \quad (A^*\phi)(x) = \phi(Ax), \quad \phi \in Y^*.$$



Utilizziamo la notazione

$$\|A\|_{L(X,Y)} = \sup_{x \in X, \|x\|=1} \|Ax\|_Y.$$

Si ha allora

Lemma 5A.4

$$\|A\|_{L(X,Y)} = \|A^*\|_{L(Y^*,X^*)}. \quad 5A.8$$

◇

Dimostrazione

Si ha

$$\begin{aligned} \|A\|_{L(X,Y)} &= \sup_{x \in X, \|x\|=1} \|Ax\|_Y \\ &= \sup_{\|x\| \leq 1} \sup_{\|\phi\| \leq 1} |\phi(Ax)| \\ \sup_{\|x\| \leq 1} \sup_{\|\phi\| \leq 1} |A^*\phi(x)| &= \sup_{\|\phi\| \leq 1} \|A^*\phi\| = \|A\|_{L(Y^*,X^*)}. \end{aligned} \quad 5A.9$$

♡

Lo spettro di un operatore su di uno spazio di Hilbert può essere un sottoinsieme qualunque del piano complesso. Diamo un esempio di operatore per il quale lo spettro è l'intero piano complesso e di un operatore il cui spettro è l'insieme vuoto.

Esempio 1

Sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H} = L^2([0, 1])$, si consideri l'operatore $A = i \frac{d}{dx}$ con dominio di definizione l'insieme delle funzioni assolutamente continue in $[0, 1]$. Si ha $\rho(A) = \{\emptyset\}$. Infatti per ogni $\lambda \in C$ si ha

$$(A - \lambda I)e^{-i\lambda x} = 0$$

e la funzione $e^{-i\lambda x}$ è assolutamente continua. Ne segue che $\sigma(A) = C$.

◇

Esempio 2

Ancora sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H} = L^2([0, 1])$, si consideri l'operatore differenziale A dall'esempio precedente, il cui dominio sia ora ristretto alle funzioni assolutamente continue su $[0, 1]$ che si annullano nell'origine. Verifichiamo che $\rho(A) = C$.

Per ogni $\lambda \in C$ e per ogni $g \in \mathcal{H}$ definiamo

$$(S_\lambda g)(x) = i \int_0^x e^{-i\lambda(x-y)} g(y) dy. \quad 5A.10$$

L'operatore S_λ è limitato. Infatti

$$\|S_\lambda g\|_\infty^2 \leq \sup_{0 \leq x \leq 1} |(S_\lambda g)(x)|^2 \leq \int_0^1 \sup_x \int_0^x |g(y)|^2 dy \leq C_1 \|g\|^2 \quad 5A.11$$

Si può verificare che S_λ lascia invariante il dominio di A . Inoltre

$$(A - \lambda I)S_\lambda = S_\lambda(A - \lambda I) = 1. \quad 5A.12$$

Dunque $(A - \lambda I)$ è invertibile per ogni $\lambda \in C$. Ne segue che $\sigma = \{0\}$. ◇

Definizione 5A.6 – spettro essenziale

Il numero reale λ appartiene allo *spettro essenziale* $\sigma_{ess}(A)$ dell'operatore autoaggiunto A se per ogni $\epsilon > 0$ il proiettore spettrale $E_{[\lambda-\epsilon, \lambda+\epsilon]}$ ha codominio di dimensione infinita. ◇

Definizione 5A.7 – spettro discreto

Lo *spettro discreto* $\sigma_{disc}(A)$ è il complemento di $\sigma_{ess}(A)$ in $\sigma(A)$. ◇

Nota 5A.4

Un autovalore λ di A appartiene allo spettro discreto se e solo se ha molteplicità finita. ♣

Definizione 5A.8

Lo *spettro puntuale* dell'operatore A è l'insieme dei $\lambda \in C$ per i quali l'equazione $A\phi = \lambda \phi$ ha soluzione con $\phi \in \mathcal{H}$. ◇

Per analizzare ulteriormente la struttura di un operatore autoaggiunto A sullo spazio di Hilbert separabile \mathcal{H} , ricordiamo che, per il teorema spettrale, esiste un minimo intero $K \in (N \cup \infty)$ (si ammette $K = +\infty$), K misure μ_k , $k = 1, \dots, K$ sulla retta reale ed un operatore unitario

$$U : \mathcal{H} \rightarrow \oplus_i L^2(R, d\mu_i)$$

tale che sia $UAU^* = \lambda I$ dove λ è la coordinata utilizzata su R , e I è l'identità. Se nell'intervallo I solamente K_0 delle misure hanno peso diverso da zero, si dice che l'operatore A ha, nell'intervallo I , molteplicità spettrale K_0 .

Ricordiamo inoltre che ogni misura sulla retta reale si decompone in modo unico in tre parti: una parte $\mu_{p.p.}$ puramente puntuale, una parte $\mu_{a.c.}$ assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue su R e infine una parte μ_{sing} che assegna misura zero a qualunque collezione numerabile di punti ed è singolare rispetto alla misura di Lebesgue.

Corrispondentemente a questa decomposizione si ha una decomposizione ortogonale

$$L^2(R, d\mu) = L^2(R, d\mu_{p.p.}) \oplus L^2(R, d\mu_{a.c.}) \oplus L^2(R, d\mu_{s.c.}).$$

Quindi per un operatore A si può definire la decomposizione ortogonale di \mathcal{H} in

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{p.p.,A} \oplus \mathcal{H}_{a.c.,A} \oplus \mathcal{H}_{s.c.,A} \tag{5A.13}$$

Ad esempio l'operatore $A = -\frac{d^2}{dx^2}$, definito sulle quelle funzioni di $L^2(R)$ la cui derivata seconda è a quadrato integrabile, è un operatore autoaggiunto il cui

spettro è continuo, copre l'asse reale positiva e ha molteplicità due. L'operatore unitario U è in questo caso la trasformazione di Fourier sotto la quale l'operatore diventa l'operatore moltiplicazione per k^2 . La molteplicità spettrale è due poiché uno stesso valore di k^2 corrisponde ai valori $+k$ e $-k$ della coordinata su R .

L'operatore I (identità) su uno spazio di Hilbert di dimensione infinita ha spettro puramente puntuale consistente nel numero uno. Il corrispondente sottospazio ha dimensione infinita; pertanto lo spettro discreto di I è vuoto. Il numero 1 appartiene allo spettro essenziale dell'operatore I .

La misura spettrale di I è la somma diretta infinite volte della misura di Dirac concentrata nel punto sull'asse reale di coordinata uno

Nel caso di spettro puntuale la molteplicità spettrale coincide con la dimensione del sottospazio corrispondente al dato autovalore.

Per lo studio delle caratteristiche spettrali di un operatore autoaggiunto A è importante un teorema di Ruelle. Prima di enunciarlo, notiamo la seguente identità

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2i\pi} \int_a^b \left(\frac{1}{A - \lambda - i\epsilon} - \frac{1}{A - \lambda + i\epsilon} \right) d\lambda = \frac{1}{2} (E_{[a,b]} - E_{(a,b)}) \quad 5A.14$$

che segue immediatamente dall'isomorfismo che la rappresentazione spettrale di A induce tra funzioni limitate di A ed $L^\infty(R)$ e dal fatto che, posto

$$f_\epsilon(x) \equiv \frac{1}{2i\pi} \int_a^b \left(\frac{1}{x - \lambda - i\epsilon} - \frac{1}{x - \lambda + i\epsilon} \right) d\lambda,$$

si ha che $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} f_\epsilon$ è eguale a 0 se x non appartiene a $[0, 1]$, è eguale a $1/2$ se $x = a$ oppure $x = b$, ed infine è eguale ad uno se $x \in (a, b)$.

Teorema 5A.5 (Ruelle)

Sia A autoaggiunto, $\phi \in \mathcal{H}$. Se esiste un numero $p > 1$ tale che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_a^b |\Im(\phi, R(\lambda + i\epsilon)\phi)|^p d\lambda < +\infty, \quad R(z) = (z - A)^{-1}$$

allora $E_{(a,b)}\phi \in \mathcal{H}_{a.c.,A}$.

◇

Dimostrazione

Sia S un aperto, e sia

$$\cup_{i=1}^N (a_i, b_i) \subset S, \quad b_i < a_{i+1}, \quad N < +\infty.$$

Dalla disuguaglianza di Hölder, per ogni coppia di numeri positivi p, q con $\frac{1}{q} + \frac{1}{p} = 1$ si ha

$$(\phi, E_S \phi) \leq \frac{1}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\int_a^b |\Im(\phi, R(\lambda + i\epsilon)\phi)|^p d\lambda \right]^{\frac{1}{p}} |S|^{\frac{1}{q}}$$

dove $|S|$ è la misura di Lebesgue di S . Dobbiamo dimostrare che se la misura di Lebesgue $\nu(I) = 0$ allora $(\phi, E_I \phi) = 0$.

Poiché la misura di Lebesgue è regolare, esiste una successione S_i^N , $i = 1, \dots, N$ di intervalli disgiunti tali che $I \subset \cup_k S_k^N$. Da $\nu(I) = 0$ segue

$$\inf_N \sum_k |S_k^N|^{\frac{1}{q}} = 0, \quad q > 1$$

e da questo si deduce $(\phi, E_S \phi) = 0$.

♡

Terminiamo quest'appendice definendo le *densità spettrali*.

La misura μ_ϕ associata dall'operatore A allo stato ϕ dipende dallo stato scelto e non è quindi una proprietà intrinseca dell'operatore, come invece può essere la distribuzione degli autovalori se l'operatore ha uno spettro puramente puntuale. Nel caso di operatori di Schrödinger in $L^2(\mathbb{R}^N)$ che hanno spettro continuo, una definizione di densità degli stati (*densità spettrale*) può essere data nel seguente modo.

Questa è una nozione molto utilizzata soprattutto in fisica dello stato solido. Come ogni densità essa serve grosso modo a valutare il peso relativo della parte dello spettro compresa in un dato intervallo.

Consideriamo l'operatore di Schrödinger $H = -\Delta + V(x)$ in $L^2(\mathbb{R}^d)$ e sia K_L l'iper-cubo di lato $2L$ centrato nell'origine. Assumiamo che la funzione $V(x)$ sia sufficientemente regolare.

Sia Δ_L il laplaciano con condizioni al bordi di Dirichlet su ∂K_L . Questo operatore ha spettro totalmente puntuale e anche discreto poiché la sua risolvente è un operatore compatto.

Se il potenziale V non è troppo singolare, anche $H_L \equiv \Delta_L + V_L$ ha risolvente compatta e quindi spettro totalmente puntuale. Abbiamo indicato con V_L la restrizione a K_L della funzione V . Indichiamo con $N_I(H_L)$ il numero di autovalori di H_L contenuti nell'intervallo I dell'asse reale, contando le molteplicità.

Definizione 5A.9

Definiamo *peso dell'intervallo* I rispetto all'operatore H

$$p_H(I) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{N_I(H_L)}{(2L)^d}, \quad 5A.14$$

se il limite esiste. Se $p_H(I)$ si estende a una misura $d\nu(\lambda)$ sui Boreliani di \mathbb{R} e questa misura è assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue, definiamo *densità spettrale* la funzione positiva misurabile ρ che soddisfa $d\nu = \rho(\lambda)d\lambda$.

◇

CAPITOLO 6
SEMIGRUPPI E DISSIPAZIONI. ASPETTANZA CONDIZIONATA.
SEMIGRUPPI DI MARKOV

Nel capitolo precedente abbiamo discusso alcuni aspetti della dinamica in Meccanica Quantistica quando questa viene rappresentata da gruppi ad un parametro di automorfismi di una C^* -algebra. Si tratta di una dinamica reversibile (e in generale conservativa) che descrive sistemi isolati, in analogia con le equazioni di Hamilton in Meccanica Classica.

In Meccanica Classica è anche possibile descrivere sistemi dissipativi che tipicamente hanno un'evoluzione verso posizioni di equilibrio. Questi sistemi hanno scambi con l'ambiente esterno (tipicamente di energia e di quantità di moto), e generalmente l'ambiente esterno è supposto non risentire dell'interazione con il sistema in esame (un esempio tipico è un termostato).

In Meccanica Classica un'evoluzione dissipativa viene descritta in generale da un semigruppato (ad esempio il semigruppato del calore per sistemi in cui avvenga scambio di calore con l'ambiente esterno). Questo avviene anche in Meccanica Quantistica.

In questo capitolo richiameremo semplici nozioni della teoria dei semigruppato e daremo nozioni elementari della teoria delle dissipazioni, che giocano rispetto ai semigruppato un ruolo simile a quello che le derivazioni hanno rispetto ai gruppi continui ad un parametro.

E' interessante notare che nel caso della Meccanica Classica è più naturale definire un'evoluzione reversibile in termini di moto dei punti nello spazio delle fasi, cioè dando le traiettorie $t \rightarrow z(t, z_0)$ soluzione di equazioni differenziali ordinarie. L'evoluzione delle funzioni viene allora descritta per dualità.

Una tale descrizione può essere data, sotto opportune condizioni, anche per sistemi dissipativi; in questo caso il ruolo delle equazioni differenziali ordinarie viene preso da equazioni differenziali stocastiche, la cui soluzione dà la probabilità che nel corso del tempo venga seguita una data traiettoria nello spazio delle fasi. Un esempio tipico è la descrizione del moto browniano che tratteremo brevemente nel cap.14.

In Meccanica Quantistica un approccio di questo tipo è stato tentato (Meccanica Stocastica di Nelson) ma non è stato ancora completato; per una indicazione della strada da seguire e per alcuni risultati interessanti si possono consultare il libro di P. Meyer [Mey95] o il libro di K.R. Partasarathy [Par92]. Noi non tratteremo qui ulteriormente questo interessante problema.

Iniziamo con una descrizione elementare di alcune proprietà dei semigrupp. Un trattazione estesa e sufficiente per le applicazioni in Fisica si trova ad esempio in [Bre86]

Definizione 6.1

Un semigrupp su uno spazio di Banach X è un omeomorfismo $\{T_t\}$ del semigrupp R^+ negli operatori limitati su X .

◇

Considereremo semigrupp ad un parametro continui, distinguendo tre tipi di continuità:

- (1) Continuità uniforme: $\lim_{t \rightarrow 0} \sup_{x \in X, |x| \leq 1} \|T_t x - x\| = 0$,
- (2) Continuità forte: $\lim_{t \rightarrow 0} \|T_t x - x\| = 0, \forall x \in X$,
- (3) Continuità debole: $\lim_{t \rightarrow 0} \phi(T_t x - x) = 0, \forall x \in X, \phi \in X^*$.

La continuità uniforme non è quasi mai verificata per sistemi di interesse fisico. Questo è dovuto al seguente teorema: indichiamo con $\mathcal{B}(X)$ la collezione di tutti gli operatori lineari chiusi e limitati su X e con $|a|$ la norma di $a \in \mathcal{B}(X)$.

Teorema 6.1

Per un semigrupp in uno spazio di Banach le seguenti affermazioni sono tra loro equivalenti:

- i) $T_t = \sum_n \frac{t^n}{n!} a^n$ (con convergenza in norma della serie);
- ii) T_t è uniformemente continuo in t ;
- iii) $x \rightarrow T_t x$ è uniformemente continuo in un intorno dell'origine in $R^+ \times X$;
- iv) Esiste $a \in \mathcal{B}(X)$ tale che $\lim_{t \rightarrow 0} t^{-1}(T_t - I) = a$.

◇

Dimostrazione

Sono ovvie le implicazioni i) \rightarrow ii), iii) \rightarrow iv); ii) \rightarrow iii), iv) \rightarrow ii); iii) \rightarrow ii). (quest'ultima segue dalle proprietà del semigrupp). Resta dunque da dimostrare ii) \rightarrow i).

Per l'ipotesi di uniforme continuità l'espressione

$$\tau^{-1} \int_0^\tau T_t dt = I - \tau^{-1} \int_0^\tau (T_t - I) dt \quad 6.3$$

definisce, per τ sufficientemente piccolo, un operatore lineare su X che differisce di poco dall'identità ed è quindi invertibile.

Infatti si ha $\|\tau^{-1} \int_0^\tau (T_t - I) dt\| \leq \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|T_t - I\|$, ed anche $\limsup_{t \rightarrow 0} \|(T_t - I)\| = 0$. Poniamo

$$a_\tau \equiv (T_\tau - I) \left(\int_0^\tau T_t dt \right)^{-1}. \quad 6.4$$

Si verifica facilmente utilizzando la proprietà di semigruppato, che $a_{2\tau} = a_\tau$ e per iterazione $a_{N\tau} = a_\tau$. Per continuità a_τ non dipende da τ . Posto $a \equiv a_\tau$, si ha

$$T_\tau = I + a \int_0^\tau T_t dt \quad 6.5$$

da cui si ottiene i) per iterazione (la serie converge assolutamente poiché a è limitato).

♡

Nota 6.1

Si può notare che l'operatore a soddisfa

$$\frac{d}{dt} T_t x = a T_t x, \quad \forall x \in X. \quad 6.6$$

♣

Nel caso di continuità forte esiste ancora un operatore con dominio denso per cui (6.6) è soddisfatta, ma si tratta in generale di un operatore illimitato. Definiamo ancora l'operatore

$$\tau^{-1} \int_0^\tau T_t dt. \quad 6.7$$

Esso è ancora definito per ogni x ma può non essere invertibile. Infatti per ogni x esiste τ_x tale $\tau_x^{-1} \int_0^{\tau_x} T_t x dt$ differisce poco da x , ma può verificarsi che sia $\inf_x \tau_x = 0$ (si noti che X non è compatto in generale).

Dimostriamo tuttavia che esiste un insieme denso in X per il quale l'operatore (6.7) è invertibile. Per ogni $x \in X$ poniamo

$$y_{\tau,x} \equiv \tau^{-1} \int_0^\tau T_t x dt, \quad \tau > 0, \quad x \in X. \quad 6.8$$

L'insieme degli elementi di X che possono essere così ottenuti al variare di τ ed x è denso in X (per la continuità rispetto a t). Inoltre si ha

$$\left(\tau^{-1} \int_0^\tau T_t dt \right)^{-1} y_{\tau,x} = x \quad 6.9$$

(quindi $x \rightarrow y_{x,\tau}$ è invertibile). Inoltre è facile verificare che

$$\lim_{t \rightarrow 0} t^{-1} (T_t - I) y_{\tau,x} = a y_{\tau,x}. \quad 6.10$$

L'operatore a è dunque densamente definito in X e si ha, per $y \in D(a)$,

$$ay = (T_\tau - I) \left(\int_0^\tau T_t dt \right)^{-1} y$$

e quindi

$$T_\tau y = y + a \int_0^\tau T_t y dt. \quad 6.11$$

♡

Definizione 6.2

L'operatore a è detto *generatore* del semigruppato T_t .

◇

Si noti che la (6.11) *non può essere iterata in generale* se non eventualmente su un sottoinsieme Ω , poiché può non esistere per ogni x un elemento z tale che

$$T_t y_{\tau,x} = T_\tau y_{t,z}.$$

Dunque in generale, dato a , la (6.11) non può essere risolta per iterazione se il semigruppato non è continuo in x nella topologia della norma.

Ciò pone in maniera naturale un problema analogo a quello studiato nel caso di sistemi reversibili: dato un operatore a su di uno spazio di Banach X con dominio $D(a)$, trovare le condizioni che assicurano l'esistenza di un semigruppato $x \rightarrow T_t(x)$ che sia per ogni $x \in X$ continuo in t e tale che (6.11) sia soddisfatta su un dominio denso in X (e quindi T_t abbia come generatore a).

Tratteremo solo il caso in cui il semigruppato è di contrazione.

Definizione 6.3

Un semigruppato $t \rightarrow T_t$, $t \geq 0$ su uno spazio di Banach X è detto essere di *contrazione* se per ogni $x \in X$ ed ogni $t \geq 0$ vale $\|T_t x\| \leq \|x\|$.

◇

Nota 6.2

Tutti i gruppi di automorfismi sono semigruppato di contrazione. Inoltre, se $\|T_t x\| \leq \|e^{\alpha t} x\|$ per qualche $\alpha > 0$ ci si può ridurre a un semigruppato di contrazione considerando $T'_t \equiv e^{-\alpha t} T_t$. Il caso $\|T_t x\| \leq c \|x\|$, $c > 1$ si tratta in modo analogo.

♣

Una struttura importante nello studio dei semigruppato di contrazione è l'operatore risolvente.

Definizione 6.4

Se T_t è un semigruppato di contrazione in uno spazio di Banach X , l'operatore su X definito da

$$R_z x = - \int_0^\infty e^{-tz} T_t x dt, \quad \Re(z) > 0 \quad 6.12$$

è detto *risolvente* (con parametro z).

◇

È facile verificare che

$$\|R_z x\| \leq \int_0^\infty e^{-t \Re(z)} \|T_t x\| dt \leq \frac{1}{\Re(z)} \|x\|, \quad 6.13$$

dunque

$$\|R_z\| \leq \frac{1}{|\Re(z)|}. \quad 6.14$$

Ne segue che R_z , $\Re(z) > 0$ è un operatore limitato il cui codominio è denso in X . Inoltre, per calcolo diretto, si ha

$$(a - zI)R_z = I, \quad R_z(a - zI)x = x, \quad x \in D(a). \quad 6.15$$

Infatti

$$\begin{aligned} a R_z x &= \lim_{h \rightarrow 0} h^{-1} (T_h - I) R_z x \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} h^{-1} (1 - e^{-hz}) \int_0^\infty e^{-zt} T_t x dt + h^{-1} e^{zh} \int_0^\infty e^{-zt} T_t x dt \\ &= z R_z x + x \end{aligned}$$

da cui segue la prima equazione in (6.15); la seconda si dimostra con procedimento analogo, prendendo x in $D(a)$.

Abbiamo dunque dimostrato che (6.14) e (6.15) sono condizioni necessarie per l'esistenza del semigruppato di contrazione T_t con generatore a . Dimostriamo ora che sono anche sufficienti. Questo è garantito dal seguente teorema.

Teorema 6.2 (Hille–Yosida)

Se un operatore a su uno spazio di Banach X è tale che $(a - \lambda I)^{-1}$, $\lambda > 0$, definisce un'applicazione da X a $D(a)$ e inoltre

$$\|a - \lambda I\|^{-1} \leq \lambda^{-1}, \quad \lambda > 0, \quad 6.16$$

allora esiste unico un semigruppato di contrazione con generatore a .

◇

Nota 6.3

Nel caso di gruppi di automorfismi, che sono particolari semigruppato di contrazione, il generatore definisce una derivazione.

♣

Dimostrazione del teorema 6.2

Poniamo

$$a_\lambda \equiv -\lambda I - \lambda^2 (a - \lambda I)^{-1}, \quad \lambda \in \mathbb{R}^+.$$

Questa collezione di operatori è chiamata *approssimante di Yosida* di a . Si verifica facilmente che se $\phi \in D(a)$ si ha $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} a_\lambda \phi = a\phi$.

Gli operatori a_λ sono limitati, commutano fra loro e ciascuno di essi genera un semigruppato di contrazioni, continuo in norma. Infatti

$$\|e^{ta_\lambda} \phi\| = e^{-t\lambda} \left\| e^{-t\lambda^2(a-\lambda I)^{-1}} \phi \right\| \leq e^{-t\lambda} e^{t\lambda} \|\phi\| = \|\phi\|,$$

dove abbiamo utilizzato $\lambda \|(a - \lambda I)^{-1}\| \leq 1$. Inoltre si ha

$$\|e^{ta_\lambda} - e^{ta_\mu}\| \leq t \|a_\lambda - a_\mu\|,$$

(notare che a_λ e a_μ commutano)

$$\frac{d}{ds} e^{tsa_\lambda + (1-s)ta_\mu} = t(a_\lambda - a_\mu) e^{tsa_\lambda + (1-s)ta_\mu}.$$

Ne segue che, se $\phi \in D(a)$ si ha, nel limite $t \rightarrow \infty$,

$$e^{ta_\lambda} \phi \rightarrow S_t \phi,$$

dove S_t è un semigruppato di contrazione (quindi continuo). Poiché $D(a)$ è denso gli operatori S_t si estendono a tutto X e il limite è continuo in t per ogni $x \in X$ (come limite uniforme di funzioni continue).

Inoltre, se $\phi \in D(a)$

$$S_t \phi - \phi = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} (e^{ta_\lambda} \phi - \phi) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \int_0^t e^{sa_\lambda} a_\lambda \phi \, ds = \int_0^t S_s a \phi \, ds.$$

Se b è il generatore di S_t si ha, dividendo per t e passando al limite, $D(b) \supseteq D(a)$ e b ristretto a $D(a)$ coincide con a . D'altra parte $D(b) = (I - b)^{-1}X$, e analizzando la stima data sopra segue $D(a) \subseteq D(b)$. Dunque $D(a) = D(b)$ e quindi gli operatori a e b coincidono.

♡

Diamo una semplice applicazione del teorema di Hille-Yosida.

Sia $X \equiv BU(0, \infty)$ (funzioni limitate uniformemente continue su $(0, \infty)$). Poniamo

$$(T_t f)(s) \equiv f(t + s), \quad t \geq 0.$$

Si verifica facilmente che T_t è un semigruppato di contrazione (nella topologia dell'estremo superiore), e che il generatore a soddisfa $af = f'$.

Per ogni $\lambda \in C$ l'equazione $(\lambda I - a)\phi = 0$ ha la soluzione $\phi_\lambda(t) = e^{\lambda t}$. Dunque per $\Re \lambda > 0$ non vi sono soluzioni in $BU(0, \infty)$ e quindi l'operatore $(a - \lambda I)^{-1}$, $\lambda > 0$ è definito da X a $D(a)$. D'altra parte, per ogni funzione f differenziabile in $BU(0, \infty)$ utilizzando la trasformata di Laplace, si ottiene

$$\lambda \|f\| \leq \left\| \left(\frac{d}{dt} - \lambda \right) f \right\|$$

e quindi, posto $\phi = (\frac{d}{dt} - \lambda)f$,

$$\|(a - \lambda I)^{-1}\phi\| \leq \lambda^{-1}\|\phi\|.$$

Dunque il semigruppò è generato, per il teorema di Hille-Yosida, dall'operatore $\frac{d}{dt}$.

Diamo ora una caratterizzazione dei generatori dei semigruppò di contrazione, che assume ancora che il codominio di $(a - \lambda I)$, $\lambda > 0$ sia tutto X ma che sostituisce la stima su $\|a - \lambda I\|^{-1}$ con una proprietà lineare, più facilmente verificabile. Questa caratterizzazione è data dal teorema di Lumer-Philips; la proprietà lineare utilizzata corrisponde, nel caso di operatori ellittici, al principio del massimo.

Faremo uso del seguente corollario del teorema di Hahn-Banach (che abbiamo discusso nel cap. 4).

Corollario del teorema di Hahn-Banach

Se X è uno spazio di Banach e y un suo elemento esiste sempre nel duale X^* un elemento l_y tale che

$$\|l_y\| = \|y\|, \quad l(y) = \|y\|^2. \tag{6.17}$$

◇

Nota 6.4

L'elemento l_y che ha questa proprietà non è in generale unico. Chiameremo *faccia* F_y la collezione di tutti gli elementi di X^* che soddisfano (6.17).

A titolo di esempio, se X è la collezione di funzioni continue su un compatto, la faccia associata ad una funzione $f(x)$ è la collezione di misure di Borel di peso $\|f\| = \sup_x |f(x)|$ e concentrate nei punti di massimo di $|f|$.

♣

Utilizzeremo la seguente notazione

Definizione 6.5

Un operatore Δ su uno spazio di Banach X è detto *dissipativo* (o equivalentemente accretivo o anche monotono) se

$$\forall x \in D(\Delta), \quad \exists \eta \in X^*, \quad \eta(x) = \|\eta\|\|x\|, \quad \Re(\eta(\Delta(x))) \leq 0 \tag{6.18}$$

(cioè vale (6.18) per ogni elemento di ciascuna faccia).

◇

Dimostreremo in seguito che se (6.18) vale per un elemento di una faccia, questa relazione vale per ogni elemento di quella faccia.

Nota 6.5

Questa notazione è dovuta al fatto che l'operatore $\frac{d^2}{dx^2}$ che definisce l'equazione del calore risulta essere un operatore dissipativo. Questo esempio può essere

utile per comprendere il significato ed il ruolo delle definizioni che daremo nel caso generale.

Sia f una funzione di classe C^2 su R nulla al di fuori di un compatto. Sia X lo spazio di Banach delle funzioni continue che si annullano all'infinito con norma $\sup_{x \in R} |f(x)|$. Sia $x_0 \in R$ un punto in cui f raggiunge il suo valore massimo. Allora

$$\left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x=x_0} \leq 0. \quad (6.19)$$

Definiamo ora un funzionale $\delta_{x_0}(g) \equiv g(x_0)$. La (6.19) può essere scritta nel modo seguente

$$\delta_{x_0} \left(\frac{d^2 f}{dx^2} \right) \leq 0.$$

Quindi (6.19) deve essere soddisfatta, per il principio del massimo, se δ_{x_0} soddisfa

$$\delta_{x_0}(f) = \sup_{x \in R} f(x).$$

In particolare, se $f \geq 0$, si ha $\|f\| = \sup_{x \in R} f(x)$ si ha dunque in questo caso

$$\delta_{x_0}(f) = \|f\|.$$

♣

Una prima relazione tra semigruppì di contrazione e operatori dissipativi è la seguente.

Lemma 6.3

Se T_t è un semigruppì di contrazione, il suo generatore a definito da

$$ax = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1}(T_t x - x), \quad x \in D(a)$$

è un operatore dissipativo.

◇

Dimostrazione

Se $\eta(x) = \|\eta\| \|x\|$, si ha

$$\eta(ax) = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1}(\eta(T_t x) - \|\eta\| \|x\|)$$

Ma $\|\eta(T_t x)\| \leq \|\eta\| \|x\|$ e dunque, passando al limite $\Re(\eta(ax)) \leq 0$.

♡

Si ha inoltre

Teorema 6.4

L'operatore a sullo spazio di Banach X è dissipativo se e solo se

$$\|(a - \lambda I)x\| \geq \lambda \|x\|, \quad \forall \lambda > 0, \quad \forall x \in D(a).$$

◇

Dimostrazione

(\Rightarrow) : Se $\eta \in F_x$, $\Re(\eta(ax)) \leq 0$ si ha

$$\|\eta\| \|(\lambda I - a)x\| \geq \Re \eta((\lambda I - a)x) \geq \lambda |x|^2.$$

Ma se $\eta \in F_x$, allora $\|\eta\| = \|x\|$. Dunque $\|(\lambda I - a)x\| \geq \lambda \|x\|$.

(\Leftarrow) : Sia

$$\|(\lambda I - a)x\| \geq \lambda \|x\|, \forall \lambda > 0, \quad \forall x \in D(a).$$

Fissato $x \in D(a)$, sia

$$\eta_\lambda \in F_{(\lambda I - a)x}, \quad \xi_\lambda = \eta_\lambda \|\eta_\lambda\|^{-1}.$$

Allora

$$\lambda \|x\| \leq \|(\lambda I - a)x\| = \frac{\eta_\lambda((\lambda I - a)x)}{\|\eta_\lambda\|} = \lambda \Re(\xi_\lambda(x)) - \Re(\xi_\lambda(ax)). \quad 6.20$$

Per ipotesi, $\Re(\xi_\lambda(x)) \leq \|x\|$ e quindi $\Re(\xi_\lambda(ax)) \leq 0$. Inoltre, dividendo (6.20) per λ e prendendo il limite $\lambda \rightarrow \infty$ si ha

$$\Re(\xi(x)) = \|x\| \quad 6.21$$

dove ξ è un punto limite della successione ξ_λ (che questo limite esista segue dalla compattezza che è garantita dal teorema di Banach-Alaoglu). Poiché ξ è limite debole e $\|\xi_\lambda\| = 1$, si ha $\|\xi\| \leq 1$. Ma allora da (6.21) segue

$$\|\xi\| = 1 \quad \xi(x) = \|x\|. \quad 6.22$$

Invero se $\|\xi\| = 1$ la convergenza delle ξ_λ è in senso forte, e ξ è l'unico limite. Le equazioni (6.20) e (6.22) concludono la dimostrazione dell'implicazione (\Leftarrow).

♡

Utilizzeremo la seguente definizione

Definizione 6.6

Un operatore Δ su X è detto *massimale monotono* se è monotono e inoltre $(\lambda I - \Delta)^{-1}$ è definito su tutto X e il codominio di $(\lambda I - \Delta)$ è tutto X per qualche $\lambda > 0$ (e quindi per tutti i $\lambda > 0$).

◇

La proprietà di massimale monotonia è necessaria e sufficiente perché un operatore dissipativo (o monotono) sia il generatore di un semigruppato di contrazione. Questo è il contenuto del seguente teorema:

Teorema 6.5 (Lumer–Philips)

Sia a un operatore su uno spazio di Banach X . Allora si ha:

- i) Se a è dissipativo ed esiste $\lambda > 0$ tale che $\text{Ran}[(\lambda I - a)] = X$, allora a è il generatore di un semigruppato di contrazioni;
- ii) Reciprocamente, se a è il generatore di un semigruppato di contrazioni, allora a è dissipativo e $\text{Ran}[(\lambda I - a)] = X, \forall \lambda > 0$.

Inoltre per ogni $\eta \in F_x, \Re(\eta(ax)) \leq 0$.

◇

Dimostrazione

- i) Dalle ipotesi segue che $(\lambda I - a)^{-1}$ è limitato e chiuso; quindi anche a è chiuso. Per far uso del teorema di Hille-Yosida è sufficiente dimostrare che

$$\text{Ran}[(\lambda I - a)] = X, \quad \forall \lambda \in R^+. \quad 6.23$$

Infatti in questo caso, ponendo $(a - \lambda I)x = f$ si ha

$$\|f\| \geq \lambda \|(a - \lambda I)^{-1}f\|, \quad \forall f \in X.$$

Per dimostrare (6.23) si noti che

$$\{\lambda \in R^+, \text{Ran}(\lambda I - a) = X\}$$

è un insieme aperto (intersezione dell'insieme risolvente con il semiasse positivo) e al tempo stesso chiuso perché a è chiuso. Poiché esso non è vuoto, deve coincidere con R^+ .

- ii) Dal teorema di Hille-Yosida si ha

$$\text{Ran}(\lambda I - a) = X, \quad \forall \lambda \in R^+.$$

Inoltre

$$\eta(T_t x) \leq \|T_t x\| \|\eta\| \leq \|x\|^2, \quad \forall \eta \in F_x$$

dunque $\Re(\eta((T_t x - x))) \leq 0$. Dividendo per t e passando al limite si verifica che l'operatore è massimale monotono.

♡

Un importante caso particolare del teorema di Lumer-Philips si ha quando anche il duale X^* è uno spazio di Banach e anche l'operatore a^* è dissipativo¹.

Notiamo anche che un operatore dissipativo non può avere autovalori positivi. Infatti, se $ax = \lambda x, \lambda > 0$, sia $\eta \in F_x$. Dunque $\eta(x) = \|x\|$. Ma per

¹Ricordiamo che l'aggiunto è definito nel modo seguente: $D(a^*) = \{f \in X^*, f(ax) \text{ è continuo nella norma di } X\}$ e, se $f \in D(a^*), a^*f = f(ax)$. Con questa definizione, a^* è chiuso nella topologia di X^* .

ipotesi $\eta(x) = \lambda^{-1}\eta(ax)$, dunque $\eta(ax) = \lambda\|x\|$ che contraddice la condizione $\Re(\eta(ax)) \leq 0$. È allora facile dimostrare

Proposizione 6.6 (corollario del teorema di Lumer–Philips)

Se a è densamente definito e chiuso sullo spazio di Banach X , se X^* è uno spazio di Banach e se a e a^* sono entrambi dissipativi, allora a genera un semigruppino continuo di contrazioni.

◇

Dimostrazione

Dimostriamo che $\text{Ran}(I - a) = X$. Se questo non fosse vero, poiché X^* separa X , esisterebbe un elemento f di X^* che annulla tutti gli elementi di $\text{Ran}(I - a)$. Dunque

$$f(x) - f(ax) = 0, \quad \forall x \in D(a).$$

Dalla densità di $D(a)$ segue $f = a^*f$ e dunque f è un autovalore di a^* all'autovalore 1; questo contraddice l'ipotesi che a sia dissipativo.

♡

Nota 6.6

Questo corollario è particolarmente utile se X è riflessivo ($X^{**} = X$). Ad esempio, nel caso in cui

$$X = L^p(\mathbb{R}^n), \quad X^* = L^q(\mathbb{R}^n), \quad 0 < p, q < \infty, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$$

e l'operatore è definito su un dominio denso comune (ad esempio $C_0^1(\mathbb{R}^n)$) ed è simmetrico per la dualità tra X e X^* , cioè

$$(f, ag) = (af, g), \quad g \in C_0^1 \cap L^p, \quad f \in C_0^1 \cap L^q. \quad 6.24$$

Un caso ancora particolare si ha quando $p = q = 2$. Se vale (6.24) allora $a = a^*$.

♣

Notiamo infine

Lemma 6.7

Un operatore dissipativo è chiudibile.

◇

Dimostrazione

Sia a dissipativo. Dal teorema di Hille–Yoshida si ha, con $\mu = -\lambda^{-1}$,

$$\|(I + \mu a)x\| \geq \|x\|, \quad \forall x \in D(a), \quad \mu > 0.$$

Sia $x_n \rightarrow 0$, $ax_n \rightarrow y$ (convergenza in norma). Allora

$$\|(I + \mu a)(x_n + \mu x')\| \geq \|x_n + \mu x'\|, \quad \forall x' \in D(a)$$

e prendendo il limite $n \rightarrow \infty$

$$\|\mu y + \mu x' + \mu^2 a x'\| \geq \mu \|x'\|$$

da cui, dividendo per μ e passando al limite $\mu \rightarrow 0$

$$\|y + x'\| \geq \|x'\|, \quad \forall x' \in D(a). \quad 6.25$$

Poiché $D(a)$ è denso, da (6.25) segue $y = 0$.

♡

Il teorema di Nelson che abbiamo discusso in relazione alle derivazioni si estende alle dissipazioni:

Teorema 6.8 (Nelson)

Se a è densamente definito e chiuso, le seguenti affermazioni sono tra loro equivalenti:

- i) L'operatore a genera un gruppo ad un parametro di isometrie;
- ii) Gli operatori $\pm a$ sono entrambi dissipativi e hanno un insieme comune denso di vettori analitici.

◇

Nelle applicazioni fisiche le dissipazioni sono spesso ottenute come limite di operatori limitati. Per questo motivo sono importanti il teorema seguente, che enunciamo senza dimostrazione, ed il suo corollario.

Teorema 6.9 ([Kur73])

Sia a_n una successione di generatori di un semigruppato di contrazione su uno spazio di Banach X . Indichiamo con Γ_n^λ il grafico di $(I - \lambda a_n)$, $\lambda > 0$, e sia Γ^λ il grafico limite. Le seguenti due affermazioni sono equivalenti:

- i) Esiste un semigruppato fortemente continuo (in t) di contrazioni T_t tale che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|e^{t a_n} x - T_t x\| = 0, \quad \forall x \in X, \quad t \in \mathbb{R}^+;$$

- ii) Il dominio e il range di $(I - \lambda a_n)$ sono densi in X per qualche $\lambda > 0$.

In questo caso, Γ^λ è il grafico di $(I - \lambda a)$ dove a è il generatore di T_t .

◇

Conviene mettere in evidenza il seguente

Corollario al teorema 6.9

Siano a_n generatori di semigruppato di contrazione. Supponiamo che esista un insieme denso D in X e un operatore limite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n x = ax, \quad x \in D. \quad 6.26$$

Se il codominio di $(I - \lambda a)$ è denso in X per almeno un $\lambda > 0$, allora \bar{a} (la chiusura di a) è il generatore di un semigruppato di contrazione, e inoltre vale

$$e^{ta}(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} e^{ta_n}(x), \quad \forall x \in X, \quad \forall t \geq 0$$

con convergenza uniforme sui compatti in t .

◇

Notiamo infine il seguente risultato di uso frequente

Teorema 6.10

Sia a dissipativo e $\text{Ran}[(I - a)] = X$. Se X è riflessivo, allora $D(a)$ è denso in X .

◇

Dimostrazione

Sarà sufficiente dimostrare che

$$f \in X^*, \quad f(x) = 0, \quad \forall x \in D(a) \Rightarrow f = 0.$$

Procedendo come nella dimostrazione del teorema di Lumer-Philips, si vede che dalle ipotesi del teorema segue che $\text{Ran}[(\lambda I - a)] = X$.

Dunque per ogni $n \in \mathbb{N}$ ed ogni $x \in D(a)$ esiste x_n definito da

$$x = x_n - \frac{1}{n}ax_n. \tag{6.27}$$

Da (6.27) e da $x \in D(a)$ segue $x_n \in D(a^2)$, e moltiplicando per a entrambi i membri di (6.27)

$$ax = ax_n - \frac{1}{n}a^2x_n \quad \Rightarrow \quad ax_n = \left(I - \frac{1}{n}a\right)^{-1} ax.$$

Poiché a è dissipativo, si avrà $\|ax_n\| \leq \|ax\|$, ed essendo X riflessivo le palle in X sono compatte nella topologia di X^* . Pertanto esiste una sottosuccessione, che indichiamo ancora con ax_n , che converge. Sia y il limite. Per ipotesi, $f(x) = 0$, $\forall x \in D(a)$. Dunque

$$f(ax_n) = n f(x_n - x) = 0.$$

Prendendo il limite per $n \rightarrow \infty$ e ricordando che f è continua, si deduce $f(y) = 0$. Poiché a è chiuso, si ha $y = ax$. Dunque $f(ax) = 0$ e ne segue

$$f((I - a)x) = 0, \quad \forall x \in D(a).$$

Ma per ipotesi $\text{Ran}[(I - a)] = X$; ciò implica $f(z) = 0 \quad \forall z \in X$.

♡

6.1 SEMIGRUPPI DI CONTRAZIONE SU C^* -ALGEBRE

Abbiamo fatto finora la sola ipotesi sullo spazio X che sia di Banach. Vediamo adesso qualche ulteriore proprietà nel caso in cui X sia anche una C^* -algebra. Nel caso commutativo, ad esempio nello studio dei semigrupperi di contrazione su $L^\infty(R^n)$, è particolarmente importante la sottoclasse dei semigrupperi che preservano la positività. In corrispondenza di questi semigrupperi è possibile definire probabilità di transizione e processi stocastici.

Notiamo ad esempio che preserva la positività ogni semigruppero che si ottiene mediante flussi su un spazio di probabilità Ω . Ad esempio, se $\phi(\omega)$ è la soluzione di un'equazione differenziale stocastica, il semigruppero

$$L^\infty(\Omega) \ni f \mapsto f_t, \quad f_t(\omega) = f(\phi(-t, \omega))$$

preserva la positività.

Studieremo quindi la sottoclasse di semigrupperi di contrazione su una C^* -algebra che preservano la positività (lasciano invariante il cono degli elementi positivi). Gran parte dei risultati che discuteremo, ma non tutti, hanno una controparte nel caso in cui esista in X un cono *acuto* ($V \cap (-V) = 0$) che è lasciato invariante dal semigruppero.

Proposizione 6.11

Se \mathcal{A} è una C^* -algebra e α_t è un semigruppero che ha le proprietà, per ogni $a \in \mathcal{A}$, $t \in R^+$,

$$\alpha_t(x^*) = (\alpha_t(x))^*, \quad \alpha_t(x^*x) \geq \alpha_t(x^*)\alpha_t(x), \quad 6.28$$

allora il suo generatore Δ soddisfa

$$\Delta(x^*x) \geq x^*\Delta(x) + \Delta(x^*)x \quad 6.29$$

se x^*x , x^* , $x \in D(\Delta)$.

◇

Dimostrazione

Da (6.28) si ha

$$\begin{aligned} \alpha_t(x^*x) - x^*x &\geq \alpha_t^*(x)\alpha_t(x) - x^*x \\ &= \alpha_t^*(x)(\alpha_t(x) - x) + (\alpha_t^*(x) - x^*)x. \end{aligned}$$

Dividendo per t e passando al limite $t \rightarrow 0$ si ottiene (6.29) nell'ipotesi in cui tutti gli elementi che compaiono appartengano a $D(\Delta)$.

♡

Definizione 6.7 – Dissipazioni

L'operatore Δ su \mathcal{A} viene detto una *dissipazione* se vale (6.29).

◇

Esempio

Sia

$$\mathcal{A} \equiv L^\infty[0, 1], \quad \Delta \equiv \frac{d^2}{dx^2}.$$

Allora

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2}(\bar{f} f) &= \frac{d^2 \bar{f}}{dx^2} f + \bar{f} \frac{d^2 f}{dx^2} + 2 \frac{d \bar{f}}{dx} \frac{df}{dx} \\ &\geq \frac{d^2 \bar{f}}{dx^2} f + \bar{f} \frac{d^2 f}{dx^2} \end{aligned} \quad 6.30$$

◇

Notiamo che ogni derivazione è una dissipazione, mentre non è vera l'affermazione inversa.

Dalla (6.29) segue che il quadrato di una dissipazione è una dissipazione. Inoltre, se δ è una derivazione (o una dissipazione) per ogni intero N e per ogni scelta di a_1, \dots, a_N in \mathcal{A} si ha

$$[[\delta^2(a_i^* a_j)]]_N \geq [[\delta^2(a_i^*) a_j + a_i^* \delta^2(a_j)]]_N$$

dove il simbolo $[[\dots]]_N$ indica la matrice $N \times N$ i cui elementi sono esplicitamente indicati e la disuguaglianza va intesa nella C^* -algebra $\mathcal{A} \otimes B_N$, dove B_N è l'algebra delle matrici complesse $N \times N$.

Convienne introdurre una sottoclasse specifica di dissipazioni:

Definizione 6.8

Una dissipazione viene detta *N -positiva* se, per ogni scelta di A_k , $k = 1, \dots, N$, si ha nel senso delle matrici

$$[[\Delta(a_i^* a_j)]]_N \geq [[\Delta(a_i^*) a_j + a_i^* \Delta(a_j)]]_N \quad 6.31$$

e viene detta essere *completamente positiva* se (6.31) vale per ogni intero N .

◇

Nota 6.7

Nel caso dei semigruppri le corrispondenti condizioni sono

$$[[\alpha_t(a_i^* a_j)]]_N \geq [[\alpha_t(a_i^*) \alpha_t(a_j)]]_N.$$

♣

Come nel caso delle derivazioni, iniziamo con lo studio delle dissipazioni limitate.

Teorema 6.12 ([EHO79])

Sia Δ un'applicazione lineare chiusa e limitata su una C^* -algebra \mathcal{A} , e definiamo

$$e^{t\Delta} \equiv \sum_0^{\infty} \frac{t^n}{n!} \Delta^n, \quad t \in R^+.$$

Allora sono equivalenti:

- i) $\Delta(a^*a) \geq \Delta(a^*)a + a^*\Delta(a), \quad a \in \mathcal{A};$
- ii) $e^{t\Delta}(a^*a) \geq e^{t\Delta}(a^*)a + a^*e^{t\Delta}a, \quad t \in R^+.$

◇

Dimostrazione

La i) segue dalla ii) per differenziazione all'origine. Per dimostrare i) \rightarrow ii) utilizziamo un calcolo esplicito.

$$\begin{aligned} e^{t\Delta}(a^*a) - e^{t\Delta}(a^*)e^{t\Delta}(a) &= \int_0^t ds \frac{d}{ds} \left[e^{s\Delta} \left(e^{(t-s)\Delta}(a^*)e^{(t-s)\Delta}(a) \right) \right] \\ &= \int_0^t ds e^{s\Delta} \left\{ \Delta \left[e^{(t-s)\Delta}(a^*)e^{(t-s)\Delta}(a) \right] - \Delta \left[e^{(t-s)\Delta}(a^*) \right] e^{(t-s)\Delta}(a) \right. \\ &\quad \left. - e^{(t-s)\Delta}(a^*) \right\} \\ &= \Delta[e^{(t-s)\Delta}(a)] = \int_0^t ds e^{s\Delta} \Xi(t-s, a^*, a) \end{aligned}$$

dove $\Xi(t-s, a^*, a)$ è maggiore o uguale a zero per le ipotesi fatte.

Basta dunque dimostrare che $e^{s\Delta}$ preserva la positività. Questo è il contenuto della Proposizione seguente, che ha un interesse indipendente.

Proposizione 6.13

Se Δ è limitato, il punto ii) del teorema 6.12 implica che $e^{t\Delta}$ preserva la positività.

◇

Dimostrazione

Notiamo innanzitutto che per ogni stato ω si ha

$$a \in \mathcal{A}, \quad a \geq 0, \quad \omega(a) = 0 \quad \Rightarrow \quad \omega(\Delta(a)) \geq 0. \quad 6.32$$

Infatti, essendo Δ una dissipazione, ponendo $a = b^2$, si ha

$$\Delta(a) \geq \Delta(b)b + b\Delta(b).$$

Poniamo ora $\Delta(b) = z$. Dalla disuguaglianza di Schwarz $|\omega(z^*b)|^2 \leq \omega(z^*z)\omega(b^*b) = 0$ si deduce allora (6.32).

Inoltre, se per $a \in \mathcal{A}$ si ha $a \geq 0$, $ay = 0$ per qualche $y \in \mathcal{A}$, allora deve essere

$$y^* \Delta(a)y \geq 0. \quad 6.33$$

Infatti per ipotesi $\omega(y^*ay) = 0$, $\forall \omega$, dunque per (6.32) $\omega(y^* \Delta(a)y) \geq 0$, da cui segue (6.33). Notiamo ora che

$$e^{t\Delta} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(I - \frac{t}{n} \Delta \right)^{-n}.$$

Dunque per dimostrare che $e^{t\Delta}$ preserva la positività, è sufficiente dimostrarlo per $(I - \lambda\Delta)^{-1}$ per λ sufficientemente piccolo.

E' sufficiente fare la dimostrazione in ogni rappresentazione di \mathcal{A} in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} . Intendiamo pertanto nel seguito di questa dimostrazione che a sia un operatore chiuso e limitato su \mathcal{H} .

Per densità è sufficiente dimostrare che se $a^* = a$, e $(I - \lambda\Delta)a \geq 0$, allora $a \geq 0$. Sia $a = (a_+ - a_-)$ la decomposizione di a nella parte positiva e nella parte negativa. Ricordiamo dal teorema spettrale che per ogni operatore limitato autoaggiunto a esiste una trasformazione isometrica invertibile U tale che $U^{-1} a U$ risulti essere la moltiplicazione per una funzione misurabile f su uno spazio di misura (X, μ) .

Siano rispettivamente f_{\pm} le parti positiva e negativa della funzione f . Gli operatori a_{\pm} (parte positiva e parte negativa di a) sono definiti da $a_{\pm} = U^{-1} f_{\pm} U$. Per costruzione $a_+ a_- = 0$. Dunque, per (6.33) $a_- \Delta a_+ a_- \geq 0$.

Inoltre

$$0 \leq a_- (I - \lambda\Delta)(a) a_- = -a_-^3 - \lambda a_- \Delta(a_+) a_- + \lambda a_- \Delta(a_-) a_-.$$

Dunque $0 \leq -a_-^3 + \lambda a_- \Delta(a_-) a_-$, e da questo segue

$$\|a_-\|^3 \leq \lambda \|a_-\|^3 \|\Delta\|.$$

Scegliendo $\lambda < |\Delta|^{-1}$, si deduce $a_- = 0$. Questo termina la dimostrazione della proposizione 6.13 e quindi dell'implicazione ii) \rightarrow i) del teorema 6.12.

♡

Abbiamo visto che le due condizioni equivalenti del teorema 6.12 sono *sufficienti* affinché il semigruppone preservi la positività. È importante anche sapere se sono necessarie. A questo risponde il seguente teorema del quale non daremo la dimostrazione.

Teorema 6.14 ([EHO79])

Sia \mathcal{A} una C^* -algebra con unità e , e sia ω uno stato. Allora un operatore limitato Δ è il generatore di un semigruppone che preserva la positività se e solo se è soddisfatta una delle seguenti tre condizioni equivalenti tra loro:

- i) $a \in \mathcal{A}$, $a > 0$, $\omega(a) = 0 \Rightarrow \omega(\Delta(a)) \geq 0$;
- ii) $\Delta(a^2) - a\Delta(e) \geq \Delta(a)a + a\Delta(a)$, $\forall a = a^* \in \mathcal{A}$;
- iii) $\Delta(e) - u^*\Delta(e)u \geq \Delta(u^*)u + u^*\Delta(u)$, $\forall u \in \mathcal{A}$, $u^*u = uu^* = e$.

◇

Una parziale estensione di questo risultato al caso in cui Δ non è limitato si trova in [BrR81]. Una discussione molto dettagliata sui semigrupp che preservano la positività su spazi di Banach ordinati (che ammettono un cono proprio) si trova in [BaR84].

Nello studio degli operatori su spazi di Banach abbiamo definito gli *operatori dissipativi* E' interessante trovare condizioni sotto cui la dissipazione Δ definita su una C^* -algebra \mathcal{A} risulta essere un operatore dissipativo su \mathcal{A} come spazio di Banach. Un semplice risultato che dà una condizione *sufficiente* è il seguente:

Teorema 6.15

Condizione *sufficiente* affinché la dissipazione Δ sia un operatore dissipativo sullo spazio di Banach \mathcal{A} è che valgano le seguenti condizioni

- 1) $D(\Delta)$ è una sottoalgebra densa;
- 2) $e \in D(\Delta)$;
- 3) $a \geq 0$, $a \in D(\Delta) \Rightarrow \sqrt{a} \in D(\Delta)$.

◇

Nota 6.8

Se la dissipazione Δ vista come operatore sullo spazio di Banach \mathcal{A} è un operatore chiuso e limitato, come nel teorema 3.9, queste condizioni sono automaticamente soddisfatte. Inoltre ogni elemento $a \in \mathcal{A}$ è analitico, quindi la dissipazione Δ rappresenta un operatore massimale monotono ed è il generatore di un semigrupp di contrazione.

♣

Dimostrazione del teorema 6.15

Sia $a \in D(\Delta)$, $\eta \in F_{a^*a}$, $\|\eta\| = 1$. Definiamo $\eta_a(y) \equiv \eta(a^*y)$. Allora

$$\eta_a(a) = \eta(a^*a) = \|a\|^2, \quad \frac{\eta_a}{\|\eta_a\|} \in F_a.$$

Poiché η è uno stato, e Δ è una dissipazione,

$$2\Re \eta_a(\Delta(a)) = \eta(a^*\Delta(a)) + \eta(\Delta(a)a) \leq \eta(\Delta(a^*a)). \quad 6.34$$

Poniamo

$$y \equiv \sqrt{\|a\|^2 e - a^*a}, \quad y^2 = \|a\|^2 e - a^*a,$$

così che

$$\eta(y^2) = 0. \quad 6.35$$

Allora per l'ipotesi iii) si ha $y \in D(\Delta)$, mentre da (6.34) si ha

$$2\Re \eta_a(\Delta(a)) \leq \|a\|^2 \eta(\Delta(e)) - \eta(\Delta(y^2)).$$

Ma $\Delta(e) = \Delta(e^2) \geq 2e\Delta(e)$, quindi $\Delta(e) \leq 0$. Inoltre

$$\eta(\Delta(y^2)) \geq \eta(y\Delta(y)) + \eta(\Delta(y)y) = 0, \quad 6.36$$

come si deduce da (6.35) e dalla disuguaglianza di Schwarz. Ne concludiamo che $\Re(\eta_a(\Delta(a))) \leq 0$ e quindi Δ rappresenta un operatore dissipativo su \mathcal{A} . ♡

6.2 SEMIGRUPPI COMPLETAMENTE POSITIVI. ASPETTAZIONI CONDIZIONATE

Abbiamo visto che le derivazioni e i loro quadrati sono dissipazioni completamente positive. Nel caso commutativo ogni dissipazione è completamente positiva. Questo non è vero per dissipazioni su algebre noncommutative.

Conviene dare una definizione di positività per applicazioni di una C^* -algebra \mathcal{A} ad una C^* -algebra \mathcal{B} . Se $\mathcal{B} = \mathcal{A}$, si è nel caso discusso finora; se $\mathcal{B} = R$, le applicazioni sono stati. Se \mathcal{B} è una sotto- C^* -algebra di \mathcal{A} , si parlerà di *condizionamento*.

Per comprendere questa terminologia si consideri ad esempio il caso commutativo in cui \mathcal{A} è l'algebra delle funzioni su $T^2 \equiv T^1 \times T^1$, mentre \mathcal{B} è l'algebra delle funzioni della sola prima variabile. Allora ad esempio uno stato è descritto da

$$f \mapsto \int_{T^2} f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \quad : \mathcal{A} \rightarrow R.$$

Il condizionamento di f a una funzione solo della prima variabile è dato da

$$f \mapsto \tilde{f}(x_1) \equiv \int f(x_1, x_2) dx_2 \quad : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}.$$

Poniamo le seguenti definizioni:

Definizione 6.9

Un'applicazione lineare Φ di una C^* -algebra \mathcal{A} in una C^* -algebra \mathcal{B} è detta *N-positiva* se l'applicazione

$$\Phi \otimes I_n : \mathcal{A} \otimes M_N \rightarrow \mathcal{B} \otimes M_N \quad 6.37$$

è positiva. Essa è detta *fortemente N-positiva* se vale la disuguaglianza tra matrici

$$[[\Phi(a_i^* a_j)]]_N \geq [[\Phi(a_i^*) \Phi(a_j)]]_N, \quad \forall a_j \in \mathcal{A}, \quad j = 1, \dots, N. \quad 6.38$$

Un'applicazione è detta *completamente positiva* se (6.38) vale per ogni intero N . \diamond

Per le applicazioni valgono le inclusioni naturali date dal seguente

Teorema 6.16 ([Eva76])

Φ fortemente N -positiva $\Rightarrow \Phi$ N -positiva $\Rightarrow \Phi$ fortemente $(N - 1)$ -positiva. \diamond

Da questo teorema e dal teorema 6.9 si deduce come corollario la seguente proposizione.

Proposizione 6.17

Se Δ è un'applicazione limitata su una C^* -algebra \mathcal{A} , posto

$$e^{t\Delta} \equiv \sum \frac{t^n}{n!} \Delta^n, \quad t \in R^+,$$

le due affermazioni seguenti sono tra loro equivalenti:

- i) Δ è una dissipazione completamente positiva;
- ii) $e^{t\Delta}$ è un semigruppato di contrazioni completamente positivo.

\diamond

Nota 6.9

Conviene sottolineare qui il motivo per il quale i semigruppato completamente positivi hanno uno speciale interesse nelle applicazioni alla Meccanica Quantistica.

Ogni gruppo ad un parametro di automorfismi di una C^* -algebra \mathcal{A} è un semigruppato (se considerato solamente per $t \in R^+$) positivo, e dotato di un'estensione completamente positiva

$$a \otimes b \rightarrow \alpha_t(a) \otimes b, \quad b \in M_N,$$

che corrisponde a considerare N volte separatamente il sistema descritto dalla C^* -algebra \mathcal{A} , o anche al considerare il sistema in esame come non interagente con un sistema che agisce su M_N . Dunque, per sistemi isolati, la dinamica è descritta da semigruppato (o gruppi) completamente positivi il cui generatore è una dissipazione completamente positiva (o una derivazione).

Nello studio di sistemi non isolati, ci si può aspettare che la descrizione della dinamica si possa ottenere considerando l'effetto che produce sul sottosistema d'interesse l'evoluzione di un sistema dinamico complessivo isolato (ad esempio comprensivo di un bagno termico). Questa *riduzione* della dinamica ad un sottosistema si può rappresentare come un *condizionamento*.

Esplicitamente indichiamo con \mathcal{A} le osservabili del sistema complessivo, che supporremo isolato, e con α_t il gruppo ad un parametro di automorfismi che descrive la dinamica di \mathcal{A} .

Indichiamo con \mathcal{B} la sotto- C^* -algebra di \mathcal{A} che rappresenta il sistema che vogliamo studiare e con ι l'identificazione di \mathcal{B} come sottoinsieme di \mathcal{A} . Sia γ il condizionamento $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}$ (un'applicazione completamente positiva). Sia γ che α_t sono applicazioni completamente positive, e la composizione preserva questa proprietà. Quindi l'evoluzione del sottosistema \mathcal{B} è descritta ad ogni istante t dall'applicazione completamente positiva $\mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ data da

$$T_t \equiv \gamma \alpha_t \iota, \quad t \in R^+. \quad 6.39$$

Non si tratta in generale di un semigruppato, ma lo può essere in un opportuno limite (ad esempio quando $\mathcal{A} = \mathcal{B} \otimes \mathcal{D}$, e si scelgono opportunamente \mathcal{D} e l'interazione e si riscalda opportunamente il tempo).

Torneremo in seguito su questo problema; qui ci interessa solamente mettere in luce l'origine dell'interesse in fisica per le applicazioni completamente positive. Per uno studio dettagliato dei semigruppato completamente positivi si può consultare [Dav73, Dav74, ChE79, Lin76].



Va peraltro notato che è sempre vero l'inverso, cioè che ogni semigruppato di contrazione di una C^* -algebra \mathcal{A} che preserva la positività può essere espresso mediante condizionamento di un gruppo ad un parametro di automorfismi di una C^* -algebra più grande. Questo è il contenuto del teorema di Stinespring.

Teorema 6.18 ([Sti55])

Sia $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ una C^* -algebra con unità, sia Φ un'applicazione di \mathcal{A} in sé, completamente positiva. Allora esiste uno spazio di Hilbert \mathcal{K} e un'applicazione limitata $V : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$ tale che

$$\Phi(a) = V^* \pi_S(a) V, \quad 6.40$$

dove π_S è una rappresentazione di \mathcal{A} in $\mathcal{B}(\mathcal{K})$.



Nota 6.10

La notazione $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ può sembrare superflua; infatti ogni C^* -algebra ha una rappresentazione fedele in termini di operatori in un opportuno spazio di Hilbert. Notiamo però che lo spazio di rappresentazione \mathcal{K} entra nella costruzione dell'estensione, e si ottengono estensioni diverse per diverse scelte di \mathcal{K} . Vedremo che la rappresentazione di Stinespring è unica a meno di isometrie parziali tra gli spazi costruiti nel processo di dilatazione.



Dimostrazione del Teorema 6.18

Indichiamo con ξ_k e η_i due basi ortonormali in \mathcal{H} e con a_k, b_i due successioni di elementi di \mathcal{A} dense in \mathcal{A} . Consideriamo lo spazio $\mathcal{A} \otimes \mathcal{H}$ in cui definiamo la

forma sesquilineare

$$\langle \sum_i a_i \otimes \xi_i, \sum_k b_k \otimes \eta_k \rangle \equiv \sum_{i,k} (\Phi(b_k^* a_i) \xi_i, \eta_k) \quad 6.41$$

dove le somme sono su un numero finito di indici. Questa forma quadratica è positiva perché l'applicazione Φ è completamente positiva. È facile verificare che la forma è chiudibile e la sua chiusura definisce un prodotto scalare (perché per ipotesi l'applicazione Φ è completamente positiva).

Definiamo un'applicazione Ψ da \mathcal{A} a volare nello spazio delle applicazioni lineari su $\mathcal{A} \otimes \mathcal{H}$, mediante

$$\Psi(a) \sum_i b_i \otimes \eta_i = \sum_i (a b_i) \otimes \eta_i.$$

Si può facilmente vedere che per ogni $\xi \in \mathcal{A} \otimes \mathcal{H}$ si ha

$$(\Psi(a)\xi, \Psi(a)\xi) \leq \|A\|^2(\xi, \xi).$$

Sia \mathcal{N} il sottospazio nullo per il prodotto scalare definito da (6.41). Definiamo \mathcal{K} come lo spazio di Hilbert ottenuto per completamento di $(\mathcal{A} \otimes \mathcal{H})/\mathcal{N}$ nel prodotto scalare definito dalla forma quadratica (6.41).

Definiamo ancora V nel modo seguente

$$V\xi \equiv I \otimes \xi + \mathcal{N}.$$

Per costruzione si tratta di un'isometria di \mathcal{H} in \mathcal{K} .

Sia π_S la rappresentazione di \mathcal{A} in \mathcal{K} data da

$$\pi_S(a) \left(\sum b_k \otimes \eta_k \right) = \sum a b_k \otimes \eta_k. \quad 6.42$$

Per calcolo diretto si verifica che

$$\Phi = V^* \pi_S V.$$

♡

Il teorema di Stinespring può essere riformulato in questo modo: ogni applicazione completamente positiva T tra due C^* -algebre \mathcal{A} , \mathcal{A}_0 può essere descritta come composizione di due naturali applicazioni completamente positive: uno *-omeomorfismo (dilatazione) π_S di \mathcal{A} in $\mathcal{B}(\mathcal{K})$, seguito da una compressione sulla C^* -algebra \mathcal{A}_0

$$T(a) = V^* \pi_S(a) V.$$

Chiameremo *rappresentazione di Stinespring* questa tripla $\{\pi_S, V, \mathcal{K}\}$.

La rappresentazione di Stinespring è unica a meno di isometrie parziale tra gli spazi costruiti nel processo di dilatazione. Infatti dalla costruzione segue che

se $\{\pi_S, V, \mathcal{K}\}$ e $\{\pi'_S, V', \mathcal{K}'\}$ sono due rappresentazioni di Stinespring, esiste un'isometria parziale $U : \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}'$ tale che valga

$$U V = V', \quad U^* V' = V, \quad U \pi_S(a) = \pi'_S(a) U.$$

La rappresentazione è detta *minimale* se l'insieme

$$\{\pi_S(a) V \phi, a \in \mathcal{A}, \phi \in \mathcal{H}\}$$

è denso in \mathcal{K} . Due rappresentazioni minimali dell'applicazione completamente positiva T sono tra loro unitariamente equivalenti.

Il teorema che segue, dovuto ad Arveson, può essere considerato un corollario del teorema di Stinespring; si tratta di una generalizzazione del teorema di Hahn-Banach al caso di applicazioni completamente positive. Si noti che, se lo spazio di Hilbert \mathcal{H} ha dimensione (complessa) uno, l'applicazione Φ è uno stato.

Teorema 6.19 (Arveson)

Sia \mathcal{A} una sotto- C^* -algebra di una C^* algebra \mathcal{B} , con $e \in \mathcal{A}$. Ogni applicazione completamente positiva $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow B(\mathcal{H})$ può essere estesa ad un'applicazione completamente positiva $\Phi_1 : \mathcal{B} \rightarrow B(\mathcal{K})$ tale che $\Phi_1/\mathcal{A} = \Phi$.

◇

Gli stati di una C^* -algebra sono applicazioni $\mathcal{A} \rightarrow C$ completamente positive. È quindi naturale cercare di generalizzare alle applicazioni completamente positive la definizione di *funzione distanza* introdotta da Bures per gli stati di una W^* -algebra. Questa a sua volta è la generalizzazione al caso non-commutativo della distanza tra due misure di probabilità.

Definizione 6.10 – distanza di Bures

Sia \mathcal{A} una W^* -algebra, Σ l'insieme dei suoi stati normali π una sua rappresentazione mediante operatori sullo spazio di Hilbert \mathcal{H} . Per ogni $\rho \in \Sigma$ definiamo l'insieme $S_\pi(\rho)$

$$S_\pi(\rho) \equiv \{x \in \mathcal{H} : (x, \pi(a)x) = \rho(a), \quad \forall a \in \mathcal{A}\}. \quad 6.43$$

Quindi il vettore x induce lo stato ρ nella rappresentazione Π .

Se $S_\pi(\rho)$ oppure $S_\pi(\tau)$ sono vuoti, definiamo $d_\pi(\rho, \tau) = [\rho(I)\tau(I)]^{\frac{1}{2}}$. Altrimenti definiamo

$$d_\pi(\rho, \tau) = \inf \{\|x - y\|, \quad x \in S_\pi(\rho), \quad y \in S_\pi(\tau)\}. \quad 6.44$$

La *distanza di Bures* $d(\rho_1, \rho_2)$ tra due stati ρ_1 e ρ_2 allora per definizione

$$d(\rho, \tau) = \inf_{\pi \in \Lambda} d_\pi(\rho, \tau).$$

Introducendo

$$\xi_\pi(\rho, \tau) = \sup \{ |(x, y)| ; x \in S_\pi(\rho), \quad y \in S_\pi(\tau) \}, \quad \xi(\rho, \tau) = \inf_{\pi \in \Lambda} \xi_\pi(\rho, \tau),$$

abbiamo allora

$$d(\rho, \tau)^2 = \rho(I) + \tau(I) - 2\xi(\rho, \tau). \quad 6.45$$

◇

Nota 6.11

La distanza di Bures ha due applicazioni principali:

- 1) Sia data una collezione di W^* -algebre semi-finite $\{W_i, i \in \mathcal{I}\}$, e per ciascuna di esse uno stato normale ρ_i . Definiamo $\mathcal{A} = \otimes_{i \in \mathcal{I}} (\mathcal{A}_i, \rho_i)$. Definiamo su \mathcal{A} uno stato normale mediante

$$\rho(a) = \otimes_{i \in \mathcal{I}} \rho_i(a_i), \quad a \in \mathcal{A}. \quad 6.46$$

Supponiamo ora che per ciascun valore dell'indice i esista un isomorfismo ϕ_i dell'algebra \mathcal{A}_i su un'altra algebra \mathcal{B}_i .

Allora un isomorfismo tra $\otimes (\mathcal{A}_1, \rho_1)$ e $\otimes (\mathcal{B}_1, \tau_1)$ esiste se e solo se

$$\sum [d_{\phi_i}(\rho_i, \tau_i)]^2 < +\infty.$$

- 2) Se ciascun algebra \mathcal{A}_i è un fattore finito con traccia normalizzata τ_i allora $\otimes (\mathcal{A}_i, \rho_i)$ è finito se e solo se

$$\sum_i [d(\rho_i, \tau_i)]^2 < +\infty.$$

♣

Definizione 6.11 – distanza tra due applicazioni completamente positive

La distanza tra due applicazioni completamente positive $T_i : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$ è per definizione

$$d_\pi(T_1, T_2) \equiv \inf_\pi d_\pi(T_1, T_2), \quad d_\pi(T_1, T_2) = \inf \{ \|V_1 - V_2\|, V_1 \in S(T_1, \pi) \}, \quad 6.47$$

dove, per un'applicazione completamente positiva T , l'insieme $S(T, \pi)$ è definito come l'insieme di tutti gli operatori $V : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$ tali che $\{\pi, V\mathcal{K}\}$ dilati T . Se uno di questi insiemi è vuoto, $d_\pi = +\infty$.

◇

Ricordiamo che per applicazioni lineari T tra spazi normati X e Y la norma $\|T\|$ è definita come $\sup_{\|x\| \leq 1} \|Tx\|$. Per le applicazioni completamente positive, conviene introdurre un norma associata al prodotto $T \otimes I_n$, $n = 1, 2, \dots$. Definiamo la norma mediante

$$\|T\|_{c.l.} = \sup_{n \in \mathbb{N}} \|T \otimes I_n\|$$

dove I_n è l'applicazione identità sulle matrici $N \otimes N$. Le applicazioni per le quali $\|T\|_{c.l.}$ è finita vengono dette *completamente limitate*.

Ogni applicazione completamente positiva è completamente limitata, e si ha

$$\|T\|_{c.l.} = \|T\| = \|T(I_{\mathcal{A}})\| = \|V^* V\| = \|V^2\|,$$

dove V è la dilatazione di Stinespring per T .

Ovviamente $\|T\| \leq \|T\|_{c.l.}$. Per algebre abeliane si ha uguaglianza. Si può inoltre dimostrare che esiste un rappresentazione π e due dilatazioni di Stinespring $V_i : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$ tali che valga

$$\|V_1 - V_2\| = d_{\pi}(T_1, T_2). \quad 6.48$$

Se π_i , V_i , \mathcal{K}_i sono dilatazioni minimali per le applicazioni completamente positive T_1 , T_2 , si può scegliere $\pi = \pi_1 \oplus \pi_2$.

Per completezza, diamo anche la definizione di distanza per applicazioni completamente positive tra C^* -algebre, non necessariamente realizzate concretamente mediante operatori su opportuni spazi di Hilbert.

Definizione 6.12

Date due C^* -algebre \mathcal{A} e \mathcal{B} , definiamo la distanza (di Bures) d tra due applicazioni completamente positive T_1 e T_2 come

$$d(T_1, T_2) \equiv \inf_{\hat{T}} \left\| \left[\hat{T}_{1,1}(I_{\mathcal{A}}) + \hat{T}_{2,2}(I_{\mathcal{A}}) - \hat{T}_{1,2}(I_{\mathcal{A}}) - \hat{T}_{2,1}(I_{\mathcal{A}}) \right] \right\|^{\frac{1}{2}}. \quad 6.49$$

L'estremo inferiore è preso su tutte le estensioni completamente positive $\hat{T} : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}(C^2) \simeq \mathcal{M}_2(\mathcal{B})$ in cui la matrice 2×2 che rappresenta \hat{T} è composta da applicazioni completamente positive tali che $\hat{T}_{i,i} = T_i$.

◇

Con questa definizione di distanza per le applicazioni completamente positive il risultato precedente di continuità per gli stati può essere generalizzato al caso in cui l'immagine sia un'algebra iniettiva.

Ricordiamo che una C^* -algebra \mathcal{B} è detta *iniettiva* se per ogni C^* -algebra \mathcal{A} e ogni sottoalgebra \mathcal{S} di operatori isomorfa ad una sottoalgebra di \mathcal{A} , ogni applicazione completamente positiva da \mathcal{S} in \mathcal{B} può essere estesa ad un'applicazione completamente positiva da \mathcal{A} in \mathcal{B} .

Un'algebra di operatori è iniettiva se e solamente se esse è *iperfinita*, cioè è la chiusura di una successione infinita crescente di algebre finito-dimensionali.

Si può dimostrare che un'algebra \mathcal{S} concretamente realizzata mediante operatori su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} è iniettiva se esiste un'applicazione completamente positiva $P : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{S}$ tale che $P(a) = a$ per tutti gli elementi $a \in \mathcal{S}$. In questo caso l'applicazione P viene detta *aspettazione condizionata completamente positiva*.

Ulteriori dettagli e risultati sulle applicazioni completamente positive possono essere trovati in [Pau02]

Una particolare classe di applicazioni completamente positive sono le aspettazioni condizionate, che abbiamo visto essere importanti nella discussione di sistemi aperti per analizzare le osservabili di sottosistemi.

Definizione 6.13 – aspettazione condizionata

Sia \mathcal{A} una C^* -algebra, \mathcal{B} un'algebra di von Neumann, \mathcal{C} una sotto- C^* -algebra di \mathcal{A} .

Sia $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}$ normalizzata (cioè $\Phi(e) = e$) positiva, tale che la chiusura debole di $\Phi(\mathcal{C})$ sia \mathcal{B} , e inoltre $\mathcal{C} \rightarrow \Phi(\mathcal{C})$ sia un omeomorfismo. Allora Φ è detta *proiezione di \mathcal{A} su \mathcal{B} relativamente a \mathcal{C}* . Se $\mathcal{C} = \mathcal{B}$, l'applicazione Φ è detta *aspettazione condizionata*.

◇

Nel caso (commutativo) di algebre di funzioni misurabili le applicazioni positive sono aspettazioni condizionate. Un risultato analogo *non* vale nel caso non-commutativo, neppure se l'applicazione è completamente positiva. Ma è vero al contrario che ogni aspettazione condizionata è completamente positiva anche nel caso noncommutativo.

Nota 6.12

Nel caso commutativo la formulazione più frequentemente utilizzata è la seguente:

Sia X, \mathcal{B}, μ uno spazio di misura, \mathcal{B} la collezione degli insiemi misurabili, \mathcal{B}_∞ una sotto- σ -algebra di \mathcal{B} , f una funzione limitata misurabile rispetto a \mathcal{B} .

Il condizionamento di f rispetto a \mathcal{B}_∞ , che denotiamo con il simbolo f_1 , è l'unica funzione \mathcal{B}_∞ -misurabile tale che, per ogni funzione $g \in L^1(\mathcal{B}_\infty, \mu)$, si abbia

$$\int gf \, d\mu = \int gf_1 \, d\mu. \quad 6.50$$

♣

Con queste notazioni si ha nel caso generale il seguente teorema

Teorema 6.20 (Takesaki [Tak72])

Se $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}$ è un'aspettazione condizionata, allora Φ è completamente positiva, e per ogni $a \in \mathcal{A}$, $b_1, b_2 \in \mathcal{B}$ si ha

$$\Phi(b_1 a b_2) = b_1 \Phi(a) b_2. \quad 6.51$$

◇

Nel caso di derivazioni su una C^* -algebra abbiamo citato alcuni risultati di classificazione, in particolare condizioni sotto le quali sono interne. Non esistono classificazioni così complete nel caso delle dissipazioni; si hanno solamente risultati parziali. Ne diamo alcuni particolarmente interessanti.

Teorema 6.21 ([ChE79])

Sia Δ $*$ -lineare e limitata sulla C^* -algebra \mathcal{A} , e sia $e^{t\Delta}$ definito dallo sviluppo in serie in t . Sia \mathcal{A} concretamente realizzata come sottoalgebra chiusa di $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ e sia \mathcal{A}^- la sua chiusura debole.

Allora sono equivalenti:

- i) $e^{t\Delta}$ è completamente positivo per $t \in \mathbb{R}^+$;
- ii) Esiste $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}^-$ completamente positivo, e $K \in \mathcal{A}^-$ tali che

$$\Delta(a) = Ka + aK^* - \Phi(a). \quad 6.52$$

In particolare, l'operatore Δ è una dissipazione completamente positiva se e solo se ammette la decomposizione (6.52) con

$$K + K^* - \Phi(e) \leq 0. \quad 6.53$$

◇

Nota 6.13

Verifichiamo che entrambe le condizioni sono soddisfatte se Δ è il quadrato di una derivazione.

Per verificare i), notiamo che, se $\Delta = \delta^2$, con δ una derivazione, per ogni $N \in \mathbb{Z}$ e ogni scelta di a_1, \dots, a_N si ha

$$\delta^2(a_i^* a_j) = \delta^2(a_i^*) a_j + a_i^* \delta^2(a_j) + 2\delta(a_i^*) \delta(a_j).$$

La matrice di elemento (i,j) dato da $\delta(a_i^*) \delta(a_j)$ è una matrice positiva. Infatti per ogni scelta di $\eta \equiv \{\eta_k\}$ si ha

$$\sum_{i,j} \bar{\eta}_i \delta(a_i^*) \delta(a_j) \eta_j = \left| \sum_i \delta(a_i) \eta_i \right|^2 \geq 0.$$

Per verificare ii), notiamo che se δ^2 è limitata e chiusa, anche δ lo è, e quindi esiste $h = h^*$, $h \in \mathcal{A}^-$ tale che $\delta(a) = [h, a]$. Ma allora

$$\delta^2(a) = [h[h, a]] = h^2 a + ah^2 - 2hah.$$

Se definiamo $K = h^2$, risulta verificata la (6.53) con $\Phi(a) = 2hah$. Inoltre si ha

$$K + K^* - \Phi(e) = 2h^2 - 2h^2 = 0. \quad 6.54$$

La condizione $\Phi(e) = 0$ è necessaria ma non sufficiente affinché Δ sia il quadrato di una derivazione.

♣

Dimostrazione del teorema 6.21

ii) \rightarrow i): L'applicazione Φ si estende per continuità ad un'applicazione completamente positiva $\mathcal{A}^- \rightarrow \mathcal{A}^-$. Posto

$$\Delta = \Delta_1 + \Delta_2, \quad \Delta_1(a) = Ka + aK^*, \quad \Delta_2(a) = \Phi(a),$$

si nota che $e^{t\Delta_1}(a) = e^{tK}a(e^{tK})^*$ è completamente positivo per costruzione e

$$e^{t\Delta_2}(a) = \sum_0^\infty \frac{t^n}{n!} \Phi^n(a), \quad t \geq 0$$

è una applicazione completamente positiva come serie convergente di tali applicazioni. D'altra parte

$$e^{t\Delta}(a) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{t}{n}\Delta_1} e^{\frac{t}{n}\Delta_2} \right)^n (a),$$

e questa applicazione è completamente positiva perché limite uniforme di applicazioni completamente positive.

i) \rightarrow ii) Per questa parte della dimostrazione utilizziamo il seguente teorema di Christensen ed Evans [ChE79], una generalizzazione del teorema di Kadison.

Teorema 6.22

Sia \mathcal{A} una C^* -algebra, $\mathcal{A} \in B(\mathcal{H})$, Π una rappresentazione di \mathcal{A} su di uno spazio di Hilbert \mathcal{K} , Δ un'applicazione lineare $\mathcal{A} \rightarrow L(\mathcal{H}, \mathcal{K})$ tale che

$$\Delta(a)^* \Delta(b) \in \mathcal{A}^-, \quad \Delta(ab) = \Pi(a)\Delta(b) + \Delta(a)\Pi(b).$$

Allora esiste $h \in \{\Delta(a)b, a, b \in \mathcal{A}^-\}$ tale che

$$\Delta(a) - ha - \Pi(a)h = 0, \quad \forall a \in \mathcal{A}. \quad 6.55$$

◇

Utilizzando questo teorema dimostriamo i) \rightarrow ii).

Notiamo innanzitutto che da i) segue che esistono uno spazio di Hilbert \mathcal{K} , una rappresentazione $\Pi : \mathcal{A} \rightarrow B(\mathcal{K})$ e un'applicazione lineare $\mathcal{A} \rightarrow L(\mathcal{H}, \mathcal{K})$ tali che

$$\begin{aligned} (V(a^*))^* \Pi(b)V(c) &= \Delta(ab)c + a\Delta(bc) - a\Delta(b)c - \Delta(abc), \\ V(ab) &= \Pi(a)V(b), \\ (\Pi(\mathcal{A})V(a)\mathcal{H})^- &= \mathcal{K}. \end{aligned} \quad 6.56$$

Infatti, posto

$$D(a, b, c) \equiv \Delta(ab)c + a\Delta(bc) - a\Delta(b)c - \Delta(abc),$$

si ha che

$$(a_1, a_2) \times (b_1, b_2) \in (\mathcal{A} \times \mathcal{A}) \times (\mathcal{A} \times \mathcal{A}) \mapsto D(a_1^*, a_2^* b_2, b_1)$$

è un'applicazione positiva (poiché Δ è una dissipazione completamente positiva). Per il teorema di Stinespring, esistono $\{\mathcal{K}, \Pi, V\}$ tali che

$$D(a, b, c) = (V(a^*))^* \Pi(b) V(c). \quad 6.57$$

Da (6.54) segue che l'operatore identità $I \in B(\mathcal{K})$ appartiene alla chiusura debole di $\Pi(\mathcal{A})$. Dunque prendendo una successione b_n tale che $\Pi(b_n) \rightarrow I$ si ha

$$V(a^*)^* V(b) \in \mathcal{A}^-.$$

Dal teorema 6.22 segue allora che esiste $h \in \mathcal{A}^-$ tale che sia

$$V(a) = ha - \Pi(a)h, \quad \forall a \in \mathcal{A}.$$

Definiamo

$$\Phi(a) \equiv h^* \Pi(a) h : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}^-,$$

e dimostriamo che esiste $K \in \mathcal{A}^-$ tale che

$$\Delta(a) + \Phi(a) = Ka + aK^*.$$

Si ha, da (6.57)

$$\begin{aligned} D(a, b, c) &= (ah^* - h^* a \Pi(a)) \Pi(b) (hc - \Pi(c)h) \\ &= \Phi(abc) = a\Phi(b)c - a\Phi(bc) - \Phi(ab)c. \end{aligned} \quad 6.58$$

Definiamo ora $p \equiv \phi(e)$, $q \equiv D(e)$, dove e è l'identità dell'algebra. Allora, posto $s \equiv (p + q)/2$, e $\{s, b\} \equiv sb + bs$,

$$\begin{aligned} \Delta(ab) + \Phi(ab) - a[\Delta(b) + \Phi(b)] - [\Delta(a) + \Phi(a)]b - aqb - apb = \\ -2sab = \{s, ab\} - a\{s, b\} - \{s, a\}b. \end{aligned} \quad 6.59$$

Ne consegue che

$$\delta(a) \equiv \Delta(a) + \Phi(a) - \{s, a\} \quad 6.60$$

è una *-derivazione. Per il teorema di Kadison-Sakai esiste $b = b^* \in \mathcal{A}^-$ tale che $\delta(a) = i[b, a]$.

Quindi ii) è soddisfatta con $K = a + ib$. Questo conclude la dimostrazione del teorema 6.21.

♡

Nel caso di applicazioni normali si ottengono risultati più forti.

Denotiamo con CP le applicazioni completamente positive di una W^* -algebra \mathcal{A} e con CP_n il sottoinsieme di quelle normali. Per CP_n si ha il seguente miglioramento del teorema di Stinespring.

Teorema 6.23 (Kraus [Kra70])

Se $\Phi \in CP_n$, allora esistono $V_i \in B(\mathcal{H})$, $\sum V_i^* V_i \in B(\mathcal{H})$ tali che

$$\Phi(a) = \sum V_i^* a V_i, \quad \forall a \in \mathcal{A}.$$

◇

Le applicazioni CP_n possono essere sollevate a strutture prodotto.

Lemma 6.24

Se Φ_1, Φ_2 sono CP_n , esiste una applicazione CP_N tale che

$$\Phi(a \otimes b) = \Phi_1(a) \otimes \Phi_2(b), \quad a \in B(\mathcal{H}_1), b \in B(\mathcal{H}_2).$$

◇

Notiamo infine che ponendo $b \equiv e$, da $\Delta(e) = 0$ si deduce che l'applicazione $D(a, b, c)$ definita precedentemente dà una misura della dissipatività dell'operatore Δ . Più precisamente, definendo

$$\partial(\Delta) = \Delta(a^* a) - a^* \Delta(a) - \Delta(a^*) a, \quad 6.61$$

dai teoremi precedenti segue che $\partial(\Delta)$ definisce Δ a meno di una derivazione. Infatti

$$\partial(\Delta) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta(a) = i[h, a], \quad h = h^*, \quad h \in \mathcal{A}^-.$$

Esempi di dissipazioni completamente positive e limitate sono le seguenti

$$\Delta(a) \equiv bab - \frac{1}{2}(b^2 a + ab^2),$$

o anche

$$\Delta(a) = U^* a U - a, \quad U^* U = I = U U^*$$

(si noti che, se l'algebra è commutativa, in entrambi i casi si ha $\Delta(a) = 0$; questo è coerente con il fatto che non esistono dissipazioni limitate su un'algebra commutativa).

Si può notare anche che, in accordo con i teoremi precedenti, in entrambi gli esempi l'azione dei generatori ha la forma

$$L(a) = \sum_1^n V_i^* a V_i - \frac{1}{2} \sum_i^n [V_i^* V_i a - a V_i^* V_i] + i[h, a] \quad 6.62$$

(in entrambi i casi si ha $h = 0$).

APPENDICE 6A: APPROSSIMAZIONE MARKOVIANA

Abbiamo visto che la dinamica dei sistemi *aperti*, cioè la dinamica di una parte del sistema complessivo che si ottiene trascurando l'evoluzione della parte rimanente, non è in generale descritta da semigrupp. Infatti, le equazioni che si ottengono eliminando alcuni gradi di libertà attraverso la soluzione delle equazioni del moto sono in generale equazioni integrali con termini di ritardo e la soluzione non può essere ottenuta prendendo come solo dato iniziale al tempo t_0 la configurazione del sottosistema.

L'evoluzione del sottosistema non soddisfa pertanto le condizioni richieste per essere di tipo Markov.

E' interessante notare tuttavia che l'evoluzione di un sistema quantistico "aperto" può ammettere una descrizione markoviana in un opportuno limite che chiameremo *limite di accoppiamento debole*. Diamo in questa appendice gli elementi fondamentali di questa approssimazione; per maggiori dettagli ed esemplificazioni di può consultare [Dav74].

Consideriamo un sistema quantistico S_1 in interazione con un altro sistema quantistico S_2 ; supponiamo che S_1 abbia un numero finito di gradi di libertà e sia descrivibile in uno spazio di Hilbert \mathcal{H}_1 . Il sistema S_2 può avere un numero infinito di gradi di libertà ed è descritto in uno spazio di Hilbert \mathcal{H}_2 . Denotiamo con P_1 una proiezione su \mathcal{H}_1 dello spazio di rappresentazione totale $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ e utilizziamo la notazione $P_2 = I - P_1$.

Supponiamo che l'evoluzione libera del sistema sia rappresentata da una famiglia fortemente continua \tilde{U}_t di isometrie che lasciano $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ separatamente invarianti. Indichiamo con K il generatore di questa famiglia. Supponiamo che l'interazione tra i due sottosistemi sia descritto da un operatore limitato A e indichiamo con U_t^λ il semigrupp generato da $K + \lambda A$.

Utilizziamo la notazione $A_{i,j} \equiv P_i A P_j$ e supponiamo che $A_{1,1} = 0$ e che $A_{2,2}$ sia simmetrico. Indichiamo con U_t^λ il gruppo ad un parametro generato da $K + \lambda A_{2,2}$ e notiamo che questo gruppo lascia \mathcal{H}_1 invariante.

Se indichiamo con V_t^λ il gruppo generato da $K + \lambda A$, dalla formula di Duhamel segue

$$V_t^\lambda = U_t^\lambda + \lambda \int_0^t U_{t-s}^\lambda (A_{1,2} + A_{2,1}) V_s^\lambda ds. \quad 6A.1$$

Iterando una volta ancora e ponendo $W_t^\lambda \equiv P_1 V_t^\lambda P_1$, otteniamo come equazione in $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$ (notare che abbiamo assunto $A_{1,1} = 0$)

$$W_t^\lambda = U_t P_1 + \lambda^2 \int_{s=0}^t \int_{s'=0}^s U_{t-s}^\lambda A_{1,2} U_{s-s'}^\lambda A_{2,1} W_{s'} ds ds'. \quad 6A.2$$

La doppia integrazione è indice di un termine che contiene memoria e quindi rende impossibile la proprietà di semigrupp.

Poiché assumiamo che λ sia molto piccolo, ci aspettiamo (lemma di Gromwall) che l'integrale sia limitato per t di ordine di grandezza λ^{-2} . Poniamo

$$Y_t^\lambda \equiv U_t^* W_t^\lambda, \quad 6A.3$$

e introduciamo la nuova variabile d'integrazione $\tau = \lambda^{-2}s$. La (6A.2) assume la forma

$$Y_t^\lambda = P_1 + \int_0^t H(\lambda, t, \tau) Y_\tau^\lambda d\tau, \quad 6A.4$$

dove

$$H(\lambda, t, \tau) = U_{\lambda^{-2}\tau}^* K(\lambda, t) U_{\lambda^{-2}\tau},$$

$$K(\lambda, t) \equiv \int_0^{\lambda^{-2}t} U_\tau^* A_{1,2} U_\tau A_{2,1} d\tau \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1).$$

Quest'integrale non converge in norma quando $\lambda \rightarrow 0$. Se \mathcal{H}_1 ha dimensione finita (o più in generale se $P_1 U_t$ ha spettro discreto) si può ottenere in circostanze opportune convergenza forte utilizzando la *convergenza in media*.

Se $\{Q_m\}$ è la famiglia dei proiettori spettrali di $P_1 K$ (non necessariamente unidimensionali) e $\{\alpha_m\}$ i suoi autovalori ($\alpha_m \neq \alpha_n$ se $m \neq n$), si ha

$$P_1 U_t = \sum_\alpha Q_\alpha e^{i\omega_\alpha t}.$$

Per ogni operatore limitato $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$ definiamo

$$\tilde{B} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \int_{-t}^t U_{-s}^0 B U_s^0 ds \quad 6A.5$$

dove abbiamo indicato con U_s^0 la restrizione di U_s ad \mathcal{H}_1 . Con queste notazioni vale il seguente teorema

Teorema 6A.1 [Dav73, Dav74]

Sia \mathcal{H}_1 finito-dimensionale. Supponiamo che per ogni $\tau_1 > 0$ si abbia $\|K(\lambda, t)\| \leq C$ per $|\lambda| < 1$ e $0 \leq \tau \leq \tau_1$. Se esiste $K \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$ tale che

$$s\text{-}\lim_{\lambda \rightarrow 0} (K(\lambda, \tau) - K) = 0 \quad 6A.6$$

uniformemente in $0 \leq \tau \leq \tau_1$, allora per ogni $\phi \in \mathcal{H}_1$ si ha

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \left\| (Y_\tau^\lambda - e^{i\tilde{K}\tau})\phi \right\|_2 = 0 \quad 6A.7$$

e inoltre, come operatori su \mathcal{H}_1 , si ha

$$\tilde{K} U_t = U_t \tilde{K}$$

uniformemente in $0 \leq t \leq \tau_1$.

◇

Dimostrazione

Sia Ξ lo spazio di Banach delle funzioni continue a valori operatori limitati su \mathcal{H}_1 . Definiamo le applicazioni $\Xi \rightarrow \Xi$

$$(H_\lambda f)(\tau) \equiv \int_0^\tau H(\lambda, \tau - \sigma, \tau) f(\sigma) d\sigma, \quad 6A.8$$

$$(\tilde{H}_\lambda f)(\tau) \equiv \int_0^\tau U_{\lambda^{-2}\sigma}^* K U_{\lambda^{-2}\sigma} f(\tau) d\sigma = \sum_{\alpha, \beta} Q_\alpha Q_\beta \int_0^\tau e^{i(\omega_\alpha - \omega_\beta)\lambda^{-2}\sigma} f(\sigma) d\sigma. \quad 6A.9$$

Ricordando che gli autovalori sono tutti distinti, uniformemente in $0 \leq \tau \leq \tau_1$,

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \tilde{H}_\lambda = \int_0^\tau \tilde{K} f(\tau) d\tau.$$

Segue dalle ipotesi del teorema che la funzione $H_\lambda(f)$ converge fortemente alla funzione

$$Kf(\tau) = \int_0^\tau \tilde{K} f(\sigma) d\sigma.$$

Ricordiamo ora che per ogni $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$ la funzione $f_\lambda \equiv Y_\tau^\lambda$ è soluzione di

$$f_\lambda = g + H_\lambda f_\lambda, \quad g(\tau) = A, \quad 0 \leq \tau \leq \tau_1,$$

e che $f_t = e^{Kt} A$ è soluzione di

$$f = g + Kf, \quad g(\tau) = A, \quad 0 \leq \tau \leq \tau_1.$$

Iterando queste equazioni di Volterra si ottiene per ogni $\phi \in \mathcal{H}_1$

$$\|(f_\lambda - f)\phi\|_2 \leq \sum_0^\infty \|(K_\lambda^n - K^n)g\phi\|_2 \leq 2 \|g\phi\|_2 c^n \frac{\tau_1^n}{n!}$$

e quindi f_λ converge fortemente a f quando $\lambda \rightarrow 0$.

♡

Diamo una semplice condizione per l'esistenza dell'operatore limite K .

Lemma 6A.2

Se la perturbazione soddisfa $A_{2,2} = 0$ e

$$\int_0^\infty \|A_{1,2} U_t A_{2,1}\| dt < \infty, \quad 6A.12$$

allora le condizioni per la validità del teorema 6A.1 sono soddisfatte se si prende

$$K = \int_0^\infty U_{-t} A_{1,2} U_t A_{2,1} dt. \quad 6A.13$$

◇

Dimostrazione

La dimostrazione è immediata notando che in questo caso l'operatore U_τ^λ è indipendente da λ .

♡

Nel caso $A_{1,1} \equiv B \neq 0$ introduciamo i prodotti temporalmente ordinati mediante la notazione

$$B_n = U_{t_n}^* B U_{t_n}.$$

Abbiamo allora il seguente risultato che è ottenuto sotto ipotesi spesso soddisfatte in modelli di sistemi fisici.

Teorema 6A.3 ([Dav74])

Supponiamo che

$$\int \|P_1 B_0 B_t P_1\| dt < \infty. \quad 6A.14$$

Definiamo

$$b_n(t) \equiv \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n P_1 B_0 P_2 B_1 \cdots P_2 B_n P_2 B P_1 \quad 6A.15$$

e supponiamo che per $n \geq 1$ sia

$$\|b_n(t)\| \leq c_n t^{\frac{n}{2}} \quad 6A.16$$

dove le costanti c_n sono tali che la serie $\sum_0^\infty c_n z^n$ converge per ogni z . Supponiamo anche che, per qualche $\epsilon > 0$, e qualche successione $\{d_n\}$ con $|d_n| < D$, $\forall n \in N$, si abbia, per ogni $t \geq 0$,

$$\|b_n(t)\| \leq d_n t^{\frac{n}{2} - \epsilon}. \quad 6A.17$$

Allora le condizioni del teorema A.1 sono soddisfatte scegliendo

$$K = \int_0^\infty P_1 A_0 A_t P_1 dt. \quad 6A.18$$

◇

Dimostrazione

Sviluppando U_t^λ in potenze di λ si ottiene

$$\|K(\lambda, \tau) - K\| \leq \int_{\lambda^{-2}\tau}^\infty \|P_0 B_0 B_t P_0\| dt + \sum_1^\infty \lambda^n \|a_n(t)\|. \quad 6A.19$$

Da (6A.14) segue che il termine integrale converge a zero quando $\lambda \rightarrow 0$ uniformemente per τ in ogni intervallo aperto di $(0, \infty)$. Per (6A.16) il termine che contiene la serie è dominato per $0 \leq \tau \leq \tau_0$ dalla serie convergente $\sum_1^\infty c_n \tau_0^n$. Ma dalla (6A.19) il termine n^{mo} della serie è anche dominato da $\lambda^{2\epsilon} d_n \tau_0^{\frac{n}{2}}$ che converge a zero per quando $\lambda \rightarrow 0$. Quindi la serie converge a zero uniformemente per $0 \leq \tau \leq \tau_0$.

♡

Nota 6A.1

In generale, senza ipotesi ulteriori, la convergenza per $\lambda \rightarrow 0$ non è uniforme nel tempo. Quindi non si possono, senza ulteriori ipotesi, scambiare i limiti $\lambda \rightarrow 0$ e $t \rightarrow \infty$.

♣

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [BaR84] A. Batty, D. Robinson, *Acta Appl. Math.* 2 (1984) 221–296.
- [BrR81] O. Bratteli, D. Robinson, *Math. Scandinava* 49 (1981) 259–274.
- [Bre86] H. Brezis, *Analisi Funzionale*, Liguori editore 1986.
- [Bur69] D. Bures, *Trans. American Math. Soc.* 135 (1969) 199–212.
- [ChE79] E. Christensen, D. Evans, *Journ. Lond. Math. Soc.* 20 (1979) 358–368.
- [Dav73] E.B. Davies, *Comm. Math. Phys.* 33 (1973) 171–186.
- [Dav74] E.B. Davies, *Comm. Math. Phys.* 39 (1974) 91–110.
- [Eva76] D. Evans, *Comm. Math. Phys.* 48 (1976) 15–22.
- [EHO79] D. Evans, H. Hanche-Olesen, *J. Funct. Anal.* 32 (1979) 207–212.
- [Kra70] E. Kraus, *Ann. Phys.* 64 (1970) 311–335.
- [Kur73] T.G. Kurtz, *Trans. Am. Math. Soc.* 186 (1973) 259–272.
- [Lin76] G. Lindblad, *Comm. Math. Phys.* 48 (1976) 119–130.
- [Mey95] P. Meyer, *Quantum probability for probabilists*, Lect. Notes in Mathematics 1538, Springer Verlag 1995.
- [Par92] K.R. Parthasarathy, *An introduction to quantum stochastic calculus*, Monographs in Mathematics 85, Birkhäuser Verlag 1992.

- [Pau02] V. Paulsen, *Completely Bounded maps and Operator Algebras*, Cambridge Univ. Press 2002.
- [Sti55] W.F. Stinespring, Proc. Roy. Math. Soc. 6 (1955) 211-216.
- [Tak72] M. Takesaki, J. Funct. Anal. 9 (1972) 36-51.

CAPITOLO 7

ALGEBRA DI WEYL, RAPPRESENTAZIONE DI BARGMANN, FOCK,
SEGAL. QUANTIZZAZIONE. ALGEBRA DI WEYL MAGNETICA

Abbiamo visto nei capitoli precedenti che nella formulazione della Meccanica Quantistica di Heisenberg e Born ha un ruolo importante l'ipotesi che per un sistema con N gradi di libertà sia possibile trovare operatori hermitiani (o meglio autoaggiunti, vedi cap. 4) che indicheremo con Q_k, P_k , i quali, in unità di misura per cui il valore numerico della costante di Planck \hbar è eguale a uno, soddisfano su un dominio opportuno le relazioni di commutazione canoniche

$$[Q_k, Q_h] = [P_k, P_h] = 0, \quad [Q_k, P_h] = i\delta_{k,h}I, \quad k, h = 1, \dots, d. \quad 7.1$$

Al fine di costruire una dinamica, a questi operatori si fa ricoprire il ruolo che in Meccanica Classica è ricoperto dalle coordinate q_h, p_k dello spazio delle fasi, sostituendo la parentesi di Poisson con il commutatore (abbiamo già notato queste due operazioni hanno la stessa struttura algebrica). Se $H = p^2 + V(q)$ descrive la dinamica classica, l'operatore $\hat{H} = P^2 + V(Q)$ verrà associato alla dinamica del sistema quantistico.

Nota 7.1

Conviene notare che l'unità immaginaria è necessaria in (7.1) perché il commutatore di due operatori hermitiani è antihermitiano. Questo può anche essere visto come un riflesso del fatto che la struttura simplettica di R^{2d} può essere interpretata come struttura complessa di C^d .



Una difficoltà nello studio delle relazioni (7.1) proviene dal fatto che esse non possono essere soddisfatte da operatori limitati.

Se infatti P_k e Q_k fossero entrambi limitati, da (7.1) seguirebbe che per ogni intero n

$$i n Q_k^{n-1} = Q_k^n P_k - P_k Q_k^n,$$

da cui

$$n \|Q_k\|^{n-1} \leq 2 \|Q_k\|^n \|P_k\|;$$

quindi, se $\|Q_k\|$ fosse diverso da zero,

$$n < 2 \|Q_k\| \|P_k\|$$

per ogni numero naturale n , che è una contraddizione.

Se per ogni valore dell'indice k uno degli operatori Q_k, P_k deve essere illimitato, la relazione (7.1) deve essere scritta

$$Q_k P_h - P_h Q_k \subset i\delta_{h,k} I \quad 7.2$$

(sul dominio di definizione il commutatore coincide con la moltiplicazione per $i\delta_{h,k}$). In questo senso più debole, non vi è unicità per la soluzione di (7.2).

Consideriamo il caso $d = 1$ e diamo qui tre soluzioni inequivalenti.

Soluzione A

Spazio di Hilbert $L^2(R, dx)$

$$D(Q) = \{f | f \in L^2(R), \quad xf(x) \in L^2(R)\} \quad (Qf)(x) \equiv xf(x),$$

$$D(P) = \{f | f \in L^2(R), \quad \frac{df}{dx} \in L^2(R)\} \quad (Pf)(x) \equiv -i \frac{df}{dx}.$$

Notare che sia Q che P sono autoaggiunti (Q è diagonale nella rappresentazione data e P è diagonale in trasformata di Fourier) e hanno come dominio comune invariante denso lo spazio \mathcal{S} delle funzioni C^∞ a decrescenza rapida.

È facile verificare che $U_a \equiv \exp\{iaQ\}$ e $V_b \equiv \exp\{ibP\}$, con a e b in R , costituiscono due gruppi ad un parametro di operatori unitari fortemente continui per i quali vale l'identità

$$U_a V_b U_a^* = V_b \exp\{-iab\} \quad 7.3$$

la cui forma differenziale è la (7.2).

Soluzione B

Spazio di Hilbert $L^2([0, 2\pi], dx)$

$$D(Q) = \{f | f \in L^2([0, 2\pi], dx) \quad (Qf)(x) = xf(x),$$

$$D(P) = \{f | \hat{f} \in \ell^2(Z), k\hat{f} \in \ell^2(Z), \quad k \in Z\} \quad (\widehat{Pf})_k = k\hat{f}_k.$$

dove \hat{f} denota la trasformata di Fourier discreta di f . L'operatore Q in questo caso è chiuso e limitato (e quindi autoaggiunto). P è rappresentato in trasformata di Fourier discreta dalla moltiplicazione per numeri interi e quindi è autoaggiunto.

Ma Q non lascia invariante il dominio di P ($xf(x)$ non è nel dominio di P se il valor medio di f non è zero). La relazione (7.2) è verificata sull'insieme (denso) delle funzioni assolutamente continue a media zero ma la restrizione \hat{P}_0 a queste funzioni fornisce solamente un operatore simmetrico, quindi non determina P . L'equazione (7.3) non è verificata per nessuna delle estensioni autoaggiunte di \hat{P}_0 ; per ciascuna di esse si può verificare per calcolo diretto che l'operatore $U_a V_b U_a^* V_b^*$ non è un multiplo dell'identità.

Soluzione C

Consideriamo nello spazio delle funzioni continue i caratteri ξ_λ del gruppo additivo R , cioè $\xi_\lambda(x) \equiv e^{i\lambda x}$, $\lambda \in R$. Indichiamo con K la chiusura in L^∞ delle combinazioni lineari finite

$$\sum_1^N c_i \xi_{\lambda_i}, \quad C \equiv \{c_1, \dots, c_N\}.$$

K è lo spazio della funzioni quasi periodiche. La forma quadratica

$$(\phi, \psi) \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \bar{\phi}(t) \psi(t) dt$$

è ben definita su K e definisce un prodotto scalare. Indichiamo con \mathcal{K} lo spazio di Hilbert ottenuto per completamento di K nella topologia data dal prodotto scalare indicato. I caratteri formano una base ortogonale non numerabile in \mathcal{K} e pertanto \mathcal{K} non è separabile.

Definiamo ora su \mathcal{K} due famiglie di operatori unitari U_a e V_b , con $a, b \in R$, mediante

$$(V_a \xi_\lambda)(x) = e^{-ia\lambda} \xi_\lambda(x), \quad (U_b \xi_k) = e^{ixb} \xi_k.$$

Gli operatori così costruiti verificano (7.3), ma la rappresentazione di R data da $a \mapsto V_a$ non è continua nella topologia forte di \mathcal{K} e neppure misurabile rispetto alla misura di Lebesgue (misurabilità è intesa nella topologia debole, e quindi misurabilità in a di tutte le funzioni $(\phi, V_a \phi)$ con $\phi \in \mathcal{K}$). Per verificare questo, basta notare che per operatori unitari misurabilità forte e debole coincidono, e che

$$V_0 \equiv I \quad \|(V_a - I)\xi_\lambda\|_2 = \sqrt{2}, \quad a \neq 0.$$

La rappresentazione così costruita è irriducibile (un elemento di $B(\mathcal{K})$ che commuti con tutti gli U_b e tutti i V_a è necessariamente un multiplo dell'identità). Essa non è equivalente alla soluzione A perché l'applicazione $a \mapsto V_a$ non è misurabile rispetto alla misura di Lebesgue (mentre nella soluzione A è addirittura continua).

La non unicità della soluzione delle relazioni (7.2) suggerisce di non porre alla base della formulazione della Meccanica Quantistica e di utilizzare invece la relazione (7.3) tra operatori unitari, richiedendo anche la *misurabilità* dell'applicazione $b \mapsto V_b$ rispetto alla misura di Lebesgue.

Se il sistema ha d gradi di libertà richiediamo che valga

$$U(a)V(b)U^*(a)V^*(b) = \exp\{-i(a \cdot b)\},$$

con $a, b \in R^d$, e $a \cdot b = \sum_{j=1}^d a_j b_j$, dove

$$U(a) = \exp\{ia \cdot Q\}, \quad V(b) = \exp\{ib \cdot P\}$$

con $Q = \{Q_1, \dots, Q_d\}$, $P = \{P_1, \dots, P_d\}$. Dimostreremo che, a meno di trasformazioni unitarie, la soluzione A data sopra è l'unica soluzione irriducibile di (7.4) per la quale l'applicazione $a, b \in C^N \mapsto (U(a), V(b))$ è misurabile (in senso debole) rispetto alla misura di Lebesgue. Se non si pone la condizione di irriducibilità, ogni rappresentazione di (7.4) si decompone in un somma (numerabile se lo spazio di rappresentazione è separabile) di soluzioni equivalenti alla soluzione A .

Questa dimostrazione, sostanzialmente dovuta a Schrödinger e in maniera più completa a von Neumann, porta all'identificazione delle due formulazioni della Meccanica Quantistica, quella di Schrödinger e quella di Heisenberg.

Iniziamo con lo scrivere la (7.4) in modo più compatto. Per $z = a + ib$, $z \in C^d$, $a, b \in R^d$, poniamo

$$W(z) = \exp\left\{-i\frac{a \cdot b}{2}\right\} V(b) U(a). \quad 7.5$$

La scelta del fattore di fase è giustificata dal fatto che con questa scelta si ha

$$W(z)W(z') = \exp\left\{-\frac{i}{2}\mathfrak{Im}(z, z')\right\} W(z + z') \quad 7.6$$

dove $(z, z') = \sum_j \bar{z}_j z'_j$ indica il prodotto interno in C^d . Dunque $z \mapsto W(z)$ è una rappresentazione proiettiva unitaria del gruppo C^d . Per costruzione questa rappresentazione è fortemente continua.

Definizione 7.1

Chiameremo *sistema di Weyl* sullo spazio di Hilbert \mathcal{H} un insieme di operatori $\{W(z)\}_{z \in \mathcal{H}}$ che soddisfano (7.6) e sono continui in z nella topologia forte degli operatori.

◇

Nota 7.2

Gli operatori $\{W(z)\}_{z \in C^d}$ insieme al gruppo S^1 (dei numeri complessi di modulo uno) formano gruppo; questo gruppo prende il nome di Gruppo di Heisenberg.

♣

Dal teorema di Stone applicato alle sottoalgebre corrispondenti a valori reali o puramente immaginari (da (7.6) si vede che ciascuna di queste sottoalgebre è commutativa) segue che esistono operatori Q_k e P_k autoaggiunti che generano i corrispondenti gruppi a N parametri e che soddisfano, su un dominio invariante denso comune, le relazioni (7.1).

Nota 7.3

La struttura complessa di C^d corrisponde alla struttura simplettica di R^{2d} ponendo

$$x + iy = z \equiv \{x, y\}, \quad \mathfrak{Im}(z, z') = \sigma(\{x, y\}, \{x', y'\}) \equiv \sigma(z, z').$$

La (7.6) può essere quindi scritta

$$W(z)W(z') = e^{-\frac{i}{2}\sigma(z,z')} W(z+z') \quad z, z' \in \mathbb{R}^{2d}. \quad 7.7$$

Vedremo in seguito che ogni trasformazione lineare simplettica $z \mapsto z'$ corrisponde ad una trasformazione unitaria U tale che

$$W(z') = UW(z)U^*.$$

Questo non è vero per le trasformazioni simplettiche non lineari.



Per dimostrare l'unicità della rappresentazione di Schrödinger conviene studiare prima una struttura più astratta, costituita da una C^* -algebra, in analogia a quanto viene fatto per studiare le rappresentazioni dei gruppi di Lie mediante lo studio dell'algebra di gruppo.

Sia dato un sistema di Weyl nel quale $z \mapsto W(z)$ sia misurabile (in senso debole) rispetto alla misura di Lebesgue; questo esclude il caso C descritto sopra. Costruiamo, per ogni funzione f di classe L^1 su C^d con norma $\|f\|_1$, un operatore W_f così definito

$$W_f \equiv \int dz f(z)W(z). \quad 7.8$$

È facile vedere che l'operatore W_f definito in (7.8) è limitato e la sua norma soddisfa la disuguaglianza

$$\|W_f\| \leq \|f\|_1.$$

Dunque l'applicazione lineare $f \mapsto W_f$ è continua in norma. Le seguenti identità sono facilmente verificabili

$$W_f + W_g = W_{f+g}, \quad W_f^* = W_{\bar{f}}$$

$$W_f W_g = W_{f \times g}, \quad (f \times g)(z) \equiv \int dz' f(z-z')g(z')e^{\frac{i}{2}\sigma(z,z')}. \quad 7.9$$

Il prodotto $f \times g$ viene detto anche *prodotto di Moyal*. Inoltre

Lemma 7.1

L'applicazione $f \mapsto W_f$ è iniettiva.



Dimostrazione

Se $W_f = 0$ per ogni ϕ, ψ in \mathcal{H} si ha

$$\int dz f(z)(\psi, W(z)\phi) = 0.$$

Ponendo $\phi' = W(z_0)\phi$, $\psi' = W(z_0)\psi$, dalla relazione

$$W(-z_0)W(z)W(z_0) = W(z) e^{\frac{i}{2}\sigma(z, z_0)}$$

si deduce che, per ogni ψ' , ϕ' , risulta

$$0 = \int dz f(z)(\psi', W(z)\phi') e^{\frac{i}{2}\sigma(z, z_0)}.$$

Utilizzando il fatto che se $f \in L^1$ allora $\hat{f} \in \mathcal{C}$, si deduce che la funzione

$$f(z)(\psi', W(z)\phi')$$

ha trasformata di Fourier zero, e quindi è nulla.

D'altra parte per ogni valore di z , scegliendo $\psi' = W(z)\phi'$ risulta

$$\langle \psi', W(z)\phi' \rangle = \langle \phi', \phi' \rangle = 1,$$

pertanto $f(z) = 0$.

♡

L'applicazione $f \mapsto W_f$ è un omomorfismo di algebre C^* (da una parte l'algebra delle funzioni di classe L^1 con il prodotto \times , l'algebra degli operatori W_f con l'usuale prodotto di operatori dall'altra); l'applicazione è iniettiva, si tratta perciò di un isomorfismo, e $\|W_f\| = \|f\|_1$.

Possiamo riguardare la collezione di W_f con la legge di moltiplicazione $W_f W_g$, coniugio $W_f^* = W_{\bar{f}}$ e norma $\|W_f\| = \|f\|_1$ come una C^* -algebra, senza riferimento al fatto che sia ottenuta a partire da un sistema di Weyl. Questa è l'algebra di Weyl \mathcal{W}^d .

In ciascuna rappresentazione, l'applicazione $f \mapsto W_f$ fornisce una corrispondenza tra funzioni sullo spazio delle fasi classico e operatori su spazi di Hilbert. Notiamo che se in questa corrispondenza sostituiamo l'algebra di Weyl con l'algebra (abeliana) dei caratteri di R^{2d} otteniamo la corrispondenza $f \mapsto \mathcal{F}^{-1}(f) = \check{f}$ (antitrasformata di Fourier). Risulta allora naturale la seguente definizione.

Definizione 7.2

Definiamo *quantizzazione di Weyl* della funzione f definita sullo spazio della fasi classico l'applicazione $f \mapsto W(\hat{f})$, dove \hat{f} denota la trasformata di Fourier di f .

◇

La quantizzazione di Weyl può essere estesa a una larga classe di funzioni; la tratteremo in dettaglio nel cap. 11. Risulta poi evidente che analoghe procedure di quantizzazione secondo Weyl si potrebbero ottenere sostituendo nel fattore di fase altre strutture simplettiche diverse dalla due forma $\sigma(z, z') = \Im(\bar{z} \cdot z')$. Ne vedremo un esempio in Appendice, dove descriveremo brevemente l'algebra di Weyl magnetica.

Nota 7.4

La costante \hbar ha la dimensione di un'azione. Abbiamo finora scelto le unità di misura in modo tale che risulti $\hbar = 1$. Se non facciamo questa scelta, le relazioni di commutazione di Heisenberg si scrivono, su un insieme denso

$$[Q_k^{\hbar}, Q_h^{\hbar}] = [P_k^{\hbar}, P_h^{\hbar}] = 0, \quad [Q_k^{\hbar}, P_h^{\hbar}] = i\hbar \delta_{k,h}$$

e conseguentemente il prodotto che definisce l'algebra di Weyl risulta essere

$$W_{\hbar}(z)W_{\hbar}(z') = W_{\hbar}(z + z')e^{-\frac{i}{2\hbar}\sigma(z,z')} \quad 7.10$$

Dal punto di vista della matematica risulta naturale definire *limite semiclassico* il limite di questa struttura algebrica quando $\hbar \rightarrow 0$; lo analizzeremo in parte nel cap. 8 e lo riprenderemo nel cap. 11. Dal punto di vista della Fisica questo limite può dare informazioni per sistemi nei quali tutte le osservabili che hanno dimensione di un'azione hanno valori grandi rispetto alla costante di Planck.

Vedremo nel cap. 8 il senso in cui la struttura algebrica dei generatori dei gruppi unitari nella struttura di Weyl si connette al limite con la struttura algebrica delle parentesi di Poisson della meccanica classica hamiltoniana. Vedremo che proprietà degli integrali oscillanti entrano in modo essenziale nella formulazione del limite semiclassico in rappresentazione di Schrödinger. Si vede dalla (7.10) che il limite è singolare perché contiene un fattore fortemente oscillante.



Ritornando all'algebra di Weyl, ricordiamo che ogni C^* -algebra ha una rappresentazione fedele come algebra di operatori su di uno spazio di Hilbert \mathcal{K} . Se la C^* -algebra è separabile, lo spazio \mathcal{K} può essere scelto separabile.

Data una rappresentazione π di \mathcal{W} in uno spazio di Hilbert \mathcal{K} , ha senso porsi il problema di quali siano le condizioni sotto le quali si possano ricostruire operatori che costituiscono un sistema di Weyl.

Per questo consideriamo una successione $\{f_n \in L^1(C^d)\}$ che converge in senso debole alla misura di Dirac concentrata nel punto $z_0 \in C^d$.

Consideriamo la successione di operatori su \mathcal{K} data da $\pi(W_{f_n})$. Se questa successione converge debolmente, denotiamo con $\pi(W(z_0))$ il suo limite. Se il limite esiste per ogni successione considerata, è facile verificare che gli operatori $\pi(W(z_0))$ costituiscono un sistema di Weyl.

Chiamiamo *regolari* quelle rappresentazioni dell'algebra di Weyl che inducono nel modo indicato un sistema di Weyl. Dal teorema (che dimostreremo) di unicità dell'algebra di Weyl dedurremo allora un teorema di unicità delle rappresentazioni del sistema di Weyl.

Conviene preliminarmente notare che *l'algebra di Weyl contiene proiettori*. Infatti ponendo

$$f_0(z) = (2\pi)^{-d} \exp\{-|z|^2/2\} \quad 7.11$$

e utilizzando le relazioni di Weyl si ottiene

$$W_{f_0} = W_{f_0}^*, \quad W_{f_0} W_{f_0} = W_{f_0}.$$

Quindi W_{f_0} è un proiettore. Essendo ogni rappresentazione un omomorfismo, per ogni rappresentazione π , si ha che $\pi(W_{f_0})$ è un proiettore. Inoltre, dal (7.10) segue

$$W_{f_0} W_f W_{f_0} = W_f W_{f_0} \quad \forall f. \quad 7.12$$

Costruiamo ora le rappresentazioni dell'algebra di Weyl. Secondo quanto visto nel cap. 4, ogni stato ρ determina una rappresentazione e *ogni rappresentazione viene originata in questo modo*.

Ricordiamo qui brevemente questa costruzione (GNS). Uno stato ρ di una C^* -algebra \mathcal{A} è per definizione un funzionale lineare su \mathcal{A} positivo e continuo nella topologia di \mathcal{A} . Ogni stato induce una struttura pre-hilbertiana su \mathcal{A} mediante la posizione

$$\langle a, b \rangle \equiv \rho(a^* b). \quad 7.13$$

Conveniamo di indicare con il simbolo \tilde{a} la classe di equivalenza di a rispetto alla relazione di equivalenza introdotta, definita dall'ideale I_ω degli elementi $c \in \mathcal{A}$ tali che $\omega(c^* c) = 0$. Se $b \in \mathcal{A}$, definiamo un operatore \hat{b} sullo spazio di Hilbert \mathcal{H}_ρ attraverso

$$\hat{b} \tilde{a} = \tilde{ba}.$$

L'operatore \hat{b} è ben definito poiché

$$\rho(a^* b^* ba) \leq \|b\|^2 \rho(a^* a).$$

Inoltre \hat{b} è chiudibile e limitato, e pertanto si estende ad un operatore su tutto \mathcal{H}_ρ che indichiamo con lo stesso simbolo. Da (7.13) si deduce

$$\hat{b} \hat{c} = \widehat{bc}.$$

La corrispondenza $a \mapsto \hat{a}$ fornisce quindi una rappresentazione di \mathcal{A} mediante operatori sullo spazio di Hilbert \mathcal{H}_ρ .

Indicheremo con π_ρ la rappresentazione indotta dallo stato ρ e con $P \equiv \pi_\rho(W_{f_0})$ il rappresentativo dell'operatore di proiezione W_{f_0} in questa rappresentazione. In generale, per una C^* -algebra qualunque, questa rappresentazione non è fedele. Vedremo invece che per l'algebra di Weyl ogni rappresentazione così costruita è fedele. Infatti il prodotto di due elementi W_f e W_g dell'algebra di Weyl è ancora, a meno di un fattore numerico non nullo, della forma W_h e questo implica che per ogni stato ω l'ideale I_ω è banale.

Notiamo che, poiché l'algebra di Weyl è separabile, lo spazio \mathcal{H}_ρ è separabile, e $P\mathcal{H}_\rho$ proietta su uno spazio che ha dimensione d_ρ numerabile.

Sia ω_j , $j = 1, \dots, d_\rho$ una base ortonormale in $P\mathcal{H}_\rho$. Indichiamo con \mathcal{K}_i (omettiamo per semplicità il pedice ρ) il sottospazio di \mathcal{H}_ρ generato ciclicamente dall'applicazione degli elementi $\pi_\rho(W_f)$ applicati a ω_i . Se dimostriamo che

$$\bigoplus_i \mathcal{K}_i = \mathcal{H}_\rho, \quad 7.14$$

risulta allora che la rappresentazione π_ρ si decompone in una somma diretta di rappresentazioni fedeli irriducibili, ciascuna delle quali ha il vettore ω_j , $j = 1, \dots, d_\rho$ come vettore ciclico. Infatti dalla relazione

$$P\pi_\rho(W_f)P = P \int dz f(z) \exp\{-|z|^2/4\}$$

segue che $\pi_\rho(W_f)$ è nullo se e solo se $f = 0$ e da

$$\langle \pi_\rho(W_f)\phi_i, \pi_\rho(W_g)\phi_j \rangle = \delta_{i,j} \int f(z)\bar{g}(z') e^{i\Im(z, z')/2} e^{-|z-z'|^2/2} dz dz' \quad 7.15$$

si deduce che la rappresentazione π_ρ si decompone in una somma diretta di rappresentazioni irriducibili, definite ciascuna nel sottospazio generato ciclicamente dalle $\pi_\rho(W_f)$ per azione sui vettori ϕ_i e tutte queste rappresentazioni sono tra loro unitariamente equivalenti.

Infatti il prodotto scalare che appare in (7.15) dipende solo dalle funzioni f e g *ma non dalla rappresentazione scelta*. Ne segue che, date due rappresentazioni π e π' irriducibili, con vettori ciclici ω e ω' , la corrispondenza $\pi(W_f)\omega \mapsto \pi'(W_f)\omega'$ induce una corrispondenza unitaria tra π e π' . Ne concludiamo

Teorema 7.2

Tutte le rappresentazioni irriducibili dall'algebra di Weyl sono equivalenti alla rappresentazione di Schrödinger.

Ne segue che gli operatori $\pi(W(z))$ esistono in ogni rappresentazione e definiscono sistemi di Weyl unitariamente equivalenti, e l'applicazione

$$z \mapsto \pi_\rho(W(z))$$

è un'applicazione continua (nel senso forte) di C^d negli operatori unitari di \mathcal{H}_ρ . \diamond

Nota 7.5

Nella rappresentazione di Schrödinger in $\mathcal{H} = L^2(R^d)$, gli elementi dell'algebra di Weyl sono gli operatori compatti. Questo si verifica facilmente poiché i loro nuclei integrali sono noti in modo esplicito (daremo nel cap. 12 criteri per verificare la compattezza di un operatore in $\mathcal{B}(L^2(R^d))$). Discuteremo nel cap. 11 altre topologie in questa rappresentazione che individuano gli operatori di classe traccia e gli operatori di classe Hilbert-Schmidt. \clubsuit

Nota 7.6

Le considerazioni precedenti valgono per ogni spazio vettoriale di dimensione finita e per ogni forma simplettica non degenere σ .

Nella dimostrazione dell'unicità della struttura di Weyl abbiamo utilizzato l'algebra di Weyl, e questo ha richiesto l'uso della misura di Lebesgue. Questa misura non è definita (come misura σ -continua) in R^∞ e in questo spazio non esiste neppure una misura che sia quasi invariante (invariante a meno di traslazioni). Quindi il teorema di unicità *non si estende al caso di un sistema con un numero infinito di gradi di libertà* (ad esempio alla teoria dei Campi Quantizzati).



Indichiamo con \mathcal{K} lo spazio di Hilbert complesso a cui appartiene z (l'argomento di W), e consideriamo il sistema di Weyl con base \mathcal{K} . Il prodotto interno è indicato come (z, z') , con $z, z' \in \mathcal{K}$.

Nota 7.7

Notiamo che la struttura simplettica $\sigma(z, z') = \Im(z, z')$ è invariante per trasformazioni unitarie in \mathcal{K} . Ne segue, per il teorema di unicità, una corrispondenza Γ_0 tra $U(\mathcal{K})$ e $U(\mathcal{H})$. È facile vedere che la continuità debole viene preservata, e quindi viene indotta una corrispondenza tra operatori autoaggiunti. L'applicazione Γ_0 si estende per continuità e linearità ad un'applicazione $\Gamma : B(\mathcal{K}) \rightarrow B(\mathcal{H})$.

*Definizione 7.3 – Seconda Quantizzazione*

L'applicazione Γ ha carattere funtoriale e viene indicata con il nome di *seconda quantizzazione*. Nel caso in cui \mathcal{K} ha dimensione infinita, questo funtore può dipendere dalla rappresentazione scelta per il sistema di Weyl.



Se $t \mapsto e^{itA}$ è un gruppo ad un parametro fortemente continuo di operatori unitari su \mathcal{K} con generatore A , si vede facilmente che $\Gamma(e^{itA})$ è un gruppo debolmente (e quindi fortemente) continuo di operatori unitari su \mathcal{H} ; denotiamo con $\partial\Gamma(A)$ il suo generatore. Vale, *anche nel caso di dimensione infinita*, il seguente teorema

Teorema 7.3 (Segal)

Sia \mathcal{K} uno spazio di Hilbert complesso, W uno sistema di Weyl su \mathcal{K} ; denotiamo con \mathcal{H} lo spazio di rappresentazione di W . Sia A un operatore su \mathcal{K} , con $A > 0$ e $Az \neq 0, \forall z \in \mathcal{K}$ e sia ω un vettore ciclico per W .

Supponiamo che esista un gruppo ad un parametro $\Gamma'(t)$ di operatori unitari su \mathcal{H} tale che

$$a) \quad \Gamma'(t)W(z)\Gamma'(-t) = W(e^{iAt}z)$$

$$b) \Gamma'(t)\omega = \omega \quad \forall t \in R$$

$$c) \Gamma'(t) = e^{itH}, \quad H \geq 0.$$

Allora esiste unica una corrispondenza $\Gamma : U(\mathcal{K}) \rightarrow U(\mathcal{H})$ tale che

$$\Gamma(e^{iAt}) = \Gamma'(t) \quad 7.16$$

e inoltre per qualunque operatore $B \geq 0$ su \mathcal{H} si ha $\partial\Gamma(B) > 0$, dove abbiamo indicato con $\partial\Gamma(B)$ il generatore del gruppo $\Gamma(e^{iBt})$.

◇

Dimostrazione

Definiamo

$$f(u) = \langle e^{-uH}W(z)\omega, W(z)\omega \rangle \quad u = s + it \quad z \in K. \quad 7.17$$

La funzione f è limitata, olomorfa in $s > 0$, continua in $s \geq 0$. Denotiamo con Φ questo spazio di funzioni, che forma un'algebra. Le relazioni di Weyl danno

$$f(it) = e^{i\Im(z_t, z)/2} \langle W(z_t - z)\omega, \omega \rangle, \quad z_t = e^{-iAt}z.$$

La funzione $g(u) = e^{-1/2(e^{-uA}z, z)}$ appartiene a Φ , dunque $fg \in \Phi$ e si ha

$$(fg)(it) = \langle W(z_t - z)\omega, \omega \rangle e^{-\frac{1}{2}\Re(z_t, z)}.$$

Sostituendo z con $-z$ si vede che anche la funzione

$$\langle W(-z_t + z)\omega, \omega \rangle e^{-\frac{1}{2}\Re(z_t, z)}$$

appartiene a Φ e il suo valore al bordo è $\bar{f}\bar{g}$. La sua coniugata è oomorfa per $s < 0$, continua in $s = 0$, e il suo valore al bordo coincide con il valore al bordo della funzione fg . Pertanto $fg(u)$ è continuabile nell'intero piano complesso come funzione analitica ed è quindi costante. Valutando questa funzione in zero, la costante risulta essere $e^{-(z, z)/2}$, dunque

$$\langle W(z_t - z)\omega, \omega \rangle = e^{-|z_t - z|^2/4}$$

Ma dal fatto che il nucleo dell'operatore A consiste solo nel vettore nullo, si deduce che, al variare di z e t , i vettori $z_t - z$ sono densi in \mathcal{K} .

Quindi per tutti gli z si ha $\langle W(z)\omega, \omega \rangle = e^{-|z|^2/4}$. Ne segue che per ogni unitario $U \in \mathcal{B}(K)$, l'applicazione

$$\sum a_i W(z_i)\omega \mapsto \sum a_i W(Uz_i)\omega$$

è ben definita e isometrica su $D \equiv \cup_z \{W(z)\omega\}$ e poiché quest'ultimo insieme è denso in \mathcal{K} l'applicazione si estende ad un operatore unitario $\Gamma(U)$. Per costruzione

$$\Gamma(U)W(z)\Gamma^*(U) = W(Uz), \quad \Gamma(U)\omega = \omega$$

e quindi $U \rightarrow \Gamma(U)$ è una rappresentazione di $U(\mathcal{K})$, continua perché si ha

$$\langle \Gamma(U)W(z)\omega, W(z)\omega \rangle = e^{\frac{i}{2}\Im(Uz, z)} e^{-|U(z)-z|^2/4}.$$

In particolare, scegliendo $U = e^{-itA}$ si dimostra (7.16).

Per dimostrare che se $B > 0$ come operatore su \mathcal{K} , allora $\partial\Gamma(B) > 0$, è sufficiente dimostrare che, se $B > 0$,

$$\int \langle \Gamma(e^{-iBt})w, w' \rangle g(t) dt = 0, \quad \forall w, w' \in \mathcal{K} \quad 7.18$$

se $g \in L^2(\mathbb{R})$, e $\hat{g}(p) = 0$ per $p < 0$.

Per densità basta dimostrare la (7.18) per $w = W(z)\omega$, $w' = W(z')\omega$. Ma

$$\langle \Gamma(e^{-iBt})W(z)\omega, W(z')\omega \rangle = \exp\left(-\frac{1}{4}(|z|^2 + |z'|^2) + 2(e^{-iBt}z, z')\right)$$

e l'applicazione esponenziale preserva la positività. L'unicità segue dalla ciclicità del vettore ω .

Il teorema di Segal si estende, con una dimostrazione più complicata, al caso in cui $A \geq 0$ è autoaggiunto e 0 è un autovalore semplice.

♡

Consideriamo nella rappresentazione di Schrödinger in $L^2(\mathbb{R}^d)$ l'operatore autoaggiunto positivo

$$N = \sum_{k=1}^d N_k, \quad N_k = 1/2(P_k^2 + Q_k^2 - 1) = -\frac{1}{2}\Delta_k + \frac{1}{2}x_k^2 - \frac{1}{2}.$$

Gli operatori N_k soddisfano, su un dominio denso

$$[N_h, P_k] = i\delta_{k,h}Q_k, \quad [N_h, Q_k] = -i\delta_{h,k}P_k.$$

Lo spettro di N_k , non degenere, è costituito dai numeri interi non negativi. All'autovalore nullo corrisponde nella rappresentazione su $L^2(\mathbb{R}^3)$ l'autovettore $\frac{1}{\pi^{1/4}}e^{-\frac{1}{2}x_k^2}$.

Tutte le funzioni continue e limitate di N appartengono all'algebra di Weyl. Conviene introdurre gli operatori

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_k + iP_k) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x_k + \frac{\partial}{\partial x_k}\right),$$

$$a_k^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_k - iP_k) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x_k - \frac{\partial}{\partial x_k}\right)$$

con $k = 1, \dots, d$, che soddisfano in un dominio denso (ad esempio $D(N)$) le relazioni (che chiameremo ancora di commutazione canonica)

$$[a_k, a_h] = [a_k^*, a_h^*] = 0, \quad [a_h, a_k^*] = \delta_{h,k}. \quad 7.19$$

Gli operatori a_k e a_k^* hanno un dominio di definizione denso, sono aggiunti uno dell'altro, e, sul dominio di N soddisfano

$$N = \sum_{k=1}^d N_k, \quad N_k = a_k^* a_k, \quad [N_k, a_h] = -a_h \delta_{h,k}.$$

Convieni notare che gli operatori a_k hanno come spettro l'intero asse reale, mentre gli operatori a_k^* hanno spettro vuoto. Tutti hanno un insieme denso di vettori analitici; in particolare lo sono i vettori analitici dell'operatore \sqrt{N} .

Spesso l'operatore N viene detto *operatore numero*; in rappresentazione di Schrödinger esso coincide con la hamiltoniana dell'oscillatore armonico, a meno di costanti.

Gli operatori N_k formano un sistema completo (ogni operatore che commuta con tutti loro è un multiplo dell'identità). Pertanto esiste un isomorfismo canonico di \mathcal{H} con $\ell^2(N^d) = (\ell^2(N))^{\otimes d}$, in cui gli elementi di una base ortonormale completa sono descritti dalle d^{plc} di numeri interi non negativi.

In corrispondenza alla sequenza $\{n_1, \dots, n_d\}$ l'autovalore di N è $\sum_1^d n_k$; all'autovalore (non degenere) 0 di N corrisponde la successione $\{0, \dots, 0\}$, e questo vettore coincide con il vettore ω considerato precedentemente. Dalle relazioni (7.19) si deduce

$$\begin{aligned} a_k \{n_1, \dots, n_d\} &= \sqrt{n_k} \{n_1, \dots, n_k - 1, \dots, n_d\}, \\ a_k^* \{n_1, \dots, n_d\} &= \sqrt{n_k + 1} \{n_1, \dots, n_k + 1, \dots, n_d\}. \end{aligned}$$

In particolare,

$$N_k^{-1/2} a_k, \quad N_k^{-1/2} a_k^*$$

sono operatori limitati. Nella rappresentazione di Schrödinger in $L^2(\mathbb{R}^d)$ si ha

$$\{n_1, \dots, n_d\} \mapsto C_{n_1, \dots, n_d} h_{n_1}(x_1) \dots h_{n_d}(x_N) e^{-\frac{1}{2}|x|^2}$$

dove h_k è il k -mo polinomio di Hermite e C_{n_1, \dots, n_d} una costante di normalizzazione.

Definizione 7.4

La rappresentazione delle relazioni di commutazione canoniche nella base $\{n_1, \dots, n_d\}$ è detta *rappresentazione di Fock*. Lo spazio di Hilbert è identificabile con un sottospazio chiuso di $\ell^2(N^d) = \bigoplus_{p \in N} (C^d)^p$.

◇

L'operazione Γ (seconda quantizzazione) vista precedentemente, ha una forma particolarmente interessante nella rappresentazione di Fock. Se A è una matrice di rango d a valori complessi, definiamo

$$\Gamma(A) \equiv \{0, A, A \otimes I + I \otimes A, A \otimes I \otimes I + I \otimes A \otimes I + I \otimes I \otimes A, \dots\}; \quad 7.20$$

In particolare si ha

$$\Gamma(I) = N, \quad \Gamma(e^t) = e^{-tN}, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \Gamma(e^{-t})\phi = (\omega, \phi)\omega \quad 7.21$$

Notiamo che la forma esplicita della rappresentazione dipende dalla base scelta, ma un cambiamento di base porta ad una descrizione equivalente, e quindi possiamo parlare della rappresentazione di Fock.

La rappresentazione di Fock non è molto utilizzata nella Meccanica Quantistica non relativistica, che studia sistemi ad un numero finito di gradi di libertà e a un numero fissato di particelle.

In questo caso, la rappresentazione di Schrödinger è molto più utile, perché permette di utilizzare strumenti di teoria delle funzioni e di analisi funzionale classica (ad esempio semigruppì che preservano la positività, disuguaglianze di Sobolev, teorema di convergenza dominata di Lebesgue,...) che non hanno una controparte naturale nella rappresentazione di Fock.

Notiamo che, se nel sistema di Weyl lo spazio \mathcal{K} è uno spazio di Hilbert di dimensione infinita, si possono ancora definire rappresentazioni di Fock, ma queste dipenderanno in generale dalla base scelta. Un cambiamento di base che non sia ottenuto attraverso una trasformazione lineare $\mathcal{K} \ni u \mapsto Tu$ con $T - I$ di classe Hilbert-Schmidt non può essere realizzato con una trasformazione unitaria e quindi dà origine ad una rappresentazione inequivalente.

Identificando per ciascun elemento della base di \mathcal{K} lo spazio della rappresentazione di Weyl con uno spazio $L^2(R, dG_k)$ dove G_k è una misura di Gauss, si possono costruire rappresentazioni di Fock in spazi di funzioni a quadrato integrabile rispetto a una misura regolare, ma in questo caso la rappresentazione dipende dalla scelta di base ortonormale e dalla scelta delle misura G_k . Inoltre esistono rappresentazioni che non possono essere realizzate come rappresentazioni di Fock.

Nel caso di sistemi ad infiniti gradi di libertà (teoria dei Campi Quantizzati) la rappresentazione di Fock è un utile strumento, almeno per uno studio perturbativo. Ma occorre tener presente la molteplicità di rappresentazioni di Fock non equivalenti tra loro, ed integrare il metodo perturbativo con un cambiamento di rappresentazione in corrispondenza a ciascun valore del piccolo parametro introdotto con la perturbazione.

7.1 RAPPRESENTAZIONE DI BARGMANN-SEGAL-FOCK REALE E COMPLESSA

Il sistema di Weyl ha anche altre rappresentazioni importanti che coinvolgono una misura di Gauss e pertanto possono essere estese al caso di dimensione infinita. Poiché in R^∞ la misura di Gauss non è definita in maniera unica – a meno di equivalenze – nel caso di R^∞ avremo un'infinità di rappresentazioni inequivalenti.

Nel caso di un numero finito di gradi di libertà queste rappresentazioni sono tutte equivalenti alla rappresentazione di Schrödinger. Ne descriviamo qui due, che hanno una rilevanza nella quantizzazione dei campi: le rappresentazioni di Bargmann-Segal reale e complessa.

Poiché non esiste la misura di Lebesgue su R^∞ conviene preliminarmente, anche nel caso di dimensione finita, sostituire la misura di Lebesgue con una misura di Gauss. Notiamo che le misure di Gauss condividono con la misura di Lebesgue la proprietà di essere cilindriche, essendo il prodotto di misure gaussiane in R . Ma, a differenza di quella di Lebesgue, sono misure di probabilità. È questa proprietà che permette di estenderle facilmente a R^∞ come misure prodotto.

La rappresentazioni di Bargmann-Segal reale si ottiene nel caso finito dimensionale utilizzando l'isomorfismo tra spazi di Hilbert

$$L^2(R^d, dx) \rightarrow L^2(R^d, e^{-(x, Bx)} dx), \quad B > 0,$$

$$\phi(x) \mapsto \psi(x) = C_B e^{\frac{1}{2}(x, Bx)} \phi(x)$$

dove C_B è una costante di normalizzazione scelta in modo tale che le norme coincidano. Si ottiene

$$X_k \mapsto X_k, \quad P_k \mapsto P_k - i \sum_h B_{k,h} x_h$$

che fornisce una rappresentazione equivalente a quella di Schrödinger.

Questa rappresentazione è stata utilizzata da Segal nel caso infinito-dimensionale per trovare rappresentazioni in cui i campi sono rappresentati da funzioni lineari su spazi di distribuzioni (come le coordinate x_k sono funzioni lineari su R^d).

La rappresentazione di Bargmann-Segal-Fock complessa (distribuzione normale debole nella terminologia di Segal) *diagonalizza gli operatori di creazione*. Essa permette di utilizzare strumenti di analisi funzionale analoghi (sebbene anche nel caso di dimensione finita, più deboli) a quelli che si possono utilizzare nella rappresentazione di Schrödinger.

Nel caso di dimensione infinita questa rappresentazione, come quella reale, è in un certo senso una rappresentazione di Schrödinger in uno spazio di funzioni a quadrato integrabile definite sulle distribuzioni in R^d .

La rappresentazione di Bargmann-Segal-Fock complessa fu introdotta da Fock, il quale notò che le relazioni di commutazione di Heisenberg tra a_k^* e a_h sono soddisfatte dagli operatori z_k e $\frac{\partial}{\partial z_h}$ che agiscono su uno spazio di funzioni analitiche.

Per descrivere questa rappresentazione e vederne l'equivalenza con la rappresentazione di Schrödinger, consideriamo l'isomorfismo F di spazi di Hilbert

$$L^2(R^d, dx) \rightarrow L^2(C^d, dG)_{an} \tag{7.22}$$

$$\phi(x) \mapsto \psi(z)$$

dove lo spazio immagine è lo spazio delle funzione analitiche nel settore $\{z \in C^d : z_k \geq 0 \forall k\}$ che sono a quadrato integrabile per la misura di Gauss

$$\frac{1}{\pi^d} e^{-|z|^2} \prod dx_i dy_i.$$

Notare che la richiesta che le funzioni siano analitiche nel settore è necessaria poiché altrimenti non si potrebbe avere isomorfismo. La corrispondenza è data da

$$F : \phi(x) \mapsto \psi(z) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^d \int_{R^d} e^{-1/2(z^2+|x^2|)+\sqrt{2}(z,x)} \phi(x) dx. \quad 7.23$$

Si vede facilmente che, su un dominio denso, $F a_k^* F^{-1}$ è la moltiplicazione per la coordinata z ed $F a_k F^{-1}$ è l'operatore $\frac{\partial}{\partial z_k}$. È facile anche vedere che una base ortonormale completa di $\mathcal{K}_d \equiv L_{an}^2(C^d, dz^d)$ è costituita dai vettori

$$\frac{z_1^{m_1} \dots z_d^{m_d}}{\sqrt{m_1! \dots m_d!}}, \quad m_j \in N$$

e che gli autostati di a_k (stati coerenti) sono dati da (a meno di normalizzazione)

$$\psi_a(z) = e^{(a,z)} \quad a \in C^d.$$

I vettori ψ_a non sono ortogonali (gli operatori a_k non sono autoaggiunti) ma danno un *insieme completo* nel senso che ogni vettore ϕ può essere espresso come integrale sugli stati coerenti

$$\phi(z) = \int e^{(w,z)} d\mu_\phi(w), \quad d\mu_\phi(w) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{d/2} \phi(w) e^{-|w|^2} \prod dw_k. \quad 7.24$$

Quindi il termine

$$\left(\frac{1}{\pi}\right)^{d/2} e^{(w,z)} e^{-|w|^2} \quad 7.25$$

è un nucleo autoriproduttore per gli stati in questa rappresentazione. La trasformazione inversa F^{-1} è data esplicitamente dalla relazione

$$(F^{-1}g)(z) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int_{|z| < M} \bar{A}(x, z) g(z) d\nu_z \quad 7.26$$

dove ν_z è la misura di Lebesgue e

$$A(x, z) = \exp\{-1/2(z^2 + x^2) + \sqrt{2}(z, x)\}.$$

Notare che per ogni $x \in R^d$ si ha $A(x, \cdot) \in \mathcal{K}_d$, ma solamente per un insieme denso di \mathcal{K}_d l'integrale in (7.26) è assolutamente convergente per $M \rightarrow \infty$. Per un generico vettore in \mathcal{K}_n la convergenza va intesa in senso debole.

Nota 7.8

La corrispondenza tra $L^2(\mathbb{R}^d, dx)$ e \mathcal{K}_d può anche essere vista in termini delle strutture simplettiche

$$\sigma_d \equiv \sum dq_k \wedge dp_k, \quad i\mu_d \equiv \sum dz_k \wedge d\bar{z}_k$$

definite rispettivamente su $\mathbb{R}^{2d} \equiv C^d$ e su C^{2d} . Notiamo che

$$D_d \equiv \{\{z, w\} \in C^{2d}, w = \bar{z}\}$$

è una sottovarietà simplettica rispetto alla due-forma simplettica $\sum dz_k \wedge dw_k$. La corrispondente riduzione simplettica

$$C^{2d} \rightarrow C^d$$

è data da

$$\{z, \bar{z}\} \mapsto z. \quad 7.27$$

La trasformazione lineare simplettica

$$(T^*\mathbb{R}^n, \sigma_d) \rightarrow (C^d, \mu_d)$$

ha come funzione generatrice

$$\Phi(x, z) = -i \log A(x, z).$$

È infatti facile verificare le seguenti identità

$$p_k = -\frac{\partial \Phi}{\partial x_k}, \quad w_k = \frac{\partial \Phi}{\partial z_k} \quad k = 1, \dots, d.$$

Si può inoltre verificare facilmente che per questa trasformazione simplettica si ha la corrispondenza

$$\sum_k (p_k^2 + q_k^2) \rightarrow \sum_k z_k \bar{z}_k,$$

che è l'analogo classico di

$$\sum_k -\left(\frac{\partial}{\partial x_k}\right)^2 + x_k^2 \rightarrow \sum_k z_k \frac{\partial}{\partial z_k}.$$



Nota 7.9

Per inquadrare dal punto di vista storico la rappresentazione reale di Segal, conviene notare che essa è stata introdotta e utilizzata nell'ambito della quantizzazione dell'equazione di Klein-Gordon

$$\frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial t^2} = \Delta u(t, x) - mu(t, x) \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad m \geq 0 \quad 7.28$$

(per $m = 0$ è l'equazione delle onde). Questa equazione di propagazione iperbolica ammette soluzione reale unica (in spazi opportuni) se si danno come condizioni iniziali al tempo $t = 0$ i valori (reali) della funzione $u(0, x)$ e del suo gradiente $v(0, x) \equiv \nabla u(0, x)$.

Esiste una struttura simplettica naturale (e singolare) sulla coppia di spazi di funzioni a valore reale che descrivono queste condizioni iniziali. Essa è definita da

$$\omega(f, g) = \frac{1}{2} \int [f(x)\nabla g(x) - \nabla f(x)g(x)] dx, \quad x \in R^d \quad 7.29$$

su coppie di funzioni $\{f, g\} \in H^1(R^d) \times H^1(R^d)$, ed è estendibile a coppie di funzioni in $H^{\frac{1}{2}}(R^d)$ o a coppie $f \in H^1(R^d)$, $g \in L^2(R^d)$.

Questa struttura è invariante per il flusso dato dalle soluzioni dell'equazione (7.28) e il flusso stesso è hamiltoniano con hamiltoniana data dall'energia classica del campo.

In questa formulazione lo spazio \mathcal{K} è lo spazio (di Hilbert) delle coppie di funzioni $f(x), g(x)$ con $f(x) \in H^1(R^d)$ e $g(x) \in L^2(R^d)$. La seconda quantizzazione in questo caso corrisponde (vedere ad esempio [2]) alla quantizzazione secondo Schrödinger formulata nello spazio delle configurazioni dato, invece che da R^d , dallo spazio delle soluzioni reali a valori distribuzioni dell'equazione delle onde. La connessione con la quantizzazione di Fock risulta dal seguente argomento formale: scelte due basi $\{f_n\}, \{g_m\} \subset \mathcal{S}$ ortonormali rispetto al prodotto L^2 , definiamo le funzioni lineari su \mathcal{S}' (coordinate su \mathcal{S}' ; notare che la trasformata di Fourier è un'isometria su \mathcal{S}').

$$q_n = \int f_n(x)\phi(x) dx, \quad p_m = \int g_m(x)\pi(x) dx.$$

Allora la rappresentazione Gaussiana reale fornisce le $\{q_n\}, \{p_m\}$ come operatori che soddisfano, su un dominio opportuno, le relazioni

$$[q_n, p_m] = i\delta_{n,m}, \quad [q_n, q_m] = [p_n, p_m] = 0, \quad n, m \in N.$$

♣

La rappresentazione di Segal complessa utilizza coordinate su \mathcal{S}' date da $q_n + ip_n$; queste sono coordinate di una *varietà lagrangiana* che evolve nel tempo secondo le equazioni del campo classico; in questo senso la rappresentazione di Segal complessa è di natura lagrangiana piuttosto che hamiltoniana.

Le rappresentazioni di Segal reale e complessa dipendono dalla scelta della misura di Gauss (distribuzione gaussiana debole nella terminologia di Segal). Vedremo in seguito le condizioni sotto le quali c'è equivalenza.

Lo spazio di rappresentazione ha come coordinate funzionali lineari $\xi(z)$, $z = \{f \in \mathcal{S}, g \in \mathcal{S}\}$ ed è provvisto di una misura gaussiana; per una discussione approfondita si può vedere [Gro67]. Notiamo che una misura gaussiana è

completamente caratterizzata dalla media delle variabili coordinate e dalla loro varianza (media di prodotti di variabili coordinate).

Anche se lo spazio \mathcal{K} ha dimensione finita non esiste uno *spazio canonico* dal quale è portata la misura; vedremo un esempio nel cap. 14 quando daremo alcuni elementi della teoria del moto Browniano e del processo di Orstein-Uhlenbeck (che può essere considerato una teoria di campo quantistica in assenza di dimensioni spaziali).

Discuteremo in un capitolo successivo le restrizioni nella scelta dello spazio di misura se vogliamo restringere la nostra attenzione a scelte che permettono di definire il limite *in misura*, di opportune successioni di funzioni delle variabili gaussiane.

Ad esempio nella teoria dei campi quantizzati sono rilevanti i polinomi e le espressioni esponenziali nelle funzioni lineari (in altre parole, i polinomi nelle valutazioni delle coordinate (campi) su funzioni regolari (funzioni test), che si è soliti scrivere in modo formale come

$$\begin{aligned}\phi(f) &\equiv \int \phi(x)f(x) dx, \\ \pi(g) &\equiv \int \pi(x)g(x) dx\end{aligned}$$

con $\phi, \pi \in \mathcal{S}'$, $f, g \in \mathcal{S}$. Analogamente per $g_k(x_1, \dots, x_k) \in S^k$ si utilizza la notazione

$$\phi(g_k) \equiv \int g_k(x_1, \dots, x_k)\phi(x_1) \cdots \phi(x_k) dx_1 \cdots dx_k$$

Se g_k^n , $n = 1, 2, \dots$ è una successione di funzioni in S^k che converge a una funzione g_k in una topologia più debole di S^k , l'esistenza del limite in misura come operatore su \mathcal{H} di $\phi(g)$ dipende in generale dalla scelta della rappresentazione. Come nel caso del moto Browniano, non esiste uno spazio *minimo* di misura, e la regolarità delle funzioni che entrano nello spazio dipende dalla dimensione dello spazio su cui è definita l'equazione di Klein-Gordon. Questa dipendenza dalle dimensioni spaziali è connessa al diverso valore di k per cui l'immersione di $H^k(R^d)$ in $L^2(R^d)$ è un operatore di classe traccia, dove

$$H^k = \{\phi \in L^2(R^d) : (-\Delta + |x|^2 + 1)^{\frac{k}{2}} \phi \in L^2(R^d)\}. \quad 7.30$$

Discutiamo ora brevemente la relazione che determina se una trasformazione lineare simplettica nello spazio \mathcal{K} sia realizzata mediante una trasformazione unitaria in \mathcal{H} .

Consideriamo la famiglia di trasformazioni unitarie $z \mapsto e^{itA}z$, $A = A^*$. Per ciascun valore di t la misura di Gauss si trasforma in una misura equivalente e utilizzando in \mathcal{K} la base data dagli autovettori di A è facile vedere che la derivata di Radon-Nikodym è

$$(\det(A^*A))^{-1} \exp\{-\text{Tr}[(A^*A)^{-1} - I]\}. \quad 7.31$$

Queste considerazioni valgono anche per il caso in cui \mathcal{K} sia uno spazio di dimensione infinita, purché la (7.31) abbia significato. La misura trasformata è quindi certamente equivalente alla misura di partenza (e quindi la trasformazione è implementata da un operatore unitario) se l'operatore

$$(A^*A)^{-1} - I \tag{7.32}$$

è di classe traccia, poiché in questo caso l'espressione in (7.31) ha significato. Ne deduciamo che la nuova rappresentazione è certamente equivalente alla rappresentazione da cui siamo partiti se $A = I + B$ dove B è un operatore di classe traccia.

Questa condizione non è tuttavia necessaria; condizione necessaria e sufficiente è che $((A^*A)^{-1} - I)$ sia di classe Hilbert-Schmidt, e quindi si abbia $A = I + S$ dove S è un operatore di Hilbert-Schmidt. Per vedere questo notiamo che un operatore B di Hilbert-Schmidt può sempre essere visto come limite, nella norma Hilbert-Schmidt, di operatori B_n di rango n . È infatti facile verificare che in questo caso esiste il limite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \det(I + B_n) e^{-Tr B_n}$$

In termini di misure gaussiane, basta notare che se $((A^*A)^{-1} - I)$ è di classe Hilbert-Schmidt ma non di classe traccia, e se indichiamo con λ_k i suoi autovalori, la serie $\sum_k \lambda_k x_k^2$ non converge in generale sul supporto della misura gaussiana ma esiste una successione di numeri reali c_k tali che la serie

$$\sum_k (\lambda_k x_k^2 - c_k) \tag{7.33}$$

converge quasi ovunque rispetto alla misura di Gauss. Nel caso $A = I - K$, $K \in J_{1,+}$ (per la definizione di $J_{1,+}$ si veda il capitolo sugli ideali di Schatten) si può scegliere $c_k = 0$; nel caso $K \in J_{2,+}$, $K \notin J_{1,+}$, la scelta che deve essere fatta per c_k dipende dall'operatore K . Torneremo su questo problema in un capitolo successivo.

Abbiamo notato che gruppi ad un parametro di trasformazioni simpletiche lineari in \mathcal{K} vengono realizzati da gruppi ad un parametro di operatori unitari in \mathcal{H} . Utilizzando la rappresentazione di Fock si vede facilmente che se la matrice B rappresenta il generatore del gruppo, così che il gruppo è determinato dalla soluzione dell'equazione lineare

$$\dot{z} = JBz \tag{7.34}$$

dove B è una matrice simmetrica, il corrispondente generatore del gruppo unitario è l'operatore autoaggiunto

$$\hat{B} \equiv \sum_{k,j} a_k^* B_{k,j} a_j.$$

L'operatore $\hat{B}N^{-1}$ è limitato, per cui i vettori analitici di N sono analitici per tutti gli operatori \hat{B} . Vale la relazione

$$[\hat{B}_1, \hat{B}_2] = [\widehat{B_1, B_2}]$$

Convieni anche notare che \hat{B} è un'espressione bilineare omogenea negli operatori P_i e Q_i (che potremmo ridefinire \hat{p}_i, \hat{q}_i) e che se la matrice B è della forma $B = iC$ con C antisimmetrica, si ha

$$\hat{B} = i \sum_{k,j} \hat{p}_k C_{k,j} \hat{q}_j.$$

Questo è in particolare il caso dei generatori delle trasformazioni simplettiche della forma

$$q_k \mapsto q'_k = \sum_j K_{k,j} q_j, \quad p_k \mapsto p'_k = \sum_j (K^t)_{k,j}^{-1} p_j \quad 7.35$$

con K matrice invertibile. Nel caso $\mathcal{K} = C^3$ questo permette di esprimere facilmente i generatori del gruppo delle rotazioni.

Prima di discutere brevemente il caso del gruppo delle rotazioni, notiamo che se $\{u(g)\}_{g \in G}$ è un gruppo di trasformazioni simplettiche in \mathcal{K} e $U(g) = \Gamma(u(g))$, in generale gli operatori $U(g)$ non danno una rappresentazione di G . Questo avviene se il gruppo è semisemplice (non ammette sottogruppi abeliani *invarianti*). Un semplice esempio è il gruppo delle traslazioni $z \mapsto z + z_0$; il sistema di Weyl è solamente una rappresentazione proiettiva di questo gruppo. Un altro semplice esempio è il gruppo di Galileo, che ha le traslazioni del tempo come sottogruppo abeliano invariante; lo discuteremo brevemente in seguito.

Nel caso del gruppo delle rotazioni indichiamo con j_k i generatori delle rotazioni attorno a tre assi coordinati e poniamo $\hat{j}_k \equiv \partial\Gamma(j_k)$ i corrispondenti generatori in \mathcal{H} . Essi possono essere espressi nella forma

$$\hat{j}_k = i \sum_{h,j} j_{j,l}^k P_j Q_l \quad 7.36$$

dove $j_{j,l}^k \equiv \epsilon_{k,j,l}$ (il simbolo di Ricci). Nel seguito sottointenderemo la sommatoria su indici ripetuti.

Questi operatori hanno come insieme comune invariante di vettori analitici i vettori analitici dell'operatore numero N , e su questo insieme di vettori soddisfano le relazioni

$$[\hat{j}_k, \hat{j}_l] = i\epsilon_{k,l,m} \hat{j}_m. \quad 7.37$$

Da (7.37) segue che gli operatori \hat{j}_k commutano con l'operatore $\hat{j}^2 = \sum_k (\hat{j}_k)^2$ (ma non tra di loro) per cui per ciascun valore di k si possono diagonalizzare simultaneamente \hat{j}^2 e \hat{j}_k . Introducendo gli operatori

$$L_{\pm} \equiv \hat{j}_1 \pm i\hat{j}_2 \quad 7.38$$

e ponendo $L_3 \equiv \hat{j}_3$ ed $L^2 \equiv \hat{j}^2$ si verifica facilmente che, sui vettori analitici per N , vale la relazione

$$[L_3, L_{\pm}] = \pm L_{\pm}, \quad L^2 = L_3^2 + L_3 + L_- L_+. \quad 7.39$$

Nella rappresentazione di Schrödinger, e quindi in ogni rappresentazione del sistema di Weyl, si ha $e^{2\pi i L_3} = I$ (rotazioni di un angolo multiplo di 2π sono rappresentate dall'identità) e quindi gli autovalori di L_3 possono essere solamente i numeri interi. Indicheremo con il simbolo m gli autovalori di L_3 , con $g(l) \in N$ i possibili autovalori di L^2 e con $|l, m\rangle$ i corrispondenti autovettori comuni. Dalle relazioni (7.39) si deduce

$$L_3 L_{\pm} |l, m\rangle = (m \pm 1) L_{\pm} |l, m\rangle, \quad L^2 L_{\pm} |l, m\rangle = g(l) L_{\pm} |l, m\rangle. \quad 7.40$$

Da (7.40) si deduce allora

$$L_{\pm} |l, m\rangle = \sqrt{g(l) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle. \quad 7.41$$

Notando che $L_- L_+$ è un operatore positivo (poiché $L_- = L_+^*$) si deduce che $g(l)$ deve avere la forma $g(l) = l(l+1)$ e che gli autovalori congiunti di L_3 e di L^2 sono l, m , con $l \in N$ e $m \in \{-l, \dots, l\}$.

Per avere delle espressioni più esplicite, conviene riferirsi alla rappresentazione di Schrödinger. In questa rappresentazione si ha, sul dominio della hamiltoniana dell'oscillatore armonico,

$$\hat{j}_k f(x) = i \sum_{h,l} \epsilon_{k,h,l} x_h \frac{\partial f}{\partial x_l}. \quad 7.42$$

Conviene utilizzare l'isomorfismo $L^2(\mathbb{R}^3) \simeq L^2(\mathbb{R}^+) \times L^2(S^2, d\mu)$ (descrizione in coordinate sferiche) dove μ è la misura sulla sfera $S^2 = \{x \in \mathbb{R}^3 : |x| = 1\}$. In queste nuove coordinate gli operatori \hat{j}_k hanno la forma

$$\hat{j}_k = I \otimes J_k$$

dove J_k ha la stessa espressione di \hat{j}_k , che agisce ora come operatore su $L^2(S^2, d\mu)$. Utilizzando coordinate sferiche, gli autovettori della coppia J_3, J^2 relativamente agli autovalori m, l hanno adesso l'espressione $|l, m\rangle \equiv Y_l(\theta) e^{im\phi}$, con $Y_l(\theta)$ le funzioni armoniche sferiche.

Consideriamo ora brevemente il caso del gruppo di Galileo; ci riferiremo sempre alla rappresentazione di Schrödinger. Questo gruppo è un gruppo di Lie a dieci parametri; per un punto materiale di massa m la sua azione nello spazio delle fasi allargato è data da

$$i) \quad x \mapsto x + a, \quad p \mapsto p, \quad x, p \in \mathbb{R}^3,$$

- ii) $x \mapsto x + vt, \quad p \mapsto p + mv \quad v \in R^3,$
 iii) $x \mapsto Rx, \quad p \mapsto R^{-1}p \quad R \in O(3),$
 iv) $x \mapsto x, \quad p \mapsto p, \quad t \mapsto t + \tau \quad \tau \in R.$

In queste notazioni, x è la coordinata cartesiana del punto materiale di massa m , mentre p è la sua quantità di moto.

Il sottogruppo abeliano ii) (non invariante) viene detto delle accelerazioni (dei boosts). Il sottogruppo ad un parametro iv) è la traslazione dell'asse dei tempi. Esso è un sottogruppo abeliano non compatto e invariante, e pertanto il gruppo di Galilei non è semisemplice e le sue rappresentazioni mediante operatori unitari sono in generale solo proiettive.

Si vede facilmente che la funzione

$$K(x, p, t) \equiv pt - mx \quad 7.43$$

è, per ciascun valore del parametro t , generatore simplettico del sottogruppo ii) con parametro $v \in R^3$. Si noti che le funzioni K_i soddisfano

$$\{K_i, p_j\} = m\delta_{i,j}, \quad \{K_i, x_j\} = t\delta_{i,j} \quad \{x_i, p_j\} = \delta_{i,j} \quad 7.44$$

e insieme a

$$\{x_i, t\} = \{t, p_j\} = \{t, K_j\} = 0 \quad 7.45$$

determinano la struttura del gruppo di Galileo come gruppo di Lie.

La quantizzazione di Weyl sostituisce le funzioni q_k, p_k, K_k con gli operatori $\hat{q}_k, \hat{p}_k, \hat{K}_k$ che soddisfano le relazioni di commutazione

$$[\hat{K}_i, \hat{p}_j] = im\delta_{i,j}, \quad [\hat{K}_i, \hat{x}_j] = it\delta_{i,j} \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\delta_{i,j}. \quad 7.46$$

Notare che t e m sono parametri.

Utilizzando (7.46) non è difficile dare la forma esplicita degli operatori unitari $U_t(v, m)$ che implementano le applicazioni $x \mapsto x + vt, p \mapsto p + mv$. Si ottiene, nella rappresentazione in cui gli operatori \hat{x}_k sono diagonali, per ogni funzione $g \in L^2(R^3)$

$$(U_t(v, m)g)(x) = \exp\left\{-it\frac{mv^2}{2}\right\} \exp\{-i(x \cdot mv)\} \exp\{i(p \cdot v)\}g(x) \quad 7.47$$

con $p_k = i\frac{\partial}{\partial x_k}$. Si vede anche che la rappresentazione ottenuta del gruppo di Galilei è una rappresentazione proiettiva. Notare che

$$2\sigma((0, mv), (tv, 0)) = mt|v^2|.$$

7.2 QUANTIZZAZIONI STRETTE

Con la definizione 7.2 abbiamo introdotto la quantizzazione di Weyl, che associa ad osservabili classiche in una classe opportuna operatori su uno spazio di Hilbert. Vederemo nel cap. 11 fino a che punto questa corrispondenza conserva le relazioni funzionali. La quantizzazione di Weyl è una *quantizzazione stretta* di una struttura di Poisson nel senso delle seguenti definizioni.

Definizione 7.5

Una *struttura di Poisson* (o *algebra di Poisson*) è una tripla $(X, \times, \{, \})$ dove X è uno spazio vettoriale reale, \times è un'applicazione bilineare associativa e commutativa $X \times X \rightarrow X$ (detta prodotto) e $\{, \}$ è un'applicazione $X \times X \rightarrow X$ bilineare, antisimmetrica e tale che, per $f \in X$, $g \mapsto \{f, g\}$ è una derivazione sia rispetto a \times che a $\{, \}$. Dunque per ogni $f, g, h \in X$ si ha

- i) $f \times g = g \times f, \quad (f \times g) \times h = f \times (g \times h)$
- ii) $\{f, g\} = -\{g, f\}$
- iii) $\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\}$ (regola di Leibniz)
- iv) $\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$ (identità di Jacobi).

◇

La *quantizzazione per deformazione* vuole associare, per ogni valore del parametro \hbar , $0 < \hbar \leq \hbar_0$, ad ogni elemento di $f \in X$ un elemento \hat{f}_\hbar di una C^* -algebra \mathcal{A} (osservabili quantistici) in modo tale che la struttura algebrica degli osservabili quantistici converga *in un senso opportuno* quando $\hbar \rightarrow 0$ alla struttura descritta dall'algebra di Poisson.

Notiamo che spesso X è lo spazio di tutte le funzioni su una varietà simplettica \mathcal{M} ; in questo caso l'uso di una norma nella quantizzazione suggerisce di applicare la quantizzazione solamente a sottoinsieme $X_0 \subset X$ (ad esempio l'insieme X_0 delle funzioni di classe C_0^∞ su \mathcal{M}).

Definizione 7.6

Sia \mathcal{A}_0 un'algebra abeliana e sia X un'algebra di Poisson contenuta densamente nella parte autoaggiunta di \mathcal{A}_0 . Se I è un sottoinsieme di R^+ che ha zero come punto di accumulazione, una quantizzazione stretta dell'algebra di Poisson $(X, \times, \{, \})$ è una famiglia di applicazioni \mathcal{Q}^\hbar , $\hbar \in I$, da \mathcal{A}_0 agli elementi reali di una famiglia \mathcal{A}^\hbar di C^* -algebre, con norma $\|\cdot\|_\hbar$, che soddisfi le seguenti condizioni:

(a) *linearità*

\mathcal{Q}^\hbar è lineare per ciascun valore di \hbar e \mathcal{Q}^0 è l'inclusione.

(b) *condizione di Rieffel*

Per $a \in \mathcal{A}_0$ l'applicazione $I \ni \hbar \mapsto \mathcal{Q}^\hbar(a)$ è continua.

(c) *condizione di von Neumann*

Per $a, b \in \mathcal{A}_0$ si ha $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \|\mathcal{Q}^\hbar(a) * \mathcal{Q}^\hbar(b) - \mathcal{Q}^\hbar(a \times b)\|_\hbar = 0$, dove

$$\mathcal{Q}^\hbar(a) * \mathcal{Q}^\hbar(b) \equiv \frac{1}{2}[\mathcal{Q}^\hbar(a) \mathcal{Q}^\hbar(b) + \mathcal{Q}^\hbar(b) \mathcal{Q}^\hbar(a)]. \quad 7.48$$

(d) *condizione di Dirac*

Per $a, b \in \mathcal{A}_0$ si ha $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \|\{\mathcal{Q}^\hbar(a), \mathcal{Q}^\hbar(b)\} - \mathcal{Q}^\hbar(\{a, b\})\|_\hbar = 0$ dove

$$\{\mathcal{Q}^\hbar(a), \mathcal{Q}^\hbar(b)\} \equiv \frac{1}{2\hbar}[\mathcal{Q}^\hbar(a) * \mathcal{Q}^\hbar(b) - \mathcal{Q}^\hbar(b) * \mathcal{Q}^\hbar(a)]. \quad 7.49$$

(e) *condizione di completezza*

$\mathcal{Q}^\hbar(\mathcal{A}_0)$ è denso in \mathcal{A}^\hbar per ogni $\hbar \in I$.

◇

Nota 7.10

La notazione *quantizzazione stretta* è introdotta per distinguerla dalle quantizzazioni per deformazione definite *in termini di serie formali* nel parametro \hbar .

♣

Ricordiamo che una *varietà di Poisson* è una varietà liscia \mathcal{M} che ammette su $C^\infty(\mathcal{M})$ una struttura di Poisson in cui il prodotto sia l'ordinario prodotto di funzioni su \mathcal{M} .

Definizione 7.7

Si definisce *quantizzazione completa di una varietà di Poisson* \mathcal{M} una scelta di una sottoalgebra \mathcal{A}_0 di $C^\infty(\mathcal{M})$ ed una quantizzazione stretta di questa sottoalgebra.

◇

In circostanze favorevoli, le applicazioni lineari \mathcal{Q}^\hbar sono morfismi per ogni valore di \hbar e definiscono strutture di *prodotto modificato* per ciascun valore di \hbar .

Definizione 7.8

Una quantizzazione stretta è detta *quantizzazione stretta per deformazione* se $\mathcal{Q}^\hbar(\mathcal{A}_0)$ è per ogni valore di \hbar una sottoalgebra di \mathcal{A}^\hbar e l'applicazione è iniettiva. In questo caso, possiamo definire il prodotto $\sharp : \mathcal{A}_0 \times \mathcal{A}_0 \rightarrow \mathcal{A}_0$ in modo tale che risulti

$$\mathcal{Q}^\hbar(A \sharp B) = \mathcal{Q}^\hbar(A)^\hbar * \mathcal{Q}^\hbar(B). \quad 7.50$$

◇

La quantizzazione di Weyl è una quantizzazione stretta per deformazione (corrisponde a *deformare* il prodotto tra due funzioni), e così è pure la quantizzazione di Wick che introdurremo nel cap. 11.

Consideriamo il caso importante in cui la struttura di Poisson è realizzata da funzioni reali di classe opportuna (ad esempio C^∞) sullo spazio delle fasi classico $T^*(R^d)$ e la corrispondente struttura quantistica è realizzata con una classe opportuna di operatori autoaggiunti sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H} = L^2(R^d)$. Considerazioni analoghe possono essere fatte nel caso $X = T^*(T^d)$.

Siano $\{x_k\}$ coordinate cartesiane in R^d . Poniamo per semplicità di notazione $\mathcal{Q}^{\hbar}(A) = \hat{A}$ sottintendendo il parametro \hbar . Cerchiamo una corrispondenza tra osservabili classiche A e osservabili quantistiche \hat{A} che soddisfi

- a) $A \leftrightarrow \hat{A}$ è lineare,
- b) $x_k \leftrightarrow \hat{x}_k$, dove \hat{x}_k è moltiplicazione per x_k ,
- c) $p_k \leftrightarrow \hat{p}_k \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$,
- d) La corrispondenza $A \leftrightarrow \hat{A}$ è tale che per funzioni continue

$$\widehat{f(x)} = f(\hat{x}), \quad \widehat{f(p)} = f(\hat{p}) = \mathcal{F}^{-1} f \mathcal{F}$$

dove \mathcal{F} indica la trasformata di Fourier.

- e) $L_\zeta \leftrightarrow \hat{L}_\zeta$ con $\zeta = (\alpha, \beta)$ per $\alpha, \beta \in R^d$. Qui L_ζ è il generatore simplettico delle traslazioni nella direzione ζ e \hat{L}_ζ è il generatore del gruppo di unitari $t \mapsto W(t\zeta) = W_\zeta(t)$ definito da

$$(W_\zeta(t)\phi)(x) = e^{\frac{i}{2}(t\alpha \cdot x + \frac{1}{2}t^2 \beta)} \phi(x + t \beta),$$

cioè il gruppo ad un parametro associato alla direzione ζ dall'algebra di Weyl.

Conviene notare che, attraverso opportuni processi di limite le condizioni a), e) implicano b), c).

Nota 7.11

La corrispondenza $A \leftrightarrow \hat{A}$ fa corrispondere a trasformazioni simplettiche lineari trasformazioni unitarie. Questo non è in generale vero per trasformazioni simplettiche non lineari, fatta eccezione per quelle che si ottengono per sollevamento da trasformazioni di coordinate in R^d .

♣

Si può dimostrare che le condizioni a), ..., e) caratterizzano completamente la corrispondenza $A \leftrightarrow \hat{A}$, che questa corrispondenza identifica la quantizzazione

di Weyl e che essa *non può essere estesa a tutte le funzioni sullo spazio delle fasi*. Infatti si ha il seguente teorema

Teorema 7.4 (Van Hove [Hov51])

Sia G la classe di funzioni C^∞ su R^{2d} che generano gruppi ad un parametro globali. Per $g \in G$ indicheremo con Φ_g il corrispondente gruppo.

Non esiste un'applicazione $g \mapsto \hat{g}$, con \hat{g} autoaggiunto, tale che

$$\begin{aligned} \hat{p}_k &= i \frac{\partial}{\partial x_k}, & \hat{x}_k &= x_k, & \widehat{a g + b h} &= a \hat{g} + b \hat{h} \\ \widehat{\{g, h\}} &= i[\hat{g}, \hat{h}], \\ (\Phi_s^f \circ \Phi_t^g \circ \widehat{\Phi_{-s}^f} \circ \Phi_{-t}^g) &= e^{is\hat{f}} e^{it\hat{g}} e^{-is\hat{f}} e^{-it\hat{g}}. \end{aligned} \tag{7.51}$$

◇

Un problema interessante nella quantizzazione è il seguente.

Sia \mathcal{Q} una quantizzazione con dominio $D(\mathcal{Q})$, sia $H(q, p) \in D(\mathcal{Q})$ una hamiltoniana su R^{2d} e sia $\mathcal{Q}(H) \equiv \hat{H}$. Supponiamo che \hat{H} sia un operatore autoaggiunto, e sia $U(t)$ il gruppo unitario corrispondente.

Sia $A \in D(\mathcal{Q})$ e sia A_t la sua evoluta secondo il flusso (classico) di equazione

$$\frac{dA}{dt} = \{H, A\}$$

e supponiamo che $A_t \in D(\mathcal{Q})$, $\forall t$. Ci possiamo chiedere quale sia la relazione tra $\mathcal{Q}(A_t)$ e $U(t)\mathcal{Q}(A)U(-t)$, cioè quale sia l'ostruzione alla commutatività del seguente diagramma

$$\begin{array}{ccc} \hat{A} & \xrightarrow{\Phi_q} & \hat{A}_t \\ \uparrow \mathcal{Q} & & \uparrow \mathcal{Q} \\ A & \xrightarrow{\Phi_{cl}} & A_t \end{array} \tag{7.52}$$

dove Φ_{cl} e Φ_q sono rispettivamente il flusso associato alla hamiltoniana classica H e il flusso associato alla hamiltoniana quantistica \hat{H} . Si può cercare una stima di

$$\|\mathcal{Q}(A)_t - \mathcal{Q}(A_t)\| \tag{7.53}$$

oppure di

$$|[\mathcal{Q}(A)_t - \mathcal{Q}(A_t)]\psi| \tag{7.54}$$

per un opportuno insieme denso di vettori ψ .

Un problema duale, che privilegia il ruolo della Meccanica Quantistica, è la stima di

$$\|\tilde{A}_t - A_t\|_\infty, \quad \|\tilde{A}_t - A_t\|_{L^p} \tag{7.55}$$

dove la funzione \tilde{A} , se esiste, è definita da

$$\mathcal{Q}(\tilde{A}_t) = \mathcal{Q}(A)_t.$$

Il problema successivo è quello di introdurre un (piccolo) parametro \hbar che in qualche modo codifichi la differenza tra il formalismo classico e quello quantistico e di richiedere che la quantizzazione \mathcal{Q}_\hbar possa essere definita per ogni $0 < \hbar \leq \hbar_0$. In particolare ci si deve aspettare che i termini in (7.53), (7.54), (7.55) siano infinitesimi in \hbar e che

$$[\mathcal{Q}_\hbar(A), \mathcal{Q}_\hbar(B)] = \frac{1}{\hbar} \mathcal{Q}_\hbar(\{A, B\}) + 0(1). \quad 7.56$$

Ci si può anche aspettare di trovare uno sviluppo asintotico in \hbar (in generale non convergente) dei termini in (7.53), (7.54), (7.55). Ciò significa trovare funzioni A_k , $k \in N$ con $A_0 = A$ tali che per ogni intero N valga

$$\|\mathcal{Q}_\hbar(A)_t - \sum_0^N \hbar^k \mathcal{Q}_\hbar(A_k)(t)\| \leq c_n \hbar^{N+1} \quad 7.57$$

per opportune costanti c_N . Lo sviluppo sarà solo asintotico se non si riesce a dimostrare che $\sup_N c_N < \infty$.

La risposta a questi quesiti dipende dalla realizzazione della corrispondenza $A \leftrightarrow \tilde{A}$.

Notiamo che anche in una quantizzazione stretta la serie (7.55) può non convergere per molti osservabili classici A ; in questo caso l'applicazione $A \mapsto \mathcal{Q}_\hbar(A)$ è ben definita per ogni $0 < \hbar \leq \hbar_0$ ma non è analitica.

Un problema interessante si presenta quando su un insieme A agisce un gruppo topologico G attraverso trasformazioni che lasciano invariata una opportuna struttura di A , e la cui azione è continua rispetto ad una opportuna topologia su A (ovvero per ogni $a \in A$, l'applicazione $a \rightarrow a_g = g(a)$ è continua). A può ad esempio essere una collezione di funzioni continue o differenziabili su una varietà di Poisson e la quantizzazione in esame potrebbe essere una quantizzazione stretta.

Se il gruppo topologico G agisce in modo continuo su A ci si può chiedere se $\mathcal{Q}_\hbar(a_g)$ sia un gruppo di trasformazioni \mathcal{G} continuo nella topologia di $\mathcal{Q}_\hbar(A)$.

Se G è un gruppo di Lie, analogo problema si può porre per la struttura differenziabile; ed ancora, se l'azione di G induce una fibrazione di A , allora ci si può chiedere se una fibrazione venga indotta pure su $\mathcal{Q}_\hbar(A)$. Un caso particolare che abbiamo già considerato precedentemente è dato quando G è il gruppo delle traslazioni nel tempo.

Se l'azione di G su A ammette generatori, ci si può chiedere come la quantizzazione scelta incida sulle proprietà spettrali dei generatori di \mathcal{G} .

Non trattiamo ulteriormente questo interessante problema, che costituisce tuttora un attivo campo di ricerca in matematica con applicazioni alla modellistica

in fisica dello stato solido e dei sistemi cristallini. Lo analizzeremo a livello elementare nel cap. 13, in occasione della trattazione dell'equazione di Schrödinger con potenziali periodici. Rimandiamo, per una prima lettura sul formalismo e le problematiche relative, a [L98, MPR07, N96, R89, R93].

7.3 CENNI SULLA QUANTIZZAZIONE GEOMETRICA

Terminiamo questo Capitolo con una breve descrizione di un'altra forma di quantizzazione, detta *quantizzazione geometrica*. Questa teoria, iniziata da B.Kostant e B.Souriau negli anni '70, ha avuto un notevole sviluppo negli anni successivi ed è tuttora oggetto di intensa ricerca. Per una prima esposizione si può vedere [GS84]; per sviluppi recenti si può vedere [Ham10].

A differenza della quantizzazione per deformazione, che si collega alla formulazione algebrica della Meccanica Quantistica, la quantizzazione geometrica si collega alla formulazione *ondulatoria* e tende a costruire, a partire dallo spazio delle fasi della meccanica Hamiltoniana classica, uno spazio di Hilbert in cui formulare una teoria quantistica. In questo senso la *rappresentazione complessa* di Bargmann-Segal e la rappresentazione mediante funzioni di Wigner che discuteremo nel cap. 11 sono quantizzazioni geometriche. Ne vedremo un semplice esempio nell'Appendice A al cap. 8, nell'ambito dell'analisi semiclassica con il metodo W.K.B..

Lo scopo della quantizzazione geometrica è quindi di associare ad una varietà simplettica $\{M, \omega\}$ (dove ω è una due-forma chiusa) uno spazio di Hilbert $Q(M)$. Lo spazio di Hilbert viene costruito mediante le fibre di un fibrato V a valori complessi su M sul quale è definita una connessione la cui curvatura è ω . Ricordiamo che, indicando con $\Gamma(V)$ l'insieme delle sezioni lisce di V , una connessione ∇ è un'applicazione

$$\nabla : \Gamma(V) \rightarrow \Omega^1(M) \otimes \Gamma(V)$$

(dove $\Omega^1(M)$ è lo spazio delle 1-forme su M) che soddisfa

$$\begin{aligned} \nabla(\sigma_1 + \sigma_2) &= \nabla\sigma_1 + \nabla\sigma_2, \\ \nabla(f\sigma) &= (df) \otimes \sigma + f\nabla\sigma. \end{aligned}$$

Assumeremo sempre che il fibrato sia localmente trivializzabile (riducibile a un fibrato prodotto) in un intorno U di ogni punto di M mediante una trasformazione di coordinate. Questo permette di rappresentare in ogni punto di U la connessione mediante una 1-forma Θ .

Con questa notazione la *curvatura* associata alla connessione è data da $\Omega = \nabla\Theta$. Si vede facilmente che il risultato è indipendente dalla trivializzazione scelta. Una connessione è *piatta* se $\Omega = 0$.

Lo spazio delle sezioni è in generale *troppo grande*. Ad esempio, se $M = X \otimes T^*X$, con X spazio delle configurazioni di un sistema meccanico, se la

connessione è piatta, e si considerano tutte le sezioni, lo spazio di Hilbert che si costruisce in modo naturale è $L^2(M, dl)$ dove dl è la misura di Lebesgue, mentre lo spazio utilizzato in meccanica quantistica è $L^2(X, dl)$. È quindi necessario considerare solo un sottoinsieme delle sezioni di V . Questo procedimento viene detto *polarizzazione*. Varie sono le polarizzazioni considerate (corrispondenti grosso modo a varie scelte di *variabili coniugate*).

Una possibile scelta è la *polarizzazione di Kähler*, che è determinata dalla struttura complessa di M (essendo M una varietà simplettica, la 2-forma simplettica definisce localmente una struttura complessa). Le sezioni scelte sono allora quelle olomorfe.

Un'altra possibile scelta è la polarizzazione definita dallo scegliere la foliazione in *varietà lagrangiane*. La chiameremo *polarizzazione reale*.

Si può notare l'analogia con le due rappresentazioni dell'algebra di Weyl, quella reale e quella complessa di Bargmann-Segal.

Ad esempio nel caso dell'atomo di idrogeno è naturale considerare la varietà di dimensione 6, data come luogo dei punti nello spazio della fasi per i quali l'energia (che è conservata lungo il flusso hamiltoniano) è strettamente negativa. La struttura simplettica è quella standard.

In questo caso le fibre sono compatte (tranne quella associata all'origine, in cui il potenziale è singolare) e la fibrazione può essere ristretta utilizzando solo le *fibre di Bohr-Sommerfeld*, cioè le fibre su cui è definita una sezione globale che è piatta su tutta la fibra (così che siano definite globalmente le variabili azione-angolo). Si dimostra [GS84] che l'insieme delle fibre di Bohr-Sommerfeld è un insieme discreto e questo porta alla quantizzazione di Bohr-Sommerfeld.

Dal punto di vista dell'analisi semiclassica questo può essere interpretato come il sostituire, per il sottospazio che corrisponde a energia negative dell'atomo di idrogeno, lo spazio di Hilbert con uno spazio di funzioni il cui supporto è l'insieme delle orbite di Bohr-Sommerfeld.

Naturalmente la definizione di *fibre di Bohr-Sommerfeld* può essere esteso ad una generica varietà compatta, e questo estende la definizione di quantizzazione. Notiamo che spesso la varietà su cui descrivere la quantizzazione è localmente isomorfa ad una varietà toroidale foliata da fibre definite da un'applicazione momento.

Per ulteriori approfondimenti relativamente a questo interessante campo di ricerca rimandiamo a [GS84].

APPENDICE 7A: L'ALGEBRA DI WEYL MAGNETICA

Presentiamo brevemente in quest'appendice la *algebra di Weyl Magnetica*, modificazione dell'algebra di Weyl utile nella trattazione di sistemi di particelle in interazione con il campo magnetico.

Abbiamo visto che l'algebra di Weyl è uno strumento adatto a *quantizzare* la Meccanica Hamiltoniana su R^d utilizzando la forma symplettica standard.

In Meccanica classica, nella trattazione di interazioni con un campo magnetico può convenire, anziché modificare la hamiltoniana attraverso una diversa definizione di momento, lasciare invariata la hamiltoniana e utilizzare parentesi di Poisson modificate, le *parentesi di Poisson magnetiche*.

Analogamente in Meccanica Quantistica, se si trattano sistemi di particelle non relativistiche interagenti tra loro e anche con un campo magnetico esterno, può risultare opportuno utilizzare un'algebra di Weyl modificata detta algebra di Weyl magnetica. Questo permette talora di mettere in luce effetti topologici dovuti alla presenza del campo magnetico.

Ricordiamo brevemente la struttura di Poisson associata a una varietà symplettica, in particolare la varietà costituita dallo spazio delle fasi $\mathcal{M} = T^*\mathcal{C}$ di una particella; identificheremo lo spazio delle configurazioni \mathcal{C} con R^d , $d \geq 2$ (perché sia compatibile con la presenza di un campo magnetico).

Ciascuna fibra del fibrato tangente è una copia di R^d , e così pure con R^d può essere identificata ciascuna fibra del fibrato cotangente. Indicheremo con $q \equiv \{q_1, \dots, q_d\}$ un sistema di coordinate riferite ad assi ortogonali e con $\{p_1, \dots, p_d\}$ coordinate riferite ad assi ortogonali nelle fibre del cotangente.

Una struttura symplettica su \mathcal{M} è data da una 2-forma chiusa non degenere $\Sigma \in \Omega^2\mathcal{M}$ (lo spazio delle 2-forme su \mathcal{M}). Notiamo che Σ , essendo non degenere, definisce univocamente un isomorfismo $\beta : \Omega^1 \rightarrow \Xi(\mathcal{M})$ (il fibrato dei campi vettoriali su \mathcal{M}). Con la definizione

$$\{f, g\}_\Sigma = \Sigma(\beta(df), \beta(dg)) \quad 7A.1$$

la varietà symplettica ha una struttura di Poisson. Nel caso $\mathcal{M} = R^d$ e in assenza di campo magnetici, la struttura symplettica più frequentemente utilizzata è la struttura symplettica standard σ , data da

$$\sigma : \Xi \times \Xi \rightarrow R, \quad \sigma[(q, p), (q', p')] = q' \cdot p - q \cdot p'. \quad 7A.2$$

Trattiamo per semplicità solo il caso di una particella soggetta ad un campo magnetico esterno B in R^3 ; il caso di M particelle si tratta in modo analogo. Per una particella non relativistica di massa m in un campo di potenziale (scalare) V la dinamica in presenza di un campo magnetico può essere descritta mediante la hamiltoniana

$$H(p, q) = \frac{1}{2m}(p + eA(q))^2 + V(q), \quad \text{rot } A = B \quad 7A.3$$

utilizzando la forma symplettica (7A.2). Essa può essere descritta equivalentemente mediante la hamiltoniana $H'(p, q) = \frac{1}{2m}p^2 + V(q)$ ma allora deve essere modificata la forma symplettica con l'aggiunta di una 2-forma chiusa

$B \in \Omega^2(R^d)$, in modo tale che la 2-forma risultante sia chiusa e non degenera (e dia quindi luogo ad una nuova struttura di Poisson).

Questa modificazione viene fatta nel modo seguente. Notiamo che su una varietà di dimensione 3 il campo magnetico B è una 2-forma che per il lemma di Poincaré può essere rappresentata localmente come il differenziale di una 1-forma e quindi, per la dualità di Hodge, con un campo vettoriale A . Questa rappresentazione ha un'intrinseca ambiguità. Infatti due *potenziali vettori definiti localmente da* $A(x)$, $A'(x) \in R^3$, $x \in R^3$ danno origine alla stessa 2-forma che rappresenta (localmente) il campo magnetico se si ha $A'(x) - A(x) = \nabla\phi(x)$ dove $\phi(x)$ è una funzione di classe C^1 (invarianza di gauge locale). Chiameremo *gruppo di gauge* il gruppo delle trasformazioni di questa natura.

In coordinate locali, per $d = 3$, il campo magnetico è rappresentato dal tensore antisimmetrico dato da (7A.3) e quindi corrisponde alla due forma antisimmetrica $B = (\partial_i A_k - \partial_k A_i) dx_k \wedge dx_i$. Questa forma è per costruzione invariante per cambiamenti di gauge; essa dipende solo dal campo magnetico.

Il vantaggio di questa costruzione è che il formalismo si estende a varietà \mathcal{M} molto generali, e che si possono utilizzare per il campo magnetico forme chiuse ma non esatte. Ad esempio si può introdurre il campo magnetico di un filo rettilineo percorso da corrente elettrica. La corrispondente due-forma è chiusa ma non esatta, e la circolazione attorno all'asse del filo dà origine a effetti topologici (effetto Bohm-Aharanov).

Consideriamo solo il caso in cui lo spazio delle configurazioni è R^3 . È facile vedere che in coordinate locali naturali q_k, p_h , $h, k = 1, 2, 3$ su $T^*R^3 \equiv R^3 \times R^3$ le equazioni del moto

$$\dot{q}_k = \frac{1}{m} p_k, \quad \dot{p}_k = \frac{e}{m} \sum_{h=1}^3 B_{k,h}(q) p_h \quad 7A.4$$

associate alla hamiltoniana (7A.3) dalla forma simplettica $\sigma = \sum_k dp_k \wedge dq_k$ coincidono con le equazioni associate alla hamiltoniana

$$H_0(p, q) = \frac{1}{2m} p^2 + V(q)$$

dalla forma simplettica

$$\sigma_B = \sum_k dp_k \wedge dq_k + \frac{e}{m} \sum_{h,k=1}^3 B_{h,k} dq_h \wedge dq_k$$

Le corrispondenti parentesi di Poisson che descrivono l'azione del campo vettoriale sulle funzioni lisce sono

$$\{f, g\}_B = \sum_{h,k=1}^3 \left(\frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial g}{\partial q_h} - \frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial g}{\partial p_h} + \frac{e}{m} B_{h,k} \frac{\partial f}{\partial q_h} \frac{\partial g}{\partial q_k} \right) \quad 7A.5$$

Le equazioni del moto (7A.4) sono invarianti per trasformazioni di gauge (contengono solo il campo magnetico) mentre la hamiltoniana (7A.3) varia (per una derivata totale).

Sembra naturale eseguire la quantizzazione utilizzando un formalismo che sia invariante per trasformazioni di gauge. Questo porta ad introdurre le *traslazioni magnetiche* e l'*algebra di Weyl magnetica* [Zak68, KO04, MP04].

Cerchiamo le applicazioni $x \mapsto \alpha_x$, $x \in R^3$ che corrispondono a trasformazioni simplettiche e che hanno la forma

$$\alpha_x\{q, p\} = \{q + x, p + \tau_x(q, p)\} \quad x \in R^3 \quad 7A.6$$

per un'opportuna funzione $\tau_x((q, p))$. La proprietà di gruppo implica

$$\tau_{x+y}(q, p) = \tau_x(q, p) + \tau_y(q + x, p + \tau_x(q, p)).$$

La condizione di essere simplettica è

$$\alpha_x^*(\sigma_B) = \sigma_B.$$

Un facile calcolo mostra che questa identità si traduce in

$$T_{-x;i,j}(q, p)dq_i \wedge dq_j + S_{-x;i,j}(q - px)dq_j \wedge dp_i = 0$$

dove

$$\begin{aligned} T_{x;i,j}(q, p) &= \frac{\partial}{\partial q_i} \tau_x(q, p) - \frac{\partial}{\partial q_j} \tau_x(q, p) + eB(q)_{j,i} - eB(q+x)_{j,i} \\ S_{x;i,j}(q, p) &= \frac{\partial}{\partial p_j} (\tau_x(q, p))_i \end{aligned}$$

Da queste relazioni si deduce che

$$\frac{\partial \tau_x(q, p)}{\partial p_k} = 0, \quad k = 1, 2, 3$$

e inoltre

$$\frac{\partial}{\partial q_j} (\tau_x(q, p))_k - \frac{\partial}{\partial q_k} (\tau_x(q, p))_j + eB(q)_{j,k} - eB(q+x)_{j,k} = 0. \quad 7A.7$$

Per determinare in modo esplicito τ dobbiamo invertire la relazione differenziale (7A.7); questa può essere scritta nella sua versione infinitesima, tenuto conto del fatto che il campo magnetico è una forma differenziale esatta (almeno localmente)

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_{-tx}(q, p)_{t=0} = -(x, e(dA(q)) \cdot x)$$

per una 1-forma A che soddisfa $dA = B$ (in coordinate $(rotA)_{i,j} = B_{i,j}$). Sarà questa l'origine dell'ambiguità di gauge. La soluzione $A(q)$ di (7A.7) è

$$\tau_x(q) = eA(q+x) - A(q) \quad \text{rot}A = B \quad 7A.8$$

ed è definita a meno del gradiente di una funzione (gauge). Ne segue che le traslazioni magnetiche sono definite a meno di una trasformazione di gauge.

Ricordiamo che in Meccanica Hamiltoniana il momento μ_{Ξ} associato a un campo vettoriale Ξ (quindi a una *trasformazione infinitesima*) è dato dalla contrazione della forma simplettica con il campo vettoriale.

Si può vedere che la *applicazione momento* associata alla traslazione α_x (o piuttosto alla sua parte infinitesima) è $\mu_A(q,p) = p - eA(q)$.

Per il teorema di Gauss, l'integrale della 1-forma A lungo un circuito chiuso è uguale al flusso del campo magnetico attraverso una superficie il cui bordo è il circuito stesso. Le traslazioni magnetiche lungo un circuito chiuso possono quindi generare un'olonomia non banale se la 2-forma che rappresenta il campo magnetico è chiusa ma non esatta.

Questo avrà importanza nella quantizzazione.

La quantizzazione di Heisenberg-Weyl non presenta eccessivi problemi poichè la forma simplettica nel prodotto di convoluzione che definisce l'algebra di Weyl può essere sostituita dalla forma simplettica magnetica. Ma la trascrizione in rappresentazione di Schrödinger richiede una scelta di gauge, coerentemente al fatto che la hamiltoniana classica (e quindi la hamiltoniana quantistica) dipende dalla scelta del gauge. Tutti i valori d'aspettazione delle osservabili saranno *indipendenti da scelte di gauge*.

Questo corrisponde al fatto che nella rappresentazione di Schrödinger le trasformazioni di gauge sono rappresentate da trasformazioni unitarie, e gli operatori che corrispondono a grandezze osservabili si trasformano secondo la rappresentazione aggiunta, per cui i valori d'aspettazione sono invarianti per trasformazioni di gauge. La scelta di un particolare gauge in cui formulare la rappresentazione di Schrödinger (e quindi utilizzare lo strumento delle equazioni alle derivate parziali e l'analisi di Fourier) corrisponde nella quantizzazione geometrica a una scelta della varietà lagrangiana locale.

Tenendo conto del formalismo che abbiamo descritto, il prodotto di deformazione di Weyl (o di Moyal-Weyl) diventa, nel caso sia presente un campo magnetico B in dimensione N

$$(f *_B^{\hbar} g)(\xi) = \left(\frac{2}{\hbar}\right)^{2d} \int d\eta \int d\zeta e^{-\frac{2i}{\hbar}\sigma(\eta,\zeta) - \frac{i}{\hbar} \int_{\mathcal{T}(q,y,z)} B(\eta,\zeta)} f(\xi - \eta)g(\xi - \zeta) \quad 7A.9$$

dove abbiamo indicato con il simbolo $\mathcal{T}(q,y,z)$ la proiezione sullo spazio delle configurazioni del triangolo $\mathcal{T}(\xi,\eta,\zeta)$ individuato dai vettori $\xi = (q, p_{\xi})$, $\eta = (y, p_{\eta})$ e $\zeta = (z, p_{\zeta})$. Il prodotto descritto da (7A.9) viene comunemente

chiamato *prodotto magnetico di Moyal*. Come il prodotto che definisce l'algebra di Weyl, anche esso è associativo, non commutativo e soddisfa

$$(f *_{\hbar}^B g)^* = (g *_{\hbar}^B f) \quad 7A.10$$

se f e g sono a valori reali. Diamo al prodotto (7A.9) un'espressione più conveniente. Utilizzando la trasformata di Fourier, è facile vedere che il prodotto di Weyl-Moyal può essere posto nella forma alternativa

$$(f *_{\hbar}^B g)(\xi) = \int_{\Xi} d\eta \int_{\Xi} d\zeta e^{-\frac{i}{\hbar}\sigma(\xi-\eta, \xi-\zeta)} f(\eta)g(\zeta)$$

dove Ξ è lo spazio delle fasi, e $\xi, \eta, \zeta \in \Xi$. Conseguentemente, il prodotto di Weyl-Moyal magnetico prende la forma

$$(f *_{\hbar}^B g)(\xi) = \int_{\Xi} d\eta \int_{\Xi} d\zeta e^{-\frac{i}{\hbar}(\sigma+eB)(\xi-\eta, \xi-\zeta)} f(\eta)g(\zeta). \quad 7A.11$$

Se il campo magnetico è di classe C^∞ , il prodotto di Weyl-Moyal magnetico applica $\mathcal{S}(R^d) \times \mathcal{S}(R^d)$ in $\mathcal{S}(R^d)$.

Questo prodotto si estende per dualità ad un'applicazione $\mathcal{S}(R^d) \times \mathcal{S}'(R^d)$ in $\mathcal{S}'(R^d)$ mediante la formula

$$(F *_{\hbar}^B f, g) = (F, f *_{\hbar}^B g), \quad (f *_{\hbar}^B F, g) = (F, g *_{\hbar}^B f) \quad 7A.12$$

con $F \in \mathcal{S}'(R^d)$, $f \in \mathcal{S}(R^d)$ e, ancora per dualità e procedimento di limite, ad un'applicazione $\mathcal{S}'(R^d) \times \mathcal{S}'(R^d)$ in $\mathcal{S}'(R^d)$ che soddisfa

$$(F *_{\hbar}^B G, f) = (G, F *_{\hbar}^B f) \quad 7A.13$$

con $F, G \in \mathcal{S}'$, $f \in \mathcal{S}$. La risultante algebra di Weyl magnetica (l'algebra delle funzioni sullo spazio delle fasi con la legge di prodotto (7A.10) è utile per comporre osservabili quantistici in presenza di un campo magnetico in modo invariante per trasformazioni di gauge. Notiamo infatti che esso dipende solamente dal campo magnetico.

Analizzando la trasformata di Wigner nel cap. 11 vedremo che può convenire in Meccanica Quantistica utilizzare una rappresentazione che si riferisce a funzioni su $\mathcal{M} \times \mathcal{M}$ anzichè a funzioni su $\mathcal{C} \times \mathcal{C}^*$ dove \mathcal{C} è lo spazio delle configurazioni. Nel caso $\mathcal{C} = R^d$ che stiamo trattando, si ottiene questo mediante trasformata di Fourier nella seconda variabile, tenendo conto che $p_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_k}$.

Con la notazione $\phi = (I \otimes \mathcal{F})f$, dove \mathcal{F} è la trasformata di Fourier, la legge di moltiplicazione che definisce l'algebra di Weyl magnetica risulta essere

$$(\phi *_{\hbar}^B \psi)(q, x) = \int_{R^d} dy \phi\left(q - \frac{\hbar}{2}(x-y), y\right) \psi\left(q + \frac{\hbar}{2}y, x-y\right) e^{-\frac{i}{\hbar}\Phi_B(q;x;y)} \quad 7A.14$$

dove $\Phi_B(q; x; y)$ è il flusso del campo magnetico attraverso il triangolo definito dai punti $\{q - \frac{\hbar}{2}x, q - \frac{\hbar}{2}x + \hbar y, q + \frac{\hbar}{2}x\}$. Notiamo che nella definizione dell'algebra di Weyl-Moyal magnetica interviene solamente il campo magnetico. Nelle rappresentazioni di quest'algebra sullo spazio di Hilbert $L^2(R^d)$ è necessario invece far uso del potenziale vettore magnetico $A(x)$ connesso al campo magnetico da $B(x) = \text{rot } A(x)$.

Questa relazione non ha inverso unico, e le soluzioni differiscono una dall'altra per un termine additivo di tipo gradiente (almeno localmente)

$$A'(x) = A(x) + \nabla\phi \quad 7A.15$$

dove $\phi(x)$ è un campo scalare. Vedremo che le rappresentazioni che corrispondono a diverse scelte di A sono tra loro equivalenti, e daremo esplicitamente l'operatore unitario che realizza l'equivalenza.

La necessità di introdurre il potenziale vettore, e quindi rappresentazioni di Schrödinger equivalenti, ha origine dal fatto che nella rappresentazione di Schrödinger (mediante funzioni nello spazio delle configurazioni) esistono operatori unitari che commutano con gli elementi dell'algebra di Weyl magnetica. Questo è l'equivalente quantistico dell'invarianza di gauge classica.

Anzichè derivare questa proprietà da un'analisi generale delle rappresentazioni delle algebre di funzioni definite da un *prodotto con torsione* (come l'algebra di Weyl) diamo direttamente la costruzione nel caso dell'algebra di Weyl magnetica nello spazio delle configurazioni R^3 (rappresentazione di Schrödinger).

Sia $A = A_k(x)dx_k$ una 1-forma in R^3 (potenziale vettore nella dualità di Hodge tra 1-forme e campi vettoriali) tale che $dA = B$. In coordinate

$$B = h(x, y)_{k,j} dx_k \wedge dx_j, \quad h(x, y)_{k,j} = \frac{\partial A_k(x)}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j(x)}{\partial x_k}. \quad 7A.16$$

Se $x, y \in R^3$, definiamo $\Gamma_A[x, y]$ essere l'integrale della 1-forma A lungo il segmento

$$[x, y] \equiv \cup_{s \in [0,1]} [sx + (1-s)y].$$

Notiamo che per il teorema di Stokes, indicato con $\Omega_B(q_1, q_2, q_3)$ il flusso della 2-forma B attraverso il triangolo determinato dai punti q_1, q_2, q_3 si ha

$$\Omega_B(q, q+\hbar x, q+\hbar x+\hbar y) = \Gamma_A[q, q+\hbar x] \Gamma_A[q+\hbar x, q+\hbar x+\hbar y] (\Gamma_A[q+\hbar x+\hbar y])^{-1}. \quad 7A.17$$

Posto

$$\omega_B^{\hbar}(q, x, y) = e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega_B(q, x, y)}, \quad \lambda_A^{\hbar}(q, x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\Gamma_A([q, q+\hbar x])}$$

si ottiene

$$\omega_B^{\hbar}(q, x, y) = \lambda_A^{\hbar}(q, x) \lambda_A^{\hbar}(q + \hbar x, y) (\lambda_A^{\hbar}(q, x + y))^{-1}. \quad 7A.18$$

Se poniamo

$$[U_A^{\hbar}(x)\phi](q) = \lambda_A^{\hbar}(q, x)\phi(q + \hbar x), \quad V^{\hbar}(p)\hat{\phi}(k) = \phi(k + p) \quad 7A.19$$

si vede che questi operatori unitari generano una rappresentazione, determinata dalla 1-forma A , dell'algebra di Weyl magnetica associata alla 2-forma magnetica B .

Utilizzando l'equazione (7A.19) si può facilmente verificare che se si modifica la 1-forma A in $A' = A + d\Phi$, dove Φ è un campo scalare sufficientemente regolare, si ottiene

$$e^{\frac{i}{\hbar}\Phi(q)}[U_A^{\hbar}(x)\phi](q) = [U_{A'}^{\hbar}(x)\phi]e^{\frac{i}{\hbar}\Phi(q)}.$$

Si può notare che l'algebra di Weyl magnetica è descritta dalle seguenti relazioni

$$[Q_j, Q_k] = 0, \quad [Q_k, \Pi_{A,j}^{\hbar}] = i\hbar\delta_{i,j}, \quad [\Pi_{A,j}^{\hbar}, \Pi_{A,k}^{\hbar}] = i\hbar B_{k,j}. \quad 7A.20$$

Indicato con $e^{iQ \cdot p}$ il gruppo che induce traslazioni in trasformata di Fourier e con

$$U_A^{\hbar}(x) \equiv e^{ix\Pi_A^{\hbar}} \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\Gamma_A[Q, Q+\hbar x]}e^{ix \cdot P}$$

il gruppo delle traslazioni magnetiche nello spazio delle configurazioni, si ha

$$U_A^{\hbar}(x)U_A^{\hbar}(x') = \omega_B^{\hbar}(Q, x, x')U_A^{\hbar}(x + x'),$$

ed una rappresentazione del gruppo di Weyl magnetico è data dagli operatori unitari

$$W_A^{\hbar}(q, p) \equiv e^{-i\sigma(q,p; Q, \Pi_A^{\hbar})} = e^{-\frac{i}{2}q \cdot p} e^{-iQ \cdot p} U_A^{\hbar}(x). \quad 7A.21$$

Nota 7A.1

Nel caso di campo magnetico costante considerando un sistema planare nel piano perpendicolare al campo magnetico le relazioni (7A.20) assumono la forma

$$[Q_1, Q_2] = 0, \quad [\Pi_1, \Pi_2] = i\hbar B, \quad [Q_k, \Pi_j] = i\hbar\delta_{k,j}. \quad 7A.22$$

È facile verificare che, posto

$$K_j = P_j - \frac{1}{\hbar B}\epsilon_{j,k}Q_k,$$

(dove $\epsilon_{j,k}$ e' il simbolo totalmente antisimmetrico) si hanno le relazioni

$$[K_j, K_m] = \frac{1}{\hbar B}\epsilon_{m,j}, \quad [\Pi_j, \Pi_k] = i\hbar B\epsilon_{j,k}, \quad [K_j, \Pi_k] = 0. \quad 7A.23$$

Si può notare che la coppia K_1, K_2 genera un'algebra di Heisenberg, e lo stesso vale per la coppia Π_1, Π_2 . Queste algebre commutano fra loro.

Una loro rappresentazione nello spazio $L^2(R^2, dx_1 dx_2)$ è data da

$$\begin{aligned} K_1 &\equiv x_1, & \Pi_2 &\equiv x_2 \\ K_2 &\equiv i\hbar B \frac{\partial}{\partial x_1}, & \Pi_1 &\equiv \frac{i}{\hbar B} \frac{\partial}{\partial x_2} \end{aligned}$$

Da (7A.23) si può risalire alla trasformazione simplettica tra questa rappresentazione e quelle nello spazio $L^2(R^2, dQ_1 dQ_2)$.



RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [Gro67] L. Gross, *J. Funct. Analysis* 1 (1967), 123-181.
- [GS84] V. Guillemin, S. Sternberg, *Symplectic Techniques in Physics*, Cambridge University Press (1984).
- [Ham10] M. Hamilton, *Locally Toric Manifolds and singular Bohr-Sommerfeld leaves*, *Memoirs of the AMS*, vol. 207, n.971 (2010).
- [KO04] M.V. Karasev, T.A. Osborn, *J. Phys. A* 37 (2004) 2345-2363.
- [L98] N.P. Landsman, *J. Math. Phys.* 39 (1998) 6372-6383.
- [MP04] M. Mantoiu, R. Purice, *J. Math. Phys.* 45 (2004) 1394-1417.
- [MPR07] M. Mantoiu, R. Purice, S. Richards, *J. Funct. Analysis* 250 (2007) 42-67.
- [N96] M. Nilsen, *Indiana U. Math. J.* 45 (1996) 463-478.
- [R89] M. Rieffel, *Math. Ann.* 283 (1989) 631-643.
- [R93] M. Rieffel, *Deformation quantization for actions of R^d* , *Memoirs of the AMS* 506 (1993).
- [Hov51] L. Van Hove, *Mem. Acad. Roy. Belgique* 26 (1951) 61-102.
- [Zak68] J. Zak, *Phys. Rev.* 168 (1968) 686-695.

CAPITOLO 8
LIMITE SEMICLASSICO I. STATI COERENTI. METODO W.K.B.

Il principio di corrispondenza nel senso di Bohr afferma che per gli stati legati, in corrispondenza a livelli quantici molto elevati (e quindi a differenze di energia molto piccole tra livelli successivi), la descrizione dei processi di emissione e assorbimento della luce data dalla Meccanica Quantistica deve tendere a coincidere con quella data dalla Meccanica Classica.

Più in generale, includendo anche la Meccanica ondulatoria di Schrödinger, si può considerare che il principio di corrispondenza sia *grosso modo* la regola seguente: le previsioni della Meccanica Quantistica devono differire di poco da quelle della Meccanica Classica quando il valore della costante di Planck è *molto piccolo rispetto agli altri parametri del sistema che hanno la dimensione di un'azione*.

Questo principio viene tradotto dal punto di vista della matematica nello studio del comportamento delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \hbar \Delta \phi + \hbar^{-1} V \phi \quad 8.1$$

quando il parametro \hbar tende a zero.

In (8.1) abbiamo diviso entrambi i termini dell'equazione di Schrödinger per \hbar , un'operazione legittima per $\hbar \neq 0$.

La grandezza \hbar ha le dimensioni di un'azione, ed è una costante fisica e non ha pertanto senso che \hbar sia fatta tendere a 0. Per tradurre i risultati matematici che otterremo in affermazioni relative a grandezze fisiche è importante dunque individuare per ogni sistema i parametri fisici rilevanti e tradurre l'affermazione matematica $\hbar \rightarrow 0$ in termini di questi parametri.

Si vede da queste considerazioni che l'operazione $\hbar \rightarrow 0$ e le stime $O(\hbar^\alpha)$ che daremo non hanno carattere universale, ma richiedono un'accurata analisi del sistema fisico in esame e delle sue dimensioni caratteristiche. In generale questa analisi è la parte più difficile nella formulazione di un'approssimazione semiclassica che abbia rilevanza fisica.

Qui ci limiteremo a discutere alcune semplici proprietà *matematiche* dell'approssimazione semiclassica intesa come ricerca delle equazioni cui soddisfa il limite $\hbar \rightarrow 0$ di una soluzione dell'equazione di Schrödinger (8.1) *quando i dati iniziali siano scelti opportunamente*.

Notiamo che dal punto di vista della matematica si tratta di un *limite singolare*, poiché tende a zero il coefficiente del termine con la derivata spaziale di

ordine più alto e tende all'infinito il termine di potenziale. Dobbiamo pertanto aspettarci che il limite della soluzione *esista solo per un'opportuna classe di dati iniziali*, e che in questi casi il sistema limite che si ottiene soddisfi un'equazione diversa dalla (8.1). Vedremo che per la classe dei dati iniziali che sceglieremo l'equazione soddisfatta nel limite è l'equazione di Hamilton classica relativa allo stesso potenziale.

La classe dei dati iniziali che consideriamo comprenderà due sottoclassi: quella degli stati *ben localizzati nello spazio delle fasi*, che chiameremo *stati coerenti*, e quella degli stati la cui funzione d'onda ha una fase *fortemente oscillante su scala \hbar* nello spazio delle configurazioni, che chiameremo stati *W.K.B.* (da Wentzel, Kramers e Brillouin). Questi ultimi porteranno alle equazioni del moto in forma Lagrangiana con delle stime che sono simili a quelle che caratterizzano l'ottica geometrica.

A) Una prima classe di funzioni consentite per un limite semiclassico (stati coerenti generalizzati) è composta da funzioni localizzate in un intorno di diametro $O(\sqrt{\hbar})$ di un punto dello spazio delle configurazioni e la cui trasformata di Fourier è localizzata in un intorno di diametro $O(\sqrt{\hbar})$ di un punto p_0 dello spazio dei momenti. Per queste funzioni si ha $\frac{1}{\hbar}|(\nabla V)(x_0)(x-x_0)| = O(\frac{1}{\sqrt{\hbar}})$ se $V(x)$ è di classe C^1 e $\hbar|\Delta\phi(x)| = O(1)$.

In questo caso l'analisi delle singolarità dei termini dell'equazione (8.1) e il confronto con l'equazione classica che determina il moto del centro di localizzazione dà luogo a due equazioni di compatibilità ottenute richiedendo che nella differenza tra le due soluzioni sia nullo sia il termine $O(\frac{1}{\sqrt{\hbar}})$ che il termine residuo $O(1)$; in quest'analisi si fa uso anche delle equazioni per il flusso tangente classico.

In questo modo otteniamo le equazioni di Hamilton.

B) Una seconda classe di funzioni (stati W.K.B.) sarà costituita da funzioni d'onda ϕ che sono della forma $\rho(x)e^{\frac{i}{\hbar}S(x;t)}$ (con $\rho(x;t)$ e $S(x;t)$ sufficientemente regolari); la fase di queste funzioni è fortemente oscillante nel limite $\hbar \rightarrow 0$.

Il senso di questa condizione è facilmente comprensibile quando si noti che per $V = 0$ le funzioni

$$f(x, t) = \int \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar}[(x,p) - \frac{p^2 t}{2}]} dp$$

risolvono l'equazione di Schrödinger con dato iniziale $f(x, 0)$.

La condizione che l'equazione (8.1) sia soddisfatta fornisce una relazione tra le funzioni $\rho(x;t)$ e $S(x;t)$; questo porterà ad un'equazione di Hamilton-Jacobi, l'equazione classica del moto (in forma lagrangiana) che deve essere soddisfatta dalla traiettoria con dato iniziale $(x_0, \nabla S(x_0))$.

Notiamo che l'analisi che faremo è valida nell'ipotesi che lo spazio della fasi del sistema classico limite sia $R^N \times R^N$ con la struttura simplettica standard e lo spazio delle configurazioni della Meccanica Quantistica sia R^N .

Nell'analisi del moto delle funzioni ben localizzate nello spazio delle fasi questa richiesta non è essenziale, poiché l'analisi ha carattere locale, e può essere estesa senza difficoltà al caso in cui il sistema quantistico sia definito su uno spazio delle configurazioni Σ localmente diffeomorfo a R^N così che lo spazio fibrato cotangente della corrispondente teoria classica sia $T^*(\Sigma)$ (prestando attenzione a sostituire il Laplaciano con l'operatore di Laplace-Beltrami).

In questo caso si cerca di ottenere una corrispondenza con le traiettorie descritte dalla Meccanica Classica sul $T^*(\Sigma)$ dotato di un'opportuna struttura simplettica (che riflette la struttura dell'algebra di Heisenberg data dagli operatori che rappresentano moltiplicazione per coordinate locali e gli operatori che generano sulle funzioni su Σ le traslazioni lungo geodetiche).

Nel caso in cui la varietà abbia una struttura topologica diversa da R^N bisogna prestare attenzione a definire correttamente il laplaciano. Ad esempio, se σ è il toro T^N con coordinate angolari θ_k , il gradiente ed il Laplaciano vengono solitamente definiti sulla classe di funzioni differenziabili su $[0, 2\pi]^N$ con condizioni periodiche al bordo.

L'estensione al caso di una generica varietà Σ del metodo W.K.B., che utilizza funzioni oscillanti, richiede più attenzione nel caso perché l'estensione a tutti i tempi delle soluzioni dell'equazione di Hamilton-Jacobi richiede maggior cura nel caso non esistano coordinate globali.

Una più completa trattazione dei molti e interessanti problemi matematici che si presentano nell'analisi del limite semiclassico in Meccanica Quantistica si può fare attraverso l'analisi di Fourier nello spazio delle fasi e l'introduzione della trasformata di Wigner e di operatori *pseudodifferenziali*. Faremo nel cap. 11 un'analisi elementare di questo approccio.

8.1 APPROSSIMAZIONE SEMICLASSICA MEDIANTE STATI LOCALIZZATI

Diciamo che una funzione d'onda $\phi(x)$ normalizzata ad uno in $L^2(R^N)$ è *ben localizzata* intorno al punto p_0, q_0 dello spazio delle fasi (che nei casi che tratteremo è $R^N \times R^N$) se esistono costanti positive c_1, c_2 , ed una costante $0 < \alpha < 2$, tali che

$$\int |\phi(x)|^2 (x - q_0)^2 dx \leq c_1 \hbar^\alpha, \quad \int |\hat{\phi}(p)|^2 (p - p_0)^2 dp \leq c_2 \hbar^{2-\alpha}. \quad 8.2$$

Risulta intuitivo che stati localizzati in un intorno di un punto nello spazio delle fasi classico possano essere lo strumento adatto a studiare il limite semiclassico,

e ci si aspetta che questi stati rimangano localizzati sulla traiettoria classica a meno di un errore che tende a zero quando $\hbar \rightarrow 0$. Questo è ciò che dimostreremo in questo capitolo. Per semplicità, considereremo inoltre solo il caso $\alpha = 1/2$. Per osservare quale ruolo giochino nell'analisi semiclassica gli stati *localizzati*, riscriviamo l'equazione di Schrödinger nella forma (8.1) e denotiamo con

$$\gamma(t) \equiv \{q(t), p(t)\} \quad q, p \in R^N \quad 8.3$$

la soluzione delle equazioni di Hamilton con hamiltoniana $H = \frac{p^2}{2} + V(q)$ e con dato iniziale

$$q(0) = q_0, p(0) = p_0. \quad 8.4$$

Supponiamo per semplicità che la traiettoria $\gamma \equiv \{\gamma(t)\}$, $\gamma(t) \in R^{2N}$ sia definita per ogni tempo. Cerchiamo una soluzione di (8.1) normalizzata a uno in $L^2(R^N)$ e localizzata (nel senso della norma dello spazio di Hilbert) a ciascun istante t in un *intorno* del punto $\gamma(t)$.

Sia $\phi_0^\hbar(x)$ il dato iniziale localizzato intorno a $\{q_0, p_0\} \equiv \gamma(0)$. Vogliamo dimostrare che la soluzione dell'equazione di Schrödinger con questo dato iniziale rimane localizzata per tempi di ordine di grandezza $\hbar^{-\frac{1}{2}}$ in un intorno di $\gamma(t)$ il cui diametro cresce in generale con il tempo in modo lineare.

In altre parole, vogliamo dimostrare che se la traiettoria $\gamma \equiv \{q(t), p(t)\}$ è soluzione dell'equazione di Hamilton con hamiltoniana H e dati iniziali $\{q_0, p_0\} \equiv \gamma(0)$, allora esistono stati $\psi_{\gamma_t}^\hbar(x)$, ben localizzati nello spazio delle fasi al tempo t attorno al punto $\{q(t), p(t)\}$, che differiscono poco in norma L^2 – a ciascun tempo t – dalla soluzione al tempo t dell'equazione di Schrödinger (8.1) avente come dato iniziale $\phi_0^\hbar(x)$.

Indichiamo con $\phi^\hbar(x, t)$ questa soluzione, con $\phi^\hbar(x, 0) = \psi_{\gamma_0}^\hbar(x)$.

Vogliamo dimostrare che esiste $\alpha > 0$ ed una funzione positiva $c(T)$, tali che

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \|\psi_{\gamma_t}^\hbar(x) - \phi^\hbar(x, t)\|_2 \leq c(T)\hbar^{1/2} \quad 8.5$$

La condizione (8.5) è certamente soddisfatta (con $c(T) = cT$) se dimostriamo che per $t \in [0, T]$ si ha

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \left\| \frac{d}{dt} \psi_{\gamma_t}^\hbar(x) - \frac{d}{dt} \phi^\hbar(x, t) \right\|_2 \leq c\hbar^{1/2} \quad 8.6$$

e quindi

$$\left\| \psi_{\frac{d}{dt} \gamma_t}^\hbar(x) + \frac{i}{2} \hbar \Delta \phi^\hbar(x; t) - i\hbar^{-1} V(x) \phi^\hbar(x; t) \right\|_2 \leq cT\hbar^{1/2} \quad 8.7$$

Procediamo per il momento in modo formale. Abbiamo notato che il termine $\frac{\hbar}{2} \Delta \phi(x, t)$ è di ordine $O(1)$ nel limite $\hbar \rightarrow 0$ (bisogna ricordare che la localizzazione nella variabile x è di ordine $\hbar^{1/2}$).

Scriviamo il termine $\hbar^{-1}V(x)\phi$ in (8.7) come somma di quattro termini

$$\hbar^{-1}V(x)\phi = I + II + III + IV$$

$$I \equiv \hbar^{-1}V(q(t))\phi(x, t), \quad II \equiv \hbar^{-1}(q(t) - x)\nabla V(q(t))\phi(x, t) \quad 8.8$$

$$III \equiv \frac{1}{2}\hbar^{-1} \left. \frac{\partial V}{\partial x_i \partial x_k} \right|_{q(t)} (x_i - q_i(t))(x_j - q_j(t)) \quad IV \equiv R_{q(t)}(x). \quad 8.9$$

Il termine I (che ha una singolarità di ordine \hbar^{-1}) dà solamente un fattore di fase globale che è irrilevante poiché funzioni d'onda che differiscono per un fattore di fase globale rappresentano lo stesso stato fisico.

Il termine II ha una singolarità del tipo $\hbar^{-1/2}$ nel limite $\hbar \rightarrow 0$ e dovrà presentare in (8.7) una cancellazione con un termine in $\frac{\hbar}{2}\Delta\phi(x, t)$ che ha lo stesso grado di singolarità. Notiamo che questo termine dipende solamente dal gradiente del potenziale V ; questo rende conto del fatto che nell'equazione di Schrödinger appare il potenziale, mentre nelle equazioni classiche appare solo il suo gradiente, cioè la forza.

Il termine III non è singolare nel limite $\hbar = 0$. Ci aspettiamo che in (8.7) la somma di questo termine e di quello non singolare in $\frac{\hbar}{2}\Delta\phi(x, t)$ sia uguale a $\psi \frac{\hbar}{d\tau} \gamma_t(x)$ a meno di termini proporzionali a \hbar^α . Vedremo che queste due condizioni sono soddisfatte se la traiettoria γ è soluzione dell'equazione di Hamilton con hamiltoniana $\frac{1}{2}p^2 + V(x)$.

Notiamo che il termine III , che dà contributo di ordine zero in \hbar , contiene il coefficiente

$$\frac{1}{2\hbar} \left. \frac{\partial V}{\partial x_i \partial x_k} \right|_{q(t)} (x_i - q_i(t))(x_j - q_j(t)).$$

Questo induce a pensare che nella cancellazione abbiano un ruolo le equazioni del flusso tangente alla traiettoria, un flusso lineare con coefficienti dipendenti dal tempo espresso in coordinate locali da

$$\dot{\pi} = \left. \frac{\partial V}{\partial x_i \partial x_k} \right|_{q(t)} \xi, \quad \dot{\xi} = \pi. \quad 8.10$$

Espliciteremo questo ruolo nel corso della dimostrazione di (8.7).

Il termine IV è formalmente di ordine $\sqrt{\hbar}$.

È facile verificare che le funzioni C^∞ a decrescenza rapida costituiscono un dominio denso comune invariante per l'azione dei generatori del flusso hamiltoniano e del suo flusso tangente. Pertanto le manipolazioni formali che faremo in questo capitolo sono giustificate.

Notiamo che il flusso tangente classico è lineare omogeneo (con coefficienti che dipendono dalla traiettoria, e dal tempo) e i suoi generatori simplettici sono pertanto quadratici omogenei nelle coordinate locali. Vedremo che questo porta

a considerare, per lo studio dell'approssimazione semiclassica, operatori (generatori di trasformazioni unitarie) quadratici nelle \hat{q}_k e \hat{p}_k . Abbiamo utilizzato la notazione (vedi cap.7)

$$(\hat{q}_k \phi)(x) \equiv x_k \phi(x), \quad (\hat{p}_k \phi)(x) \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \phi(x).$$

Essenziale per la trattazione che faremo sarà il fatto che, per operatori omogenei di ordine 2 nelle \hat{q}_k e \hat{p}_k , l'operazione di commutazione è *essenzialmente isomorfa* all'operazione che consiste nell'eseguire le parentesi di Poisson tra le corrispondenti espressioni quadratiche omogenee nelle variabili canoniche (classiche) q, p su $T^*(R^n)$.

Una conseguenza di questo sarà che, nel caso di hamiltoniane al più quadratiche, la formula che troveremo per l'approssimazione semiclassica coinciderà con quella che determina in Meccanica Quantistica il variare nel tempo dei valori di aspettazione degli operatori posizione e quantità di moto (teorema di Ehrenfest). Questo spiega il ruolo privilegiato che hanno gli operatori al più quadratici nelle \hat{q}_k, \hat{p}_k nello studio del limite semiclassico (e più in generale nel problema della quantizzazione).

Gli operatori $U_k(b) \equiv e^{ib\hat{q}_k}$ e $V_k(b) \equiv e^{ib\hat{p}_k}$ forniscono gli omeomorfismi di traslazione rispettivamente per gli operatori \hat{p}, \hat{q} :

$$U_j(a)\hat{p}_k U_j(a)^* = \hat{p}_k + a I \delta_{j,k} \quad V_j(b)\hat{q}_k V_j(b)^* = \hat{q}_k + b I \delta_{j,k}. \quad 8.11$$

Scegliendo opportunamente le funzioni $a(t), b(t)$ si possono pertanto *muovere* con trasformazioni unitarie gli stati ben localizzati in modo tale che i loro baricentri seguano una traiettoria prestabilita. Ad esempio seguendo le traiettorie che sono soluzioni dell'equazione di Hamilton con una hamiltoniana classica prestabilita. Noi considereremo soltanto il caso in cui la hamiltoniana classica ha la forma

$$H_{cl} = \frac{1}{2}p^2 + V(q), \quad p, q \in R^d, \quad V \in C^3 \quad 8.12$$

e supporremo sempre che il flusso hamiltoniano corrispondente sia definito univocamente per ogni tempo. Indichiamo con $\gamma_{q_0, p_0}(t)$ la traiettoria che ha come dato iniziale (q_0, p_0) .

Dovremo dimostrare che

- 1) La classe degli stati ben localizzati è lasciata invariante dall'evoluzione quantistica con hamiltoniana $H = -\Delta + V(x)$.
- 2) La soluzione dell'equazione di Schrödinger con dato iniziale uno stato $\phi_0 \in L^2(R^d)$ ben localizzato in un punto q_0, p_0 è, uniformemente in $t \in [0, T]$, vicina in norma ad uno stato ben localizzato in un intorno di $\gamma_{q(t), p(t)}$ dove $\{q(t), p(t)\}$ rappresentano la traiettoria soluzione dell'equazione di Hamilton con hamiltoniana $H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 + V(q)$ e dato iniziale q_0, p_0 .

- 3) La miglior approssimazione alla soluzione dell'equazione di Schrödinger con un dato iniziale molto ben localizzato si ottiene mediante una famiglia di trasformazioni unitarie generate da hamiltoniane quantistiche quadratiche dipendenti dal tempo, ottenute per quantizzazione delle hamiltoniane classiche che generano il flusso tangente alla traiettoria classica.

D'altra parte le funzioni d'onda ben localizzate hanno un supporto piccolo (di ordine \hbar^α per $0 < \alpha < 1$) ma non nullo e poiché l'equazione di Schrödinger è dispersiva ci aspettiamo che l'evoluzione modifichi la forma della funzione ed in particolare ne faccia crescere il supporto essenziale.

L'approssimazione che daremo porta a stime *esplicite* della dipendenza dal tempo della dispersione e ad espressioni *esplicite* per il nucleo integrale dell'operatore unitario di propagazione.

Studieremo in dettaglio il caso in cui il dato iniziale appartiene ad una speciale classe di stati ben localizzati, che chiameremo *stati coerenti*. Questi stati hanno una rilevanza fondamentale nell'ottica quantistica, argomento che noi non tratteremo.

L'analisi può essere estesa a *stati coerenti generalizzati* ottenuti dagli stati coerenti mediante utilizzo di polinomi di Hermite di ordine più elevato. Anche per questi stati si possono dare formule esplicite di propagazione nel caso di hamiltoniane al più quadratiche.

D'altra parte qualunque stato ben localizzato può essere approssimato con arbitraria precisione in norma mediante stati coerenti generalizzati. L'evoluzione quantistica, essendo descritta da operatori unitari, preserva quest'approssimazione. Pertanto sarà sufficiente descrivere, mediante hamiltoniane quantistiche al più quadratiche, l'evoluzione degli stati coerenti generalizzati. Noi qui ci limitiamo ad esplicitare il formalismo nel caso degli stati coerenti.

Gli *stati coerenti* sono stati puri (rappresentabili da funzioni d'onda) caratterizzati dal fatto di avere *dispersione minima* rispetto alle osservabili \hat{q} , \hat{p} .

Definiamo la dispersione $\Delta_\psi(A)$ di un operatore autoaggiunto $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ nello stato descritto dal vettore $\psi \in D(A)$ mediante

$$\Delta_\psi(A) \equiv \sigma_\psi(A^2) - (\sigma_\psi(A))^2, \quad \sigma_\psi(A) \equiv (\psi, A\psi). \quad 8.13$$

Per ogni coppia di operatori si ha

$$C \equiv \left(\frac{A - \sigma(A)}{\Delta(A)} - i \frac{B - \sigma(B)}{\Delta(B)} \right) \left(\frac{A - \sigma(A)}{\Delta(A)} + i \frac{B - \sigma(B)}{\Delta(B)} \right) \geq 0 \quad 8.14$$

e l'eguaglianza vale se e solo se $C = 0$.

Se in particolare $AB - BA = i\hbar I$, allora si ha

$$\Delta A \Delta B \geq \hbar/2.$$

Quindi i vettori di dispersione minima rispetto alla coppia Q, P sono le soluzioni di

$$\left[\frac{Q - \sigma(Q)}{\Delta(Q)} - i \frac{P - \sigma(P)}{\Delta(P)} \right] \psi = 0. \quad 8.15$$

Per un sistema ad un grado di libertà, questa relazione assume la forma esplicita

$$\left(\hbar \frac{d}{dx} + \beta x \right) \phi = \alpha \phi \quad 8.16$$

e, nel caso particolare in cui $\Delta Q = \Delta P = \hbar/2$,

$$\left(\frac{d}{dx} + x - \alpha \right) \phi_\alpha = 0. \quad 8.17$$

Le soluzioni ϕ_α di (8.17) vengono dette *stati coerenti*. Notiamo che il vettore ϕ_α è l'autostato all'autovalore α dell'operatore

$$a_k \equiv \hat{q}_k - i \hat{p}_k$$

(detto *operatore di annichilazione* come visto nel cap. 7). Le soluzioni di (8.16) vengono dette *stati coerenti strizzati* (squeezed; questa terminologia viene dal fatto che per β molto grande essi sono molto localizzati in posizione, e conseguentemente poco localizzati in quantità di moto)¹.

Gli stati coerenti sono parametrizzati dai punti dello spazio delle fasi. In particolare per un sistema con un grado di libertà al punto del piano complesso C con coordinate $z = \{q, p\}$ è associato lo stato coerente

$$\psi_z(x) \equiv c e^{-\frac{(x-q)^2}{2\hbar} + \frac{i}{\hbar} xp} \quad 8.18$$

dove c è una costante che rende il vettore normalizzato ad uno in $L^2(R)$.

Notiamo che la trasformata di Fourier di ψ_z è ancora una gaussiana, centrata adesso in p . Gli stati coerenti *non sono ortogonali per diversi valori del parametro z* ma vale la seguente relazione di completezza

$$\forall \phi \in L^2(R), \quad \phi(x) = \int_C \langle \psi_z, \phi \rangle \psi_z(x) dz. \quad 8.19$$

Se la famiglia di operatori dipendenti in generale dal tempo $H(t)$ è composta da operatori quadratici nelle \hat{p} e \hat{q} , il loro flusso lascia invariante l'insieme degli autovettori degli operatori combinazioni lineari di \hat{q} e \hat{p} .

È facile vedere che tali autovettori sono dati, nella rappresentazione delle x , dalle funzioni gaussiane

$$e^{-\frac{(x, Kx)}{2\hbar} + \frac{i}{\hbar} (a, x)}, \quad a \in R^d \quad 8.20$$

¹L'espressione inglese *squeezed state* viene spesso anche tradotta in italiano come stato schiacciato.

dove K è una generica matrice positiva. Notare che anche le trasformate di Fourier di queste funzioni sono gaussiane. Ne deduciamo che l'insieme degli stati gaussiani è lasciato invariante dal flusso di una hamiltoniana quantistica al più quadratica con coefficienti eventualmente dipendenti dal tempo. *Questo osservazione formerà la base della nostra analisi delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger nel limite semiclassico.*

In Appendice B descriveremo brevemente un metodo per *esplorare*, mediante tecniche mutuata dalla Meccanica Quantistica, il flusso tangente ad una traiettoria di un sistema hamiltoniano classico, ed in particolare per determinare il suo *indice di Maslov*. Vedremo nel seguito la rilevanza di questa proprietà in particolare nell'analisi del metodo WKB.

Ritorniamo ora allo studio del limite semiclassico attraverso le proprietà degli stati coerenti. Iniziamo considerando un sistema con un grado di libertà; le formule che introdurremo risultano più semplici, non appesantite da una notazione matriciale. Daremo brevemente in seguito la generalizzazione per sistemi a più gradi di libertà; essa è concettualmente semplice ma formalmente alquanto complessa. Definiamo

$$D_{\hbar}(\alpha) = e^{(\alpha\alpha^* - \bar{\alpha}\alpha)/\sqrt{\hbar}}, \quad 8.21$$

$$T(\beta) = e^{(\gamma(a^*)^2 - \bar{\gamma}a^2)/2}, \quad \gamma(\beta) = \beta|\beta|^{-1}\arctg|\beta|. \quad 8.22$$

Gli operatori $D_{\hbar}(\alpha)$, $T(\beta)$ sono definiti inizialmente su combinazioni lineari finite di funzioni di Hermite, sono isometrici con inverso isometrico e si estendono quindi ad operatori unitari su $L^2(R)$ che indichiamo con lo stesso simbolo.

L'operatore $T(\beta)$ può essere riscritto nella forma

$$T(\beta) = e^{\frac{i}{2}\Im(\gamma(\hat{q}^2 - \hat{p}^2)) - \frac{i}{2}\Re(\gamma(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}))} \quad 8.23$$

con inverso $T(-\beta)$. L'operatore $D_{\hbar}(\alpha)$ genera a partire dallo stato fondamentale dell'oscillatore armonico gli stati coerenti a dispersione simmetrica; infatti

$$D_{\hbar}(\alpha)\psi_0, \quad \psi_0 = (1/\sqrt{\pi})e^{-1/2x^2}$$

rappresenta uno stato coerente con dispersione $\Delta_q = \Delta_p = \sqrt{\hbar}$. L'operatore $T(\beta)$, detto anche trasformazione di Bogoljubov, genera stati coerenti a dispersione non simmetrica; si ha infatti su un dominio denso

$$T(\beta)\alpha T(-\beta) = (1 - |\beta|^2)^{-1/2}(\alpha - \beta\alpha^*). \quad 8.24$$

La funzione

$$\phi_{\alpha,\beta} \equiv D_1(\alpha)T(\beta)\psi_0 \quad 8.25$$

rappresenta uno stato coerente centrato in α , β con

$$\Delta Q = \frac{1}{\sqrt{\beta}}, \quad \Delta P = \hbar(\Delta Q)^{-1}.$$

Nota 8.1

Spesso si introducono stati coerenti generalizzati, definiti da

$$\phi_{\alpha,\beta}^n = D_{\hbar}(\alpha)T(\beta)h_n \quad 8.26$$

dove h_n è l'ennesima funzione di Hermite. Questi stati possono essere utilizzati per dare una stima più accurata dell'evoluzione per una hamiltoniana non quadratica.



Possiamo ora enunciare il teorema d'approssimazione semiclassica nel caso di un sistema ad un grado di libertà.

Sia $q(t)$, $p(t)$ un traiettoria completa del sistema classico con hamiltoniana $H(q,p,t) = p^2 + V(q,t)$, $V \in C^3$ e sia $S(t)$ l'azione classica, data lungo la traiettoria da

$$S(t) = \int_0^t ds \left[\frac{1}{2}p(s)^2 - V(q(s), s) \right]. \quad 8.27$$

Siano $\xi(t)$, $\pi(t)$ funzioni a valori complessi soluzioni dell'equazione del moto linearizzate intorno a $q(t)$, $p(t)$ (equazioni del flusso tangente)

$$\dot{\xi}(t) = \pi(t), \quad \dot{\pi}(t) = -V''(q(t), p(t); t)\xi(t)$$

(scegliamo convenzionalmente $\Re(\xi(0)\pi(0)) = 1$). Definiamo funzioni a valori complessi $\alpha(t)$, $\beta(t)$ attraverso

$$\alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(q(t) + ip(t)), \quad \beta(t) = \frac{\xi(t) - \pi(t)}{\xi(t) + \pi(t)}. \quad 8.28$$

Definiamo gli stati coerenti generalizzati e riscaldati

$$\Phi_{\alpha,\beta}^n(x,t) \equiv \hbar^{-1/4} \phi_{\alpha,\beta}^n((\hbar)^{-1/2} x, t) : \quad 8.29$$

Questi stati sono localizzati in un intorno di ordine di grandezza $\sqrt{\hbar}$ del punto $q(t)$ e la loro trasformata di Fourier è localizzata in un intorno di ordine $\sqrt{\hbar}$ del punto $p(t)$. Si ha allora

Teorema 8.1

Esiste una costante C (che dipende dal dato iniziale e dal potenziale V) tale che per ogni intero n e numero reale positivo T si ha, per $0 \leq t \leq T$

$$\|U_{\hbar}(t)\Phi_{\alpha(0),\beta(0)}^n(x) - e^{-i\delta(t)(n+1/2)[\gamma(t)-\gamma(0)]/\hbar}\Phi_{\alpha(t),\beta(t)}^n\| \leq C\sqrt{\hbar}t \quad 8.30$$

dove

$$\delta(t) = S(t) - [q(t)p(t) - q(0)p(0)] \quad \gamma(t) = -\arg(\xi(t) - i\dot{\xi}(t)). \quad 8.31$$

Inoltre si ha $C = 0$ se la hamiltoniana H è al più quadratica nelle q, p . \diamond

Dimostreremo questo teorema utilizzando il risultato corrispondente per hamiltoniane al più quadratiche. In particolare utilizzeremo il seguente Lemma

Lemma 8.2

Sia $U(t, s)$ la famiglia di operatori unitari che descrive il flusso quantistico con hamiltoniana $H(t) = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + f(t)\hat{q}^2$ dove $f(t)$ è una funzione di classe C^1 . Allora vale la relazione esplicita (con le notazioni fin qui utilizzate)

$$U(t, s) = T(\beta(t))e^{i(\gamma(t)-\gamma(s))(a^*a+aa^*)/2}T(\beta(-s)). \quad 8.32$$

\diamond

Dimostrazione

Sia $U(t, s)$ l'operatore di evoluzione in $L^2(R)$ associato all'equazione

$$i\hbar \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2}\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + f(t)x^2\right)\phi(x, t).$$

Definito

$$K_0 \equiv (a^*a + aa^*)/4, \quad K_+ \equiv (a^*)^2/2, \quad K_- \equiv a^2/2,$$

è facile verificare che

$$[K_0, K_{\mp}] = \mp K_{\mp}$$

e che da questo segue

$$\begin{aligned} T(\beta)K_0T(-\beta) &= \frac{1+|\beta|^2}{1-|\beta|^2}K_0 - \frac{\beta}{1-|\beta|^2}K_+ - \frac{\bar{\beta}}{1-|\beta|^2}K_- \\ T(\beta)K_+T(-\beta) &= \frac{1}{1-|\beta|^2}K_+ + \frac{\bar{\beta}^2}{1-|\beta|^2}K_+ - 2\frac{\bar{\beta}}{1-|\beta|^2}K_0 \end{aligned} \quad 8.33$$

(la verifica può essere fatta sviluppando l'esponenziale che appare nella definizione di $T(\beta)$, il che è lecito su di un dominio denso lasciato invariante dagli operatori K). Si può notare poi che per costruzione si ha

$$i\frac{d}{dt}T(\beta(t)) = \lambda(t)K_+ + \bar{\lambda}(t)K_- + \mu(t)K_0 \quad 8.34$$

dove

$$\lambda = i\dot{\beta}(1-|\beta|^2)^{-1}, \quad \mu = i((\dot{\beta})^* - \beta^*\dot{\beta})(1-|\beta|^2)^{-1}.$$

Utilizzando queste formule si può verificare la seguente identità

$$i\frac{d}{dt}(T(\beta(t))e^{2i\gamma(t)K_0}) =$$

$$= [(\mu - 2\dot{\gamma} \frac{1 + |\beta|^2}{1 - |\beta|^2})K_0 + (\lambda + \frac{2\beta\dot{\gamma}}{1 - |\beta|^2})K_+ + (\lambda + \frac{2\beta\dot{\gamma}}{1 - |\beta|^2})^*K_-]T(\beta(t))e^{2i\gamma(t)K_0}. \quad 8.35$$

D'altra parte, dalla definizione di $\beta(t)$ segue che questa funzione soddisfa l'equazione differenziale

$$\dot{\beta} = -i\beta(1 + f) + i(1 - f)\frac{1 + |\beta|^2}{2} \quad 8.36$$

dove la relazione tra la funzione $f(t)$ e le funzioni $\beta(t)$ e $\gamma(t)$ è data da

$$(1 - f)\Re \beta - (f + 1) \equiv 2\dot{\gamma}.$$

Notiamo, che con queste notazioni si ha

$$2H(t) = 2(f + 1)K_0 + (f - 1)[K_+ + K_-].$$

Ne segue che

$$i \frac{d}{dt}(T(\beta(t))e^{2i\gamma(t)K_0}) = H(T(\beta(t))e^{2i\gamma(t)K_0}).$$

Questo conclude la dimostrazione del Lemma 8.2. ♡

Daremo ora una traccia della dimostrazione del teorema 8.1. Una dimostrazione completa si può trovare ad esempio in [Hag85]. L'idea è di scrivere a ciascun istante la hamiltoniana nella forma

$$H = H_2(t) + H_r(t)$$

dove $H_2(t)$ rappresenta lo sviluppo di Taylor all'ordine due dell'operatore H nel punto dello spazio delle configurazioni raggiunto dalla traiettoria classica considerata al tempo t , mentre H_r è il termine residuo.

Nota 8.2

Notiamo che, nel caso dell'equazione di Schrödinger che studiamo, solo il termine di ordine zero nelle \hat{p} contribuisce a H_r ; questo semplifica la trattazione, in special modo per quanto riguarda i domini di definizione; una trattazione del caso in cui appare nella hamiltoniana un termine lineare in \hat{p} con coefficiente che dipende linearmente da x , come nel caso in cui sia presente un campo magnetico, risulta un poco più difficile. ♣

Utilizzeremo il Lemma 8.2 e il fatto che su stati molto localizzati sulla traiettoria classica il termine H_r è piccolo in un senso opportuno. Infatti si ha

$$H_2(t) = \frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(q(t)) + (x - q(t))V'(q(t)) + \frac{1}{2}(x - q(t))^2 V''(q(t)) \quad 8.37$$

e, se il potenziale V è di classe C^3 , H_r è l'operatore di moltiplicazione per una funzione

$$H_r(t) = V'''(q(t))(x - q(t))^3(1 + o(1)). \quad 8.38$$

Quindi $\int |(H_r\psi)(x)|^2 dx$ è piccolo quando la funzione ψ è sufficientemente ben localizzata intorno al punto $q(t)$. Per avere una dimostrazione del teorema, occorre sostituire quest'argomento euristico con un stima precisa dell'errore che si commette tralasciando H_r .

Diamo ora la traccia di dimostrazione del Teorema 8.1 utilizzando il Lemma 8.2. Faremo uso del teorema fondamentale del calcolo.

Se $H(t)$ e $H_0(t)$ sono due famiglie di operatori autoaggiunti e $U(t, s)$ e $U_0(t, s)$ sono le famiglia di operatori unitari che risolvono

$$\begin{aligned} i \frac{dU(t, s)}{dt} &= H(t)U(t, s), & U(s, s) &= I, \\ i \frac{dU_0(t, s)}{dt} &= H_0(t)U_0(t, s), & U_0(s, s) &= I, \end{aligned}$$

si ha, dal teorema fondamentale del calcolo

$$U^*(t, s)U(t, s) = I + \int_s^t \frac{d}{d\tau} [U_0^*(\tau, s)U(\tau, s)] d\tau. \quad 8.39$$

Posto $W(t) = H(t) - H_0(t)$ si ottiene

$$U(t, s) = U_0(t, s) + \hbar \int_s^t U(t, \tau)W(\tau)U_0(\tau, s) d\tau$$

con $W(t) = \frac{1}{\hbar}[V'''(q(t))(x - q(t))^3 + o(|x - q(t)|^3)C]$ dove C è un operatore limitato. Per ogni elemento $\phi \in H$ si ha

$$|(U(t, s) - U_0(t, s))\phi| \leq \int_s^t |W(\tau)U_0(\tau, s)\phi|_2 d\tau. \quad 8.40$$

Nel nostro caso si ha $W(t) = H_r(t)$.

Per dimostrare che il termine al membro di destra della (8.40) è maggiorato da $\leq Ct\sqrt{\hbar}$ per $t \in [0, T]$ ed un'opportuna costante C è pertanto sufficiente trovare elementi ψ dello spazio di Hilbert che sono invarianti (come insieme) per l'azione di $U_0(t, s)$ e per ciascuno dei quali si abbia una stima del tipo

$$|W(t)\psi| \leq C\hbar^{1/2}, \quad \forall t \in [0, T]. \quad 8.41$$

Nel nostro caso si ha, uniformemente in $0 \leq t \leq T$,

$$\left\| \int_0^t W(\tau)U_0(\tau, s)\phi \right\| ds \leq \frac{1}{\hbar} \int_0^t \left\| [V'''(q(t))(x - q(t))^3(1 + o(1))]\phi \right\| ds = O((\hbar)^{\frac{1}{2}}),$$

dove abbiamo utilizzato il fatto che $\phi(t, x)$ è uno stato ben localizzato intorno alla traiettoria classica, con dispersione di ordine $\sqrt{\hbar}$ nella posizione.

♡

Diamo ora un breve cenno alla generalizzazione di questi risultati al caso di sistemi a dimensioni $n > 1$. Il procedimento che seguiamo è lo stesso che abbiamo seguito nel caso in cui il sistema ha un solo grado di libertà, le complicazioni formali provengono dal dover operare con matrici anziché con quantità scalari. Gli stati coerenti sono anche qui gli stati a dispersione minima $\Delta_q(\phi)\Delta_p(\phi) = \hbar$ e gli stati Gaussiani sono gli autostati delle combinazioni lineari omogenee degli operatori di creazione e di distruzione. Gli operatori D sono sostituiti con

$$D_{\hbar}(\alpha)e^{\hbar^{-1/2}[(\alpha, a^*) - (\alpha^*, a)]}, \quad \alpha \in R^n, \quad a \equiv (a_1, \dots, a_n). \quad 8.42$$

Gli operatori di Bogoljubov sono definiti nel modo seguente. Sia B una matrice hermitiana con $|B| < 1$, $B = |B|U$ la sua decomposizione polare. Definiamo

$$\Gamma_{i,j} \equiv \arg(\text{th}(|B|U)_{i,j})$$

(dove th indica la funzione tangente iperbolica) e definiamo

$$T(B) = \exp\left\{\frac{1}{2}((a^*, \Gamma a^*) - (a, \Gamma a))\right\}.$$

Questi operatori formano un sottogruppo del gruppo metaplettico. La loro relazione con le trasformazioni simplettiche lineari omogenee è data in modo esplicito dal seguente lemma

Lemma 8.3

Si ha

$$T(B)aT^*(B) = (1 - BB^*)^{-1/2}(a - Ba^*). \quad 8.43$$

◇

Dimostrazione

La dimostrazione si effettua introducendo il cammino $B(t) = tB$ e dimostrando che la derivata (rispetto a t) del termine a destra coincide con la derivata del termine a sinistra (per $t = 0$ la relazione è evidentemente soddisfatta).

♡

Nel seguito utilizzeremo anche il lemma seguente

Lemma 8.4

Siano A e D matrici di rango N a valori complessi, con

$$DA^{-1} = (DA^{-1})^*, \quad A^*D + DA^* = I$$

e definiamo

$$B = (I + DA^{-1})^{-1}(I - DA^{-1}).$$

Allora

$$I - B^*B = 4(A^* + D^*)^{-1}(A + D)^{-1} \geq 0.$$

◇

Dimostrazione

Dalla definizione di B segue

$$B^*B = (A^* + D^*)^{-1}(AA^* + DD^* - 2I)(A + D)^{-1}$$

e, dalle proprietà assunte per A e D ,

$$I = (A^* + D^*)^{-1}(A^*A + D^*D + 2I)(A + D)^{-1},$$

da cui segue l'asserto.

♡

Facendo uso dei Lemmi 8.3 e 8.4 possiamo ora introdurre le equazioni di evoluzione approssimate che saranno utili per analizzare il limite semiclassico. Consideriamo la hamiltoniana quantistica

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar^2}{2}(\hat{p}, \hat{p}) + V(t, x)$$

e indichiamo con H la corrispondente hamiltoniana classica

$$H(t) = \frac{1}{2}(p, p) + V(t, q) \quad q, p \in \mathbb{R}^N.$$

Sia $q(t), p(t)$ una soluzione delle equazioni di Hamilton con hamiltoniana H . Indichiamo con $S(t)$ l'integrale d'azione lungo questa traiettoria

$$S(t) = \int_0^t \left[\frac{1}{2}(p(s), p(s)) - V(s, q(s)) \right] ds. \quad 8.44$$

Il flusso tangente a questa traiettoria è descritto da equazioni lineari (a coefficienti in generale dipendenti dal tempo) e quindi le sue soluzioni possono essere estese al campo complesso. Questa estensione servirà a rendere più agile il confronto tra le espressioni che otterremo e quelle che si ottengono risolvendo l'equazione di Schrödinger.

Le equazioni per il flusso tangente possono essere poste nella forma

$$\begin{aligned} \dot{A}(t) &= iD(t), \\ \dot{D}(t) &= F(t)A(t), \\ F_{i,j}(t) &= \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} V(t, q)_{q=q(t)}. \end{aligned}$$

Si vede che per ogni valore di t la matrice $D(t)A^{-1}$ è simmetrica e inoltre su un dominio denso

$$\dot{A}(t)D(t) + D(t)\dot{A}(t) = 2I.$$

Definiamo

$$I(t) \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}(D(t)x + A(t)\hat{p}) \quad \dot{I}(t) = i[\hat{H}_2(t), L(t)] \quad 8.45$$

dove la hamiltoniana quadratica $\hat{H}_2(t)$ (termini di ordine due nello sviluppo dalla hamiltoniana \hat{H} al second'ordine lungo la traiettoria classica) è

$$\hat{H}_2(t) = \frac{\hbar^2}{2}(\hat{p}, \hat{p}) + (x, F(t)x).$$

Con queste notazioni si ha

Lemma 8.5

Sia

$$\alpha(t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(q(t) + ip(t)),$$

$$\lambda(0) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(iA^*(0)p(0) - D(0)^*q(0)).$$

Allora si ha, su un dominio denso,

$$T(-B(t))D_1(-\alpha(t))I^*(t)D_1(\alpha(t))T(B(t)) = \lambda_0 + W(t)a^*, \quad 8.46$$

dove $W(t)$ è la matrice unitaria definita da

$$W(t) \equiv -(A(t) + D(t))^{-1}[(A(t) + D(t))(A^*(t) + D^*(t))]^{\frac{1}{2}}.$$

◇

Dimostrazione

Utilizzando la relazione

$$D_1(-\alpha)aD_1(\alpha) = a + \alpha,$$

si ottiene

$$D_1(-\alpha)I^*D_1(\alpha) \equiv I^* + \frac{1}{\sqrt{2}}[iA^*p - D^*q] = I^* + \lambda_0.$$

su un dominio denso. Per dimostrare il Lemma 8.5 basterà quindi dimostrare che la derivata rispetto al tempo dell'espressione $[iA^*p - D^*q]$ è zero. Questo segue dal Lemma 8.4.

♥

Possiamo ora enunciare il teorema che dimostra l'esistenza del limite semiclassico per stati coerenti generalizzati. Ricordiamo che abbiamo definito stati coerenti generalizzati per un sistema con N gradi di libertà i vettori della forma

$$\phi_{\alpha,\beta}^n \equiv D_1(\alpha)T(\beta)\phi_n. \quad 8.47$$

La generalizzazione del teorema 8.1 a sistemi con N gradi di libertà è allora il seguente

Teorema 8.6 (Hagedorn)

Se il potenziale V è di classe C^3 e vi sono costanti positive c, c_1 tali che $|V(x)| \leq e^{c|x|^2}$, $V(x) \geq -c_1$, allora per ogni stato coerente generalizzato, per ogni intero n e per ogni $T \geq 0$ esiste una costante positiva C tale che

$$\|U_{\hbar}(t, 0)\Phi_{\alpha(0),\beta(0)}^n - e^{-iS(t)}e^{i(n+\frac{1}{2})[\gamma(t)-\gamma(0)]}\Phi_{\alpha(t),\beta(t)}^n\| \leq CT\sqrt{\hbar}, \quad |t| \leq T \quad 8.48$$

dove

$$n_N \gamma(t) \equiv \sum_{k=1}^N (n_k + \frac{1}{2})$$

e per ciascun valore dell'indice k il fattore $e^{i\gamma_k}$ è il k -mo autovalore della matrice simplettica $A + iB$ che rappresenta al tempo t l'evoluzione hamiltoniana del sistema (vedi Appendice 15.B).

Il vettore $\Phi_{\alpha,\beta}^n$ è ottenuto per riscaldamento da $\phi_{\alpha,\beta}^n$:

$$\Phi_{\alpha,\beta}^n(x, t) = \hbar^{-\frac{1}{4}} \phi_{\alpha,\beta}^n(\hbar^{-\frac{1}{2}}x, t).$$

◇

La dimostrazione di questo teorema segue la stessa traccia della dimostrazione del Teorema 8.1; le maggiori difficoltà formali provengono solamente dalla manipolazione di matrici.

8.2 METODO W.K.B. PER L'APPROSSIMAZIONE SEMICLASSICA

Il metodo W.K.B. (dai nomi di Wentzel, Kramers, Brillouin) è un metodo costruttivo per determinare soluzioni dell'equazione di Schrödinger stazionaria o non stazionaria, quando il parametro \hbar è molto piccolo; si ottengono soluzioni approssimate ad ordini arbitrariamente grandi che rappresentano stati semiclassici (stati WKB) diversi dagli stati coerenti analizzati in precedenza. Il metodo è comune all'ottica geometrica, dove il ruolo di parametro piccolo è svolto dalla lunghezza d'onda.

Le funzioni considerate avranno una fase fortemente oscillante ma il loro valore assoluto sarà una funzione sufficientemente regolare.

Come vedremo, il metodo WKB è strettamente legato all'equazione di Hamilton-Jacobi in Meccanica Analitica, e ne condivide pregi e difetti; in particolare, nel problema dipendente dal tempo, dà in modo relativamente semplice soluzioni in un intervallo di tempo limitato $0 \leq t < T_c$ (T_c corrisponde al tempo di prima inversione del moto nello spazio delle configurazioni, o tempo in cui appare la prima caustica nell'approssimazione semiclassica).

Il procedimento per continuare la soluzione per tempi $t > T_c$ è piuttosto laborioso, e richiede un accurato studio del comportamento della soluzione per $t = T_c$. La soluzione non è in generale unica, ed è possibile determinare la differenza di fase tra due soluzioni (che genera termini di interferenza). Noi non discuteremo questo problema di continuazione; un'analisi accurata (e complessa) si può trovare in [20] e [Dui74].

Dal punto di vista della matematica, il metodo si inquadra nello studio delle soluzioni asintotiche di equazioni di evoluzione per dati iniziali fortemente oscillanti. Una trattazione particolarmente chiara, si trova in [Lax67].

Iniziamo la nostra analisi studiando le soluzioni dell'equazione di Schrödinger in assenza del termine di potenziale. La loro controparte in ottica geometrica sono le soluzioni dell'equazione delle onde in un mezzo omogeneo. Consideriamo quindi l'equazione

$$i\epsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\epsilon^2 \Delta \phi \quad 8.49$$

dove ϵ è un parametro che consideriamo piccolo (ϵ ha il ruolo che \hbar ha in Meccanica Quantistica).

La soluzione di (8.49) per un dato iniziale $\phi_0 \in L^2(\mathbb{R}^d)$ è data da

$$\phi_\epsilon(x, t) = \left(\frac{1}{\epsilon}\right)^d \int_{\mathbb{R}^d} e^{i(\frac{t^2}{2} + px)/\epsilon} \hat{\phi}_0(p) dp. \quad 8.50$$

Si vede da (8.50) che la soluzione è una funzione che per ϵ molto piccolo ha forti oscillazioni nella variabile x . Risulta naturale allora cercare soluzioni corrispondenti a un dato iniziale fortemente oscillante, in modo tale che non vi siano differenze tra la forma della soluzione a tempo t e quella del dato iniziale; in tal modo sarà possibile parlare di continuità in funzione del tempo.

Cerchiamo quindi una soluzione che corrisponda ad un dato iniziale della forma

$$\phi_0(x) = \sqrt{n(x)} e^{iS(x)}, \quad n(x), S(x) \in C^\infty. \quad 8.51$$

La (8.50) fornisce una soluzione esplicita del nostro problema; questa soluzione è valida per ogni t (questo corrisponde al fatto che l'equazione di Hamilton-Jacobi descrive in questo caso un moto rettilineo uniforme, e non vi sono quindi punti di inversione del moto).

Vogliamo, in questo caso particolare, determinare lo sviluppo asintotico della soluzione nel parametro (piccolo) ϵ .

Notiamo che l'integrale che appare in (8.50) è un caso particolare di integrali della forma

$$I(\epsilon) = \int_{R^n} e^{i\epsilon^{-1}\theta(y)} f(y) dy \quad 8.52$$

(con la fase θ data da una funzione liscia e a valori reali) che vengono detti (per motivi ovvi) *integrali oscillanti* e dei quali viene studiato il limite $\epsilon \rightarrow 0$. La funzione $\theta(y)$ prende il nome di *fase*. Per analizzare il comportamento degli integrali oscillanti quando $\epsilon \rightarrow 0$, si utilizzano i seguenti due teoremi.

Teorema della fase non stazionaria

Consideriamo una regione $\Omega \in R^d$ e supponiamo che f e θ siano di classe $C^\infty(R^d)$, che f sia integrabile, e che per ogni $y \in \Omega$ si abbia $\nabla\theta(y) \neq 0$. Allora per ogni N esiste una costante positiva $C_N(\theta, f)$ tale che

$$|I(\epsilon)| \leq C_N \epsilon^N.$$

◇

Dimostrazione

Poniamo $g = \epsilon^{-1}\theta$. Utilizziamo l'identità

$$h = \frac{\nabla g}{(\nabla g, \nabla g)}; \quad f e^{ig} = -i \operatorname{div}(e^{ig} f h) + i e^{ig} \operatorname{div}(f h) \quad 8.53$$

che è una conseguenza dell'identità $\operatorname{div}(av) = a \operatorname{div}(v) + (\nabla a, v)$, con v un campo vettoriale su R^n .

Se $\nabla g \neq 0$ nella regione Ω di integrazione, una integrazione per parti dà, per ogni $k \geq 0$

$$\int_{\Omega} f(x) e^{ig(x)} dx = i \int_{\partial\Omega} e^{ig} \sum_{k=0}^d (L_h)^k \frac{\partial h_k}{\partial n} d\sigma + \int_{\Omega} e^{ig} L_h f dx$$

dove $\frac{\partial}{\partial n}$ è la derivazione nella direzione normale a $\partial\Omega$ e abbiamo posto

$$L_h f \equiv -i \operatorname{div}(h f e^{ig}) + i e^{ig} \operatorname{div}(h f).$$

Ponendo $g \equiv \epsilon^{-1}\theta$ e $\delta \equiv \inf_{x \in \Omega} |\nabla\theta|$ (per ipotesi $\delta > 0$) si ha, per $\lambda \geq 0$ e per ogni coppia di interi $m \geq 0, k \geq 0$

$$|D_\epsilon I(\epsilon)| \leq C_{m,k} \|f\|_{C^{k+1}} \epsilon^{k-m} \delta^{-2k}$$

dove le costanti $C_{m,k}$ non dipendono da f e da ϵ .

♡

Nota 8.3

Se f è di classe C^m , il procedimento può essere iterato solo $m - 1$ volte; si ottiene pertanto in questo caso la stima

$$|I(\epsilon)| \leq C_m \epsilon^m.$$

♣

Teorema della fase stazionaria

Se θ è di classe C^2 , se i suoi punti critici y_k sono in numero finito nel supporto di f (o se si accumulano solo all'infinito) e se risulta che $D^2\theta$ (lo Hessiano di θ) è non degenere in questi punti critici, vale lo sviluppo asintotico

$$I(\epsilon) = \sqrt{2\pi\epsilon} \sum_{k=1}^n e^{i\epsilon^{-1}[\theta(y_k) + \frac{\sigma_k}{\pi}]} f(y_k) |\det D^2\theta|(y_k) + o(\sqrt{\epsilon}), \quad 8.54$$

dove n è il numero di punti critici e abbiamo indicato con σ_k l'indice del k -mo punto critico (la differenza tra il numero di autovalori positivi e il numero di autovalori negativi dello Hessiano).

◇

Dimostrazione

Diamo la dimostrazione nel caso di dimensione 1; la dimostrazione nel caso generale può essere ottenuta in modo analogo.

Come conseguenza del teorema della fase non-stazionaria, possiamo trattare separatamente i contributi dei punti critici. Infatti possiamo costruire intorno disgiunti dei singoli punti critici, e applicare nell'insieme complementare il teorema della fase non stazionaria a meno di un errore di ordine al più ϵ .

Supponiamo quindi che vi sia un solo punto critico, non degenere, che assumiamo essere l'origine. Per il Lemma di Morse possiamo scegliere un intorno dell'origine $[-a, b]$, $a, b > 0$ e una funzione ϕ di classe C^1 in Ω , nulla nell'origine e con $\frac{d\phi}{dy} \neq 0$ in Ω tale che, per $y \in \Omega$ sia

$$\theta(y) - \theta(0) = \frac{1}{2} \sigma \phi(y)^2, \quad \sigma \equiv \text{sign}\left(\frac{d^2}{dy^2}\right)_{y=0}.$$

Allora si ha, a meno di termini di ordine $\epsilon^{1/2}$,

$$I(\epsilon) \simeq e^{i\frac{\theta(0)}{\epsilon}} \int_{\Omega} e^{-i\frac{\sigma}{2\epsilon} \phi(y)^2} g(\phi) d\phi \quad 8.55$$

con

$$g(\phi) \equiv f(y(\phi)) \left| \frac{d\phi}{dy} \right|^{-1} (y(\phi)).$$

Ponendo

$$u(y) = \sqrt{\epsilon^{-1}} \phi(y), \quad 8.56$$

si ha

$$I(\epsilon) = e^{i\frac{\theta(0)}{\epsilon}} \int_{-\frac{a}{\sqrt{\epsilon}}}^{\frac{b}{\sqrt{\epsilon}}} e^{-iu^2} g(u\sqrt{\epsilon}) du. \quad 8.57$$

Da qui, utilizzando la continuità della funzione $g(y)$ ed esplicitando l'integrale gaussiano si ottiene

$$I(\epsilon) = 2\pi e^{i\theta(0)} f(0) \left| \frac{\partial y}{\partial \phi} \right| e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\epsilon} + o(\sqrt{\epsilon}). \quad 8.58$$

♡

Nota 8.4

Si possono dare anche esplicitamente i termini di correzione, che abbiamo indicato con $o(\sqrt{\epsilon})$.

Conviene considerare separatamente in (8.57) l'integrazione su $[-a/\sqrt{\epsilon}, 0)$ e su $[0, b/\sqrt{\epsilon}]$. Analizziamo solamente la seconda regione d'integrazione. Posto $\lambda = 1/\sqrt{\epsilon}$, consideriamo l'integrale

$$F(\epsilon) \equiv \int_0^b e^{i\frac{x^2}{\epsilon}} f(x) dx \quad 8.59$$

dove la funzione $f(x) \in C^\infty$ ed è nulla insieme a tutte le sue derivate in $x = b$. Utilizziamo l'identità (ottenuta per integrazione per parti rispetto ad x)

$$F(\epsilon) = [f(x) \int_{-\infty}^0 e^{-i(x+i\xi)^2} d\xi]_0^b - \int_0^b \frac{df}{dx} \left(\int_{-\infty}^0 e^{-i(x+i\xi)^2} d\xi \right) dx. \quad 8.60$$

Integrando per parti k volte rispetto a ξ (notare che in virtù della convergenza dominata si possono scambiare gli ordini di integrazione) si ottiene

$$F(\epsilon) = - \sum_0^{k-1} \phi_j(0, \epsilon) f^j(0) + R_k(\epsilon),$$

dove

$$\phi_j(x, \epsilon) = (j-1)! \int_0^\infty \xi^{j-1} e^{-i(x-i\xi)^2} d\xi, \quad R_k(\lambda) = \int_0^b \phi_k(x, \epsilon) f^{(k)}(x) dx \quad 8.61$$

(se la funzione $f(x)$ è derivabile solo fino all'ordine N questa iterazione può essere fatta solamente N volte).

Sommando il termine che proviene da una simile analisi per la prima regione d'integrazione in (8.57) si ottiene, per $\lambda = \epsilon^{-1} > 0$ e per ogni intero $k > 1$ se la funzione g è k volte differenziabile,

$$\int_{-a}^b e^{i\frac{g(x)}{\epsilon}} f(x) dx = e^{i\frac{g(x_0)}{\epsilon}} \sum_0^{k-1} a_j(f, g) e^{j+\frac{1}{2}} + R_k(\epsilon), \quad |R_k(\epsilon)| \leq c_k \epsilon^k \|f\|_{C^{k+1}[-a, b]}. \quad 8.62$$

I coefficienti $a_j(f, g)$ sono dati esplicitamente da

$$a_j(f, g) = \frac{\Gamma(j+\frac{1}{2})}{(2j)!} e^{i\frac{\pi\sigma}{4}(2j+1)} \left(\frac{d}{dx}\right)^j [h(x)^{-j-\frac{1}{2}} f(x)]_{x=x_0}, \quad (8.63)$$

$$h(x) \equiv 2\sqrt{\sigma(g(x) - g(x_0))}(x - x_0)^{-1}$$

dove $\sigma \equiv \text{sign } g''(x_0)$. Le (8.62) (8.63) danno esplicitamente il comportamento asintotico dell'integrale nel limite $\lambda \rightarrow \infty$.

♣

Nel caso di dimensione maggiore di uno vale ancora il Lemma di Morse e si possono scegliere variabili in cui la forma quadratica nel Lemma di Morse è diagonale. Si può pertanto procedere per induzione riducendosi ogni volta al caso unidimensionale utilizzando la formula (8.53).

Si possono ancora dare delle formule relativamente esplicite per i coefficienti dello sviluppo in serie di potenze $\epsilon^{\frac{1}{2}+k}$, con $k \geq 0$. Nel caso in cui g abbia un solo punto critico non degenero $x_0 \in R^d$, indicando con $\Omega \in R^d$ un intorno di questo punto critico si ha

$$F(\epsilon) = e^{i\frac{g(x_0)}{\epsilon}} \sum_0^{k-1} a_j(f, g) \epsilon^{\frac{j}{2}} + R_k(\epsilon), \quad |R_k(\epsilon)| < c_k(g) \|f\|_{C_k^\beta(\Omega)} \epsilon^{\frac{d}{2}+k} \quad (8.64)$$

dove $\beta < \infty$ e $a_j(f, g)$ è un operatore lineare in f di ordine $2j$.

L'espressione esplicita degli $a_j(f, g)$ diviene particolarmente complicata. Diamo solo il termine di ordine più alto in ϵ :

$$F(\epsilon) = (2\pi\epsilon)^{\frac{d}{2}} |\det H_g(x_0)|^{-\frac{1}{2}} e^{i\frac{g(x_0)}{\epsilon}} e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_g(x_0)}, \quad \sigma_g(x_0) = \text{sign } H_g(x_0) \quad (8.65)$$

dove $H_g(x_0)$ è la forma quadratica (Hessiana) che compare nel lemma di Morse nel caso di $d > 1$ dimensioni. Per una trattazione piuttosto completa si può vedere [Hor67, Fed99].

Notare che in casi di interesse pratico la funzione di fase dipende da addizionali parametri e i punti critici formano una varietà nello spazio dei parametri. Per applicare il metodo della fase stazionaria in questi casi è importante verificare che i punti critici siano uniformemente non degeneri (gli autovalori dello Hessiano siano uniformemente lontani da zero sull'intera varietà).

Utilizziamo i teoremi precedenti per stimare, a meno di termini di ordine $O(\sqrt{\epsilon})$, l'integrale (8.50) con dato iniziale (8.51). In questo caso, utilizzando l'espressione (equivalente a (8.50))

$$\phi_\epsilon(x, t) = (2i\pi t)^{-d} \int_{R^d} e^{i\frac{|x-y|^2}{2\epsilon t}} \phi_0(y) dy \quad (8.67)$$

si ha

$$\theta_x(y) = \frac{(x-y)^2}{2t} + S(y)$$

e

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{(y-x)}{t} + S'(y). \quad 8.68$$

Se $n(x)$ ha supporto compatto (quindi dobbiamo considerare solo valori di x in un intervallo $(-L, L)$ e per t abbastanza piccolo (quanto piccolo può dipendere da L) l'equazione

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = 0$$

ha una sola soluzione, che indichiamo con $y_0(x)$. Abbiamo

$$\frac{\partial \theta^2}{\partial y^2} = -\frac{1}{t} + S''(y) \quad 8.69$$

e quindi, per t abbastanza piccolo, $\frac{\partial \theta^2}{\partial y^2} < 0$ (notare che per valori più grandi di t questo Hessiano diventa degenere e quindi il metodo non si può applicare). Ne concludiamo che, con un errore più piccolo di $\sqrt{\epsilon}$, la soluzione è

$$\phi(x, t) = 2\pi \sqrt{\epsilon} e^{i \frac{(S'(x(t)))^2 t}{2\epsilon}} \left[\frac{1}{t} - S''(x(t)) \right] \quad 8.70$$

dove abbiamo indicato con $x(t)$ la soluzione (che assumiamo essere unica) di $\frac{(x-y)^2}{2t} + S(x(t)) = 0$

Generalizziamo ora l'analisi precedente. Analizzeremo equazioni del tipo

$$i\epsilon \partial_t \phi^\epsilon = (Op^w(H))\phi^\epsilon \quad 8.71$$

con $x \in R^d$, $t \in R$, $\epsilon \in (0, \epsilon_0)$ e con dati iniziali

$$\phi^\epsilon(x, 0) = \sqrt{n_I(x)} e^{\frac{i}{\epsilon} S_I(x)}, \quad 8.72$$

dove abbiamo indicato con $Op^w(H)$ l'operatore che la quantizzazione di Weyl associa alla hamiltoniana $H(x, p)$

$$(Op^w(H)\phi)(x) = \left(\frac{1}{2\hbar\pi}\right)^d \int_{R^d \times R^d} H\left(\frac{x+y}{2}, p\right) \phi(y) e^{\frac{i}{\epsilon}(x-y \cdot p)} dp dy. \quad 8.73$$

Torneremo più in dettaglio sulla quantizzazione di Weyl nel cap. 11. Il parametro ϵ ha qui nuovamente il ruolo di \hbar .

Per analogia con l'ottica chiameremo *intensità di energia* la funzione

$$|\phi^\epsilon(x, t)|^2 \equiv n^\epsilon(x, t), \quad n^\epsilon(x, 0) = n_I(x)$$

con $0 < \epsilon \leq \epsilon_0$. Utilizziamo la notazione

$$H(x, \xi) \in S^\sigma(\mathbb{R}^d) \Leftrightarrow \forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}, \exists c_{\alpha, \beta} > 0 : \left| \frac{\partial^{\alpha+\beta}}{\partial x^\alpha \partial \xi^\beta} H(x, \xi) \right| < c_{\alpha, \beta} (I + |\xi|^{\sigma-\beta}). \quad 8.74$$

Sulla hamiltoniana facciamo le seguenti ipotesi.

A) Esiste $\sigma \in \mathbb{R}$ tale che $H \in S^\sigma(\mathbb{R}^d)$ uniformemente in $0 < \epsilon \leq \epsilon_0$.

B) L'operatore $Op^w(H)$ è autoaggiunto.

Sul dato iniziale assumiamo

$$n_I \in L^1(\mathbb{R}^d), \quad n_I \geq 0, \quad S_I \in W_{loc}^{1,1}(\mathbb{R}^d) \quad 8.75$$

(con il simbolo $W_{loc}^{1,1}$ indichiamo le funzioni che sono localmente L^1 e le cui derivate sono anche di classe L^1)

Sotto queste ipotesi esiste una soluzione debole di (8.71); e vale

$$|n^\epsilon(t)|_{L^1} = |n^\epsilon(0)|_{L^1} \quad \forall t.$$

Nota 8.5

Esempi tipici di equazioni della forma (8.71) sono

a)

$$i\epsilon \partial_t \phi^\epsilon = -\frac{\epsilon^2}{2} \Delta \phi^\epsilon + V(x) \phi^\epsilon \quad 8.76$$

(equazione di Schrödinger).

b)

$$i\epsilon \partial_t \phi^\epsilon + |D_y| a\left(\frac{x-y}{2}\right) \phi^\epsilon(y)|_{y=x} = 0 \quad 8.77$$

(se $a(x) = 1$ quest'equazione è connessa all'equazione delle onde; infatti, se $u_{tt}^\epsilon = \Delta u^\epsilon$, la quantità

$$\phi_\pm^\epsilon \equiv \partial_t u^\epsilon \pm i|D|u^\epsilon$$

soddisfa

$$i\partial_t \phi_\pm^\epsilon = |D| \phi_\pm^\epsilon.$$

c)

$$\epsilon \partial_t \phi^\epsilon = \frac{\epsilon^3}{3} \phi_{xxx}^\epsilon \quad 8.78$$

(equazione KdV linearizzata).



Per studiare (8.71) poniamo il seguente *Ansatz*

$$\phi^\epsilon(x, t) = A^\epsilon(x, t) e^{\frac{i}{\epsilon} S(x, t)} \quad 8.79$$

e supponiamo (per il momento) che la soluzione possa essere scritta come serie formale di potenze nel parametro ϵ

$$A^\epsilon = A + \epsilon A_1 + \epsilon^2 A_2 + \dots \quad 8.80$$

Studiamo solo il caso di una hamiltoniana polinomiale

$$H(x, \xi) = \sum_{|k| \leq m} a_h(x) \xi^k, \quad 8.81$$

dove k è un multi-indice e $\xi^k \equiv \xi_{k_1}, \dots, \xi_{k_d}$. Sostituendo formalmente (8.80) e (8.81) in (8.71) si ottiene

$$Op^w(H)(A^\epsilon e^{\frac{i}{\epsilon} S}) = e^{\frac{i}{\epsilon} S} \sum_{|k|=0}^m (i\epsilon)^{|k|} Op^w(R_k(A^\epsilon)) \quad 8.82$$

dove

$$\begin{aligned} R_0(A^\epsilon) &\equiv H(x, \nabla S) A^\epsilon, \\ R_1(A^\epsilon) &\equiv \sum_1^d \frac{\partial H(x, \nabla S)}{\partial \xi_k} \cdot \frac{\partial A^\epsilon}{\partial x_k} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_1^d \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k} \cdot \frac{\partial H(x, \nabla)}{\partial \xi_j \partial \xi_k} A^\epsilon + \frac{1}{2} \sum_1^d \frac{\partial^2 H(x, \nabla)}{\partial y_k \partial \xi_j} A^\epsilon. \end{aligned}$$

All'ordine zero in ϵ , queste equazioni hanno la forma (con $\xi = \nabla S(x)$)

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \sum_1^d \frac{\partial H(x, \xi)}{\partial \xi_k} \cdot \frac{\partial A}{\partial x_k} + \frac{1}{2} \sum_k \frac{\partial^2 S}{\partial x_k \partial x_j} \cdot \frac{\partial^2 H(x, \xi)}{\partial x_k \partial \xi_j} \cdot A + \frac{1}{2} \sum_1^d \frac{\partial^2 H(x, \xi)}{\partial x_k \partial \xi_j} A = 0, \quad 8.83$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(x, \nabla S) = 0. \quad 8.84$$

L'equazione (8.84), lineare in A , è detta *equazione del trasporto*. Tutte le equazioni che si ottengono considerando termini di ordine superiore in ϵ sono equazioni *lineari* inhomogenee nelle A_k , con termine noto che dipende dalle A_s con $s < k$. Scritte in termini della coppia $(n = A^2, S)$ le (8.83) e (8.84) hanno la forma

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \sum_1^d \frac{\partial H(x, \xi)}{\partial \xi_k} \cdot \frac{\partial n}{\partial x_k} + \sum \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial \xi_k} \cdot \frac{\partial^2 H}{\partial \xi_k \partial \xi_k} n + \sum \frac{\partial H(x, \xi)}{\partial x_k \partial \xi_k} n = 0, \quad 8.85$$

$$\frac{\partial S(x, t)}{\partial t} + H(x, \nabla_x S(x, t)) = 0 \quad 8.86$$

con

$$n(x, 0) = n(x), \quad S(x, 0) = S(x).$$

La (8.85) è un legge di conservazione per la funzione $n(x, t)$. La (8.86) è l'equazione di Hamilton-Jacobi per la fase S .

Nota 8.6

Nel caso dell'equazione di Schrödinger si ha

$$\partial_t n + \operatorname{div}(n \nabla S) = 0, \quad \partial_t S + \frac{1}{2} |\nabla S|^2 + V(x) = 0. \quad 8.87$$

Nel caso dell'equazione delle onde con indice di rifrazione $n(x)$ si ha

$$\partial_t n + \operatorname{div}\left(\frac{n(x) \nabla S}{|\nabla S|}\right) = 0, \quad \partial_t S + n(x) |\nabla S| = 0. \quad 8.88$$

La (8.88) è l'equazione dell'eiconale in ottica geometrica.



In dimensione 1 il sistema (8.88) si semplifica ed assume la forma

$$\partial_t u + \partial_x(n(x)) \operatorname{sign}\left[\frac{\partial S}{\partial x}\right] u = 0. \quad 8.89$$

Se il termine $\frac{dS}{dx}$ non cambia segno, allora il sistema (8.89) si disaccoppia e l'approssimazione WKB è esatta (se $A_k(0) = 0$, allora $A_k(t) = 0$ per ogni t).

Il procedimento che abbiamo brevemente riassunto permette di dare un'approssimazione di alcune soluzioni di (8.71) all'ordine ϵ per tempi in cui la soluzione dell'equazione di Hamilton-Jacobi è unica. Più precisamente si ha il risultato seguente

Teorema 8.7

Sia $\phi^\epsilon(t)$ una soluzione di (8.71) con dato iniziale

$$\phi^\epsilon(x, 0) = \sqrt{n(x)} e^{\frac{i}{\epsilon} S(x)}.$$

Assumiamo che $n \in S(R^d)$ e che S sia limitata insieme alle sue due derivate prime. Assumiamo che per $|t| < T_c$ le soluzioni di (8.83) e (8.84) esistano e definiamo

$$\phi_{WKB}^\epsilon(x, t) \equiv \sqrt{n(x, t)} e^{\frac{i}{\epsilon} S(x, t)}. \quad 8.90$$

Allora, si ha, per una opportuna costante C ,

$$\sup_{|t| < T_c} |\phi_{WKB}^\epsilon(t) - \phi^\epsilon(t)|_2 < C\epsilon. \quad 8.91$$

◇

Dimostrazione

La deduzione formale mediante sviluppo in serie del parametro ϵ mostra che

$$i\epsilon \frac{\partial}{\partial t} \phi_{WKB}^\epsilon(x, t) - (Op^w(H)\phi_{WKB}^\epsilon)(x, t) = \epsilon^2 Q^\epsilon(x, t) \quad 8.92$$

dove il termine Q^ϵ , che dipende dalle derivate delle funzioni A ed S , è limitato uniformemente per $\epsilon < \epsilon_0$ in $L^1((-T_c, +T_c), L^2(\mathbb{R}^d))$. Questo segue dalle ipotesi che abbiamo fatto su $Op^w(H)$, n , S .

Da (8.92) segue, ponendo $u^\epsilon(x) \equiv \phi^\epsilon(x) - \phi_{WKB}^\epsilon(x)$,

$$\partial_t u^\epsilon + \frac{i}{\epsilon} Op^w(H)u^\epsilon - \epsilon Q^\epsilon = 0, \quad u^\epsilon(x, 0) = 0. \quad 8.93$$

Da (8.92) si deduce

$$\partial_t |u_\epsilon|^2 = -\epsilon |u_\epsilon| |Q_\epsilon|$$

e quindi, per integrazione

$$|u^\epsilon(t)| \leq \epsilon \int_0^t |Q^\epsilon(s)| ds. \quad 8.94$$

Questo implica

$$\sup_{|t| < T_c} |u^\epsilon(t)|_{L^2} < C\epsilon. \quad 8.95$$

♥

In particolare, nel caso dell'equazione di Schrödinger si ha

$$2Q^\epsilon = e^{\frac{i}{\epsilon} S} \Delta(\sqrt{n}), \quad n = |u|^2. \quad 8.96$$

Nota 8.7

Le equazioni (8.95) e (8.96) hanno in generale soluzioni uniche per tempi minori di quelli in cui si producono le caustiche, ovvero singolarità del moto nello spazio delle configurazioni. Notare che questo tipo di equazioni viene in generale risolto con il metodo delle caratteristiche e l'unicità viene meno al primo istante in cui due curve caratteristiche si intersecano.

Consideriamo all'istante iniziale $t = 0$ un punto $x \in \mathbb{R}^d$. Un qualsiasi punto y in un intorno di x può essere raggiunto partendo da x e seguendo una curva integrale del sistema dinamico

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \nabla_\xi H(\hat{x}, \hat{\xi}), \quad \frac{d\hat{\xi}}{dt} = \nabla_x H(\hat{x}, \hat{\xi}), \quad 8.97$$

$$\hat{\xi}(x, 0) = x, \quad \hat{\xi}(0, x) = \nabla S(x). \quad 8.98$$

Questa curva è data intrinsecamente da

$$\hat{\xi}(t, x) = \nabla S(\hat{x}(t, x), t) \quad 8.99$$

ed esiste un tempo τ tale che $\hat{x}(t, x) = y$. Per la dimostrazione si può vedere [Eva98]. In generale l'applicazione $x \rightarrow \hat{x}(t, x)$ non è iniettiva per tempi lunghi. Da una soluzione di (8.97) e (8.98) si ottiene una soluzione di (8.99) integrando lungo la traiettoria considerata l'equazione

$$\frac{dS(\hat{x}, t)}{dt} = \xi \cdot \nabla_{\xi} H(x, \xi) - H(\hat{x}, \hat{\xi}), \quad S(\hat{x}(0, x)) = S(x). \quad 8.100$$

In generale, la soluzione così costruita è discontinua nel punto di intersezione delle due curve caratteristiche. Metodi per costruire soluzioni per tempi maggiori sono molto complessi [Fed99].

Il metodo delle funzioni di Wigner, che vedremo nel cap. 11, ha rispetto al metodo WKB il vantaggio di utilizzare funzioni definite sullo spazio delle fasi e non sullo spazio delle configurazioni. In questo contesto allargato, le caustiche sono i punti in cui le curve caratteristiche cessano di essere proiezioni di un'unica curva nello spazio delle fasi; quindi le singolarità dovute alle caustiche diventano singolarità non delle curve ma della loro proiezioni sullo spazio della configurazioni.

APPENDICE 8A: METODO W.K.B. – IL CASO STAZIONARIO

Abbiamo visto finora l'applicazione del metodo WKB alla ricerca di soluzioni approssimate dell'equazione di Schrödinger nel caso di dati iniziali fortemente oscillanti. Questo ci ha condotto alle soluzioni dell'equazione di Hamilton-Jacobi dipendente dal tempo.

Vedremo ora il ruolo che ha l'equazione stazionaria di Hamilton-Jacobi; ci aspettiamo che essa intervenga nella costruzione di soluzioni stazionarie dell'equazione di Schrödinger, cioè nella costruzione approssimata di autofunzioni.

Poiché le soluzioni dell'equazione stazionaria di Hamilton-Jacobi sono funzioni generatrici di trasformazioni simplettiche, connesse in modo continuo con la trasformazione identità, ci aspettiamo un ruolo di quest'analisi in una quantizzazione che sia basata su varietà lagrangiane.

Studiamo come sempre prima il caso di un sistema con un grado di libertà. Sia

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

la Hamiltoniana classica, e

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad 8A.1$$

la corrispondente Hamiltoniana quantistica. Cerchiamo, per \hbar piccolo, soluzioni stazionarie

$$\phi(x, t) = e^{-i\omega t} \phi(x) :$$

risulta che la funzione $\phi(x)$ deve soddisfare l'equazione (agli autovalori)

$$(\hat{H} - E)\phi = 0, \quad E = \hbar\omega. \quad 8A.2$$

Nel caso $V = 0$ la soluzione è

$$\phi(x) = e^{i\xi x}, \quad \xi = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad 8A.3$$

Se $V(x)$ è lentamente variabile su scala \hbar risulta naturale trattare il caso generale assumendo che la soluzione abbia la forma

$$\phi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} a(x; \hbar)$$

e cercare di determinare le funzioni $S(x)$ e $a(x, \hbar)$ come serie di potenze (eventualmente formali) in \hbar .

Studiamo prima il caso $a(x) \equiv 1$. Questo darà soluzioni non normalizzabili che approssimeranno gli autostati generalizzati dello spettro continuo. L'equazione (8A.1) diventa

$$(\hat{H} - E)\phi = 0 = \left[\frac{(S'(x))^2}{2m} + (V(x) - E) - i \frac{\hbar}{2m} S''(x) \right] e^{\frac{i}{\hbar} S(x)}. \quad 8A.4$$

Risolviamo questa equazione supponendo che la soluzione possa essere scritta in forma di serie di potenze di \hbar . Si ottiene all'ordine zero

$$\frac{(S'(x))^2}{2m} + V(x) = E$$

cioè

$$S'(x) = \pm \sqrt{2m} \sqrt{E - V(x)}.$$

Naturalmente questa è la soluzione solamente per quei valori della variabile x per i quali $V(x) \leq E$. In questa appendice analizziamo solamente questo caso. Il caso di inversione del moto (ad es. moto periodico) verrà trattato brevemente nell'appendice C. Con questa scelta di ϕ si ha

$$(\hat{H} - E)\phi = O(\hbar). \quad 8A.5$$

Notiamo che ponendo $dS = S'(x)dx$, l'immagine di dS è contenuta nell'insieme (dello spazio delle fasi) $\{q, p : H(q, p) = E\}$.

Quest'analisi si generalizza immediatamente al caso di d gradi di libertà. L'equazione che determina S è ancora l'equazione di Hamilton-Jacobi stazionaria

$$H(x; \nabla S) = \frac{|\nabla S(x)|^2}{2m} + V(x) = E. \quad 8A.6$$

Chiameremo *funzioni ammissibili* le soluzioni di (8A.5). Se vogliamo ottenere uno stato normalizzato (non un'autofunzione generalizzata) poniamo l'*Ansatz*

$$\phi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} a(x), \quad a \in L^2(\mathbb{R}^d) \quad 8A.7$$

e otteniamo

$$(\hat{H} - E)\phi = \hbar[\Delta S + 2 \frac{\partial a}{\partial x_k} \cdot \frac{\partial S}{\partial x_k}] + O(\hbar^2). \quad 8A.8$$

Ne concludiamo che $|(\hat{H} - E)\phi| = O(\hbar^2)$ e pertanto se S è una funzione ammissibile otteniamo un'approssimazione all'ordine \hbar di una soluzione dell'equazione di Schrödinger stazionaria.

Per questa approssimazione è soddisfatta l'equazione (del trasporto)

$$a \Delta S + 2(\nabla a, \nabla S) = 0 \quad 8A.9$$

Nel caso $d = 1$ l'equazione del trasporto assume una forma particolarmente semplice,

$$a(x)S''(x) + 2a'(x)S'(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (a^2 S')' = 0$$

che ha come soluzioni

$$a(x)_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{C}{4(E - V(x))^{1/4}}}.$$

Possiamo notare che, detta Γ_E la varietà (di dimensione 1) $(q, p) : H(q, p) = E$, i punti nei quali γ_E non si proietta su R sono quelli in cui $a(x) \rightarrow \infty$ (caustiche, o punti di inversione del moto nello spazio delle configurazioni).

Un'approssimazione migliore

$$(\hat{H} - E)\phi = O(\hbar^{N+2})$$

si può ottenere pur di fare l'ansatz

$$\phi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} (a_0 + \hbar a_1 + \hbar^2 a_2 + \dots + \hbar^N a_N) \quad 8A.10$$

dove i coefficienti $a_k(x)$ soddisfano un opportuno sistema di equazioni lineari non omogenee.

Dal punto di vista geometrico, se $S : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ è ammissibile (soddisfa le equazioni di Hamilton-Jacobi), allora $\mathcal{L} = \text{Ran}(dS)$ ha le seguenti proprietà:

- 1) \mathcal{L} è una varietà lagrangiana di dimensione d immersa in $H^{-1}(E)$.
- 2) Il rilevamento (pull-back) a \mathcal{L} della forma differenziale $a_n = \sum_k p_k dq_k$ è una forma esatta.

3) La restrizione a \mathcal{L} della proiezione $T^*R^d \rightarrow R^n$ induce un isomorfismo $\mathcal{L} \simeq R^d$.

Faremo uso del seguente Lemma

Lemma 8A.1

La funzione $H : R^{2d} \rightarrow R$ è localmente costante su una varietà lagrangiana \mathcal{L} se e solo se il campo vettoriale X_H è tangente a \mathcal{L} .

◇

Dimostrazione

Il campo hamiltoniano associato è

$$X_H \equiv \sum \left(\frac{\partial H}{\partial p_k} \cdot \frac{\partial}{\partial q_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial}{\partial p_k} \right),$$

quindi

$$d\alpha_n \cdot X_H = dH,$$

$$\omega(X_H, v) = -dH(v), \quad v \in T R^d$$

$$T_z \mathcal{L} \in \ker(dH) \Rightarrow T_z \mathcal{L} \cup X_H(p) \subset \ker(d\alpha_n) \Rightarrow X_H(p) \in T_z(\mathcal{L}).$$

♡

Riprendiamo l'analisi dell'equazione del trasporto. Notiamo che l'immagine attraverso la proiezione Π del campo vettoriale hamiltoniano X_H sullo spazio tangente alla varietà \mathcal{L} nel punto x è dato da

$$X_{HT_z \mathcal{L}} = \sum_k \left(\frac{\partial S}{\partial p_k} \frac{\partial}{\partial q_k} - \frac{\partial S}{\partial q_k} \frac{\partial}{\partial p_k} \right)$$

e quindi si può scrivere

$$\operatorname{div}(a^2 X_H^q) = 0, \quad X_H^q = \left\{ \frac{\partial S}{\partial q_i} \right\}. \quad 8A.11$$

Ne segue che la derivata di Lie di $a^2 dq$ rispetto al campo vettoriale X_H^q è nulla, e quindi

$$\Pi^{-1}(a^2 dq) \quad 8A.12$$

è un elemento di volume invariante per il flusso hamiltoniano generato da H . Notiamo che $a^2(q)$ è una densità di Liouville e quindi $a(q)$ è una densità di ordine $1/2$.

Ricordiamo qui la definizione di densità di ordine α (od anche α -densità), con $\alpha \in R^+$. Una 2-forma può essere riguardata come una funzione lineare ν sui riferimenti (frames) \mathcal{E} , con la proprietà che, scelta una base qualunque

$$\nu(A\mathcal{E}) = \nu(\mathcal{E}) \det A, \quad A \equiv (a_{i,j}) \quad 8A.13$$

dove A è la matrice che definisce in quella base il cambiamento (locale) di sistema di riferimento.

In generale, indicate con B_V le basi di uno spazio vettoriale V , definiremo *densità* di ordine α , con $\alpha \in \mathbb{C}$, una funzione λ lineare sulle basi che per cambiamento di base si trasforma nel seguente modo

$$\lambda(\mathcal{E} A) = \lambda(\mathcal{E}) |\det A|^\alpha. \quad 8A.14$$

Il gruppo generale lineare $GL(V)$ agisce in modo transitivo sulle basi, quindi l'ordine di una densità risulta determinato univocamente dalla valutazione su una sola base.

Definizione 8A.1

$|\Lambda|^\alpha V$ è lo spazio vettoriale delle densità di ordine α sullo spazio vettoriale V .

◇

Notiamo che $|\Lambda|^\alpha V$ è uno spazio vettoriale complesso di dimensione 1; se Ξ è un fibrato su M , si può definire $|\Lambda|^\alpha \Xi$.

Definizione 8A.2

- a) $|\Omega|^\alpha \Xi$ è lo spazio vettoriale delle sezioni regolari di $|\Lambda|^\alpha \Xi$.
 b) $|\Omega|_c^\alpha \Xi$ è lo spazio vettoriale delle sezioni regolari di $|\Lambda|^\alpha \Xi$ a supporto compatto.

◇

Se M è una varietà, indichiamo con $|\Omega|^\alpha M$ le densità di ordine α su M . Si ha allora un'applicazione

$$|\Omega|^1 M \rightarrow \mathbb{C}, \quad \sigma \mapsto \int_M \sigma \quad 8A.15$$

che definisce l'integrale su M , e un'applicazione

$$|\Omega|^{1/2} M \rightarrow \mathbb{C}, \quad \sigma \mapsto \int_M \sigma \quad 8A.16$$

che definisce un prodotto scalare dato da

$$\langle \sigma, \tau \rangle \equiv \int_M \bar{\tau} \sigma.$$

Definizione 8A.3

Il completamento di $|\Omega|^{1/2} M$ rispetto a questo prodotto scalare prende il nome *Spazio di Hilbert intrinseco della varietà M* .

Notare che la densità (per il lemma 8A.1) dipende solo da H e non dalla funzione ammissibile S .

◇

Abbiamo quindi visto che se S è una funzione ammissibile ed $a(q)$ è una densità di ordine $1/2$ su $\mathcal{L} \equiv \text{Ran}(dS)$, invariante per il flusso hamiltoniano di H , allora $a(q)e^{\frac{i}{\hbar}S(x)}$ approssima al secondo ordine in \hbar una soluzione di energia E dell'equazione di Schrödinger.

Per $d=1$ la soluzione approssimata è data esplicitamente da

$$\phi_{appr.}(x) = \sqrt{n_+} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E-V(y))} dy} + \sqrt{n_-} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E-V(y))} dy} \quad 8A.17$$

con (dalla (8A.9))

$$n_{\pm}(x) = \frac{a_{\pm}}{\sqrt{2m(E-V(x))}}.$$

Nota 8A.1

Mentre lo stato semiclassico WKB che abbiamo costruito in quest'appendice è regolare sulla varietà lagrangiana \mathcal{L} , la sua proiezione su R^n può avere delle singolarità (caustiche).



APPENDICE 8B: INDICE DI MASLOV. GRUPPO METAPLETTICO

Iniziamo con lo studio del gruppo generato dalle hamiltoniane quantistiche omogenee di grado due. Conviene utilizzare la combinazioni lineari

$$\sqrt{2} a_k = \hat{q}_k + i\hat{p}_k, \quad \sqrt{2} a_k^* = \hat{q}_k - i\hat{p}_k \quad 8B.1$$

che soddisfano (su un opportuno insieme denso)

$$a h_k = k h_{k-1}, \quad a^* h_k = (k+1) h_{k+1}, \quad a^* a h_k = k h_k \quad 8B.2$$

con $\{h_k\}$ le funzioni di Hermite.

Notiamo che l'insieme degli operatori autoaggiunti dati da (con A una matrice hermitiana)

$$\hat{H}_A = \frac{1}{2} \sum_{h,k} a_h^* A_{h,k} a_k, \quad A = A^*$$

ha un dominio denso comune invariante (i vettori analitici di $N = \sum_k a_k^* a_k$) e su quest'insieme

$$[\hat{H}_A, \hat{H}_B] = \hat{H}_C + \text{Tr}(AB) I, \quad C = AJB - BJA \quad 8B.3$$

dove J è la matrice simplettica standard.

Abbiamo notato che una relazione strutturalmente identica vale per i polinomi omogenei di ordine due nelle coordinate simplettiche $z \equiv (p + iq)/\sqrt{2}$,

$$H_A = \frac{1}{2} \sum_{h,k} z_h^* A_{h,k} z_k, \quad A = A^*$$

che soddisfano (rispetto alla parentesi di Poisson associata alla matrice simplettica J)

$$\{H_A, H_B\} = H_C, \quad C = AJB - BJA \quad 8B.4$$

Il gruppo generato dagli unitari e^{iH_A} viene detto *gruppo metaplettico*; esso ha la stessa algebra di Lie del gruppo $Sp(2n) \subset GL(R^{2n})$ delle trasformazioni simplettiche in R^{2n} (caratterizzate dalla relazione $SJS^t = J$ dove J è la matrice simplettica standard).

Indicheremo questa rappresentazione di $Sp(2n)$ con il simbolo $M(S)$, $S \in Sp(2n)$; essa costituisce un ricoprimento doppio di $Sp(2n)$. Infatti l'azione del gruppo metaplettico su sé stesso data da $S'_t = e^{itH_A} S e^{-itH_A}$ identifica gli operatori H_A e $-H_A$ mentre l'azione dello stesso gruppo sugli elementi di $L^2(R^3)$ permette di distinguere tra $e^{itH_A} \phi$ e $e^{-itH_A} \phi$. Indicheremo con il simbolo S una matrice simplettica.

Alla matrice S vengono associati due operatori del gruppo metaplettico, che differiscono tra loro per un segno; li indicheremo con $M(S, \sigma)$, $\sigma = \pm 1$.

Ad ogni operatore metaplettico $M(S, \sigma)$ è associato in modo naturale un angolo γ_M , che descrive la fase relativa dei vettori $M(S, \sigma)\phi_z$ e ϕ_{Sz} (che rappresentano lo stesso stato e quindi differiscono tra loro al più per una fase). È facile vedere che quest'angolo non dipende da σ e dal punto base z .

Anche alla matrice S può essere associato un angolo γ_S . Infatti ogni matrice simplettica può essere scritta nella forma $S = TR$ con T positiva ed R ortogonale. Poiché lo spazio delle matrici positive è contraibile, $Sp(2N)$ ha la stessa omotopia di $U(N)$. D'altra parte, $U(N) = SU(N) \times S^1$ e il gruppo $SU(N)$ è contraibile. Dunque l'omotopia di $Sp(2N)$ coincide con l'omotopia di S^1 e può essere caratterizzata da un angolo.

Il valore dell'angolo attribuito a ciascuna matrice dipende dalla costruzione che viene adottata. Una costruzione è la seguente. Ogni matrice simplettica di rango $2n$ può essere scritta nella forma

$$S = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad 8B.5$$

dove $A B C D$ sono matrici reali di rango n . Per le matrici simplettiche per le quali $\det(A + iB) \neq 0$ definiamo l'angolo γ_S mediante

$$\gamma_S \equiv \arg \det (A + iB) \quad 8B.6$$

ed estendiamo per continuità questa definizione alle altre matrici. Con questa costruzione la relazione tra i due angoli è $\gamma_M = \frac{1}{2}\gamma_S + n\pi$ dove n è il numero di gradi di libertà del sistema.

Nota 8B.1

Associando così un angolo ad ogni matrice simplettica resta associato ad ogni curva chiusa nello spazio delle matrici simplettiche un indice, invariante per deformazioni continue e pertanto invariante topologico. Questo invariante, detto *indice di Maslov*, non dipende dalla costruzione che viene scelta per definire l'angolo e ricopre un ruolo essenziale nello studio del limite semiclassico con il metodo WKB.



Notiamo che S può essere scritto nella forma

$$S = \begin{pmatrix} T_1 & T_2 \\ T_2 & T_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\frac{\alpha}{N})I & \sin(\frac{\alpha}{N})I \\ -\sin(\frac{\alpha}{N})I & \cos(\frac{\alpha}{N})I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_0 & Y_0 \\ -Y_0 & X_0 \end{pmatrix} \quad 8B.7$$

con T_1 e T_2 matrici positive, X_0 e Y_0 matrici reali, I la matrice identità e $\det(X_0 + iY_0) = 1$. Dalla definizione delle matrici A e B segue

$$A + iB = e^{i\alpha N^{-1}}(T_1 + iT_2)(X_0 + iY_0) \quad 8B.8$$

e quindi si ha

$$\det(A + iB) = e^{i\alpha} \det T_1 \det(I + iT_1 T_2^{-1}). \quad 8B.9$$

La matrice T_1^{-1} è simmetrica (S è simplettica) quindi gli autovalori di $(I + iT_1 T_2^{-1})$ sono numeri complessi della forma $1 + i\lambda$. Quando S compie un ciclo nello spazio delle matrici simplettiche, questi autovalori compiono dunque un ciclo contraibile.

Cicli completi di $\alpha(t)$ corrispondono a cicli completi di $\gamma = \arg \det(A + iB)$; quindi $\gamma_S(t)$ fornisce una coordinata in S^1 che permette di determinare l'indice di una curva chiusa nello spazio delle matrici simplettiche.

È conveniente avere una descrizione esplicita degli operatori $M(S)$ come nuclei integrali nella rappresentazione delle x ; data la matrice simplettica

$$S = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad 8B.10$$

si tratta di determinare il nucleo integrale di un operatore $M(S)$ che soddisfi

$$M^* \hat{q} M = A \hat{q} + B \hat{p}, \quad M^* \hat{p} M = C \hat{q} + D \hat{p}. \quad 8B.11$$

Si ottiene

$$M(S)(x, x') = \frac{e^{i\beta}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^N \det \|B\|}} e^{\frac{i}{2\hbar} \{(x', B^{-1}Ax') - 2(x', B^{-1}x) + (x, DB^{-1}x)\}}. \quad 8B.12$$

La determinazione del logaritmo è per convenzione tale da rendere la funzione continua in C/R_- ; il fattore $e^{i\beta}$ non risulta determinato.

Nota 8B.2

Il nucleo integrale nella rappresentazione delle x diventa formalmente singolare quando $\det B \rightarrow 0$, sebbene l'operatore $M(S)$ risulti regolare in questo limite, come si può vedere scegliendo un'altra rappresentazione dell'algebra di Heisenberg, ad esempio quella in cui la quantità di moto è diagonale. In questa rappresentazione il ruolo della matrice B viene ricoperto dalla matrice C .



Per una traiettoria $S(t)$ nello spazio delle matrici simplettiche il luogo dei punti nei quali $\det(B) = 0$ verrà chiamato *caustica* (o *superficie caustica*).

Se si considera il limite dell'operatore $M(S)$ quando la traiettoria ha come punto limite un caustica, si vede che il nucleo integrale ha una singolarità del tipo

$$\delta(y_1(x) - y_1(x')) \cdots \delta(y_k(x) - y_k(x')) G(x, x') \quad 8B.13$$

per opportune funzioni $G(y, x)$ e y_k (k è la molteplicità dell'autovalore zero di B). In particolare, se $B = 0$ si ha che

$$M(S)(x, x') = \pm \frac{1}{\sqrt{\det A^{-1}}} \delta(x - Ax') e^{\frac{i}{2\hbar}(x', Ax)} \quad 8B.14$$

Utilizzando (8B.14) si può confrontare il nucleo integrale di $M(S)$, $S = (S_1, S_2)$, con quello del prodotto $M(S_1)M(S_2)$; assumiamo che B_1 e B_2 siano invertibili. Indicando con N_+ (N_-) il numero di autovalori positivi (negativi) della matrice simmetrica $B_1^{-1} B B_2^{-1}$ si ottiene

$$\beta = \beta_1 + \beta_2 + (N_+ - N_-) \frac{\pi}{4}. \quad 8B.15$$

Con la notazione $\beta = \nu\pi$, $\nu = \pm 1$, si vede che (8B.15) assume la forma

$$4 + N\pi + 2\nu\pi = (4\beta + N\pi + 2\nu_1\pi) + (4\beta + N\pi + 2\nu_2\pi) + 2\pi(\nu - \nu_1 - \nu_2 - N_-) \quad 8B.16$$

e quindi, definendo

$$\beta(S) \equiv \beta + \frac{N\pi}{4} + \frac{\nu\pi}{2} \quad 8B.17$$

si ha

$$\beta(S_1 S_2) = \beta(S_1)\beta(S_2) + n\pi, \quad n \in Z. \quad 8B.18$$

Questo dimostra che il gruppo metaplettico ricopre due sole volte il gruppo simplettico. Ad ogni matrice simplettica S corrispondono due operatori metaplettici $M(s, \sigma)$, $\sigma = \pm 1$.

Una proprietà fondamentale degli operatori metaplettici, che risulta immediatamente dalla loro definizione, è la legge di trasformazione per il sistema di Weyl

$$M^*(S)W(z)M(S) = W(S^{-1}z). \quad 8B.19$$

Facendo uso di questa relazione, è possibile introdurre un nuovo gruppo di operatori, il gruppo metaplettico inhomogeneo. I suoi elementi possono essere rappresentati con operatori della forma

$$M(z, \gamma, S) \equiv e^{i\gamma\hbar}W(z)M(S) \equiv e^{i\gamma\hbar}M(S)W(S^{-1}z)$$

con legge di composizione

$$M(z_1, \gamma_1, S_1)M(z_2, \gamma_2, S_2) = M(z_1 + S_1z_2, \gamma_1 + \gamma_2 + \frac{1}{2}\omega(z_1, S_1z_2), S_1S_2) \quad 8B.20$$

Si tratta pertanto del prodotto semidiretto del gruppo metaplettico con il gruppo di Weyl, che è generato da $e^{it\hat{q}}$, $e^{it\hat{p}}$. Questo gruppo viene chiamato anche *gruppo di Heisenberg*.

APPENDICE 8C: MOTI PERIODICI. REGOLE DI QUANTIZZAZIONE SEMICLASSICHE

In quest'appendice tratteremo brevemente la descrizione semi-classica della dinamica quantistica di sistemi il cui analogo classico presenta orbite con punti di inversione del moto, in particolare orbite periodiche. Diamo alcuni dettagli di un'applicazione del metodo WKB (alcuni autori lo chiamano – in questo contesto – metodo JWKB, aggiungendo il nome di Jeffreys, che introdusse un metodo simile nel 1923). Noi seguiremo in parte l'articolo di rassegna [BM72], e il libro [FF65], testi a cui rimandiamo per un'analisi più completa. Notiamo che una trattazione rigorosa per una ristretta classe di potenziali è contenuta in [Bir33]. Descriveremo anche elementi della quantizzazione di sistemi completamente integrabili, e l'origine semi-classica delle regole di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld. Una trattazione esauriente è al di fuori dello scopo di questa Appendice. Per approfondimenti si può vedere [Kel58]. Nel contesto degli integrali oscillanti e delle varietà lagrangiane il metodo WKB e l'indice di Maslov vengono trattati in [Dui74].

Consideriamo inizialmente sistemi con un grado di libertà. L'equazione di Schrödinger (stazionaria) che consideriamo è

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2}{\hbar^2}(E - V(x))\phi = 0, \quad x \in R.$$

Cerchiamo una soluzione della forma

$$\phi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}S(x)}.$$

Otteniamo

$$\frac{dS^2}{dx} - i\hbar S''(x) = 2m(E - V(x)). \quad 8C.1$$

Negli intervalli in cui $(E - V(x)) > 0$ si può cercare di approssimare la soluzione per \hbar piccolo con una soluzione di $\frac{dS^2}{dx} = 2m(E - V(x))$,

$$S = \pm \int_a^x \sqrt{2m(E - V(y))} dy = \pm \int_a^x p(y) dy, \quad p(y) \equiv \frac{\partial S}{\partial y}.$$

dove la scelta di a corrisponde a una scelta di costante additiva per la soluzione S . L'approssimazione è valida se nello stato ϕ considerato si ha

$$\hbar(\phi, |S''|\phi) = \hbar(\phi, \frac{\partial p}{\partial x}, \phi) \ll (\phi, p^2\phi).$$

Questo determina la possibilità di utilizzare in metodo WKB. Sviluppando formalmente in serie di potenze in \hbar la soluzione di (8C.1) otteniamo per i termini di ordine zero e uno

$$S_0(x) = \pm \int_a^x \sqrt{2m(E - V(y))} dy,$$

$$S_1(x) = i \log \sqrt{S'_0} + C$$

e quindi a quest'ordine di approssimazione

$$\phi(x) = C(S'_0(x))^{-1} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_a^x \sqrt{2m(E - V(y))} dy} \quad 8C.2$$

dove C è un fattore di normalizzazione.

Assumiamo che il potenziale $V(x)$ sia di classe C^2 , con $V(0) = E$. Se per b , $\delta > 0$ si ha $V(x) > E + \delta$ quando $x > b$ e $V(x) < E - \delta$ quando $x < -b$, l'approssimazione WKB è giustificata per $|x| > b$ quando $b \gg \hbar$.

L'equazione ha due soluzioni indipendenti limitate da un polinomio per $x < -b$, ed una soluzione a quadrato sommabile $x > b$.

Se b è dello stesso ordine di grandezza di \hbar , la condizione WKB non è soddisfatta nell'intervallo $|x| < b$, quindi la soluzione non ha la forma approssimata (8C.2).

Per ciascun valore di E l'equazione (8C.4) ammette due soluzioni limitate in $-b < x < b$. Per ottenere un'autofunzione dell'operatore di Schrödinger è necessario *raccordare* le soluzioni trovate.

Nel metodo WKB il raccordo viene determinato dallo studio del comportamento asintotico per $\hbar \rightarrow 0$ della soluzione di un'equazione di confronto. Questo permette di costruire *formule di connessione*.

In generale la ricerca di *un'equazione di confronto* viene fatta mediante un cambiamento di coordinate $x \rightarrow y = y(x)$ (la funzione $y(x)$ viene chiamata mapping function).

Con la trasformazione di coordinate $x = \hbar y$ l'equazione di Schrödinger stazionaria per energia E si scrive

$$\frac{d^2}{dy^2}\psi(y) + v(y)\psi(y) = 0, \quad v(y) = E - V(\hbar y)$$

e si cerca la soluzione per confronto con un'equazione più semplice,

$$\frac{d^2}{dz^2}\phi(z) + w(z)\psi(z) = 0. \quad 8C.3$$

Mediante un cambiamento di variabili $y \rightarrow z$ la funzione $\psi(y)$ può essere scritta (almeno formalmente e localmente) $\psi(y) = \frac{dz}{dy}^{-\frac{1}{2}}\phi(z(y))$. In questo caso si vede che la trasformazione di coordinate (*mapping function*) risulta essere la soluzione di

$$z(y) = w(z)\frac{dz^2}{dy^2} - \left(\frac{dz}{dy}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{d^2}{dy^2}\left[\left(\frac{dz}{dy}\right)^{-\frac{1}{2}}\right].$$

Nel caso di potenziali nei quali il moto classico con energia E ha un solo punto di inversione (che assumiamo essere l'origine) una buona approssimazione viene ottenuta ponendo $w(z) = -z$; in questo caso l'equazione di confronto è l'equazione di Airy, ovvero

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + y\psi(y) = 0.$$

La trasformazione di coordinate è data da

$$z^{\frac{3}{2}} = \frac{3}{2} \int_0^y \left(\frac{V(\hbar y') - E}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} dy'$$

e la soluzione approssimata dell'equazione di Schrödinger è

$$\phi(y) = \left[\frac{z^2(y)}{E - V(\hbar y)}\right]^{\frac{1}{4}} [\alpha Ai_1(z(y)) + \beta Ai_2(z(y))] \quad 8C.4$$

dove α, β sono costanti che vengono determinate dalle condizioni all'infinito, mentre $Ai_{1,2}$ sono le due soluzioni indipendenti dell'equazione di Airy.

La condizione al bordo che interessa è quella per cui la soluzione è limitata da un polinomio (e quindi in un intorno di E la misura spettrale di H è assolutamente continua e ha molteplicità uno). Le due funzioni di Airy ammettono una stessa estensione analitica al piano complesso di cui sono noti i coefficienti dello sviluppo in serie della variabile $z \in C$. Questo permette di determinare esplicitamente formule esatte di connessione [Hea62]. Inoltre può essere determinato esplicitamente il loro comportamento asintotico per $y \rightarrow \pm\infty$; entrambe oscillano, con una differenza di fase asintotica di $\frac{\pi}{4}$. La funzione Ai_1 converge esponenzialmente per $y \rightarrow \infty$, Ai_2 diverge esponenzialmente.

Per ogni μ il comportamento asintotico delle funzioni di Airy (indichiamo con \rightarrow e \leftarrow i limiti $x \rightarrow -\infty$ e $x \rightarrow \infty$) è

$$\frac{\cos(|w| - \frac{1}{4} + \mu)}{(V - E)^{\frac{1}{4}}} \leftarrow \cos \mu Ai_1(\sigma) + \sin \mu Ai_2(\sigma) \rightarrow \frac{\cos \mu e^{-|w|}}{2(V - E)^{\frac{1}{4}}} + \frac{\sin \mu e^{|w|}}{(V - E)^{\frac{1}{4}}} \quad 8C.5$$

dove abbiamo posto

$$w = \int_0^x \left[\frac{(E - V(y))}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}} dy, \quad \sigma = \left(\frac{3}{2} w \right)^{\frac{2}{3}}.$$

Si noti che nelle ipotesi fatte sul potenziale l'operatore di Schrödinger ha spettro continuo di molteplicità uno in un intorno di E e quindi esiste una e una sola soluzione generalizzata corrispondente all'energia E .

Nel caso di due punti di inversione (come avviene in una dimensione per orbite chiuse) l'approssimazione WKB è meno accurata. Il potenziale più semplice di confronto in questo caso è un potenziale parabolico e l'equazione di confronto diventa

$$\frac{d^2}{dz^2} \phi + (t - z^2) \phi = 0$$

che contiene un parametro t che dipende dall'energia considerata. Per questo potenziale (che corrisponde ad una hamiltoniana quadratica), indicando con x_{\pm} i punti di riflessione del moto classico e definendo t mediante

$$\frac{t\pi}{2} = \int_{x_-}^{x_+} \frac{\sqrt{E - V(x)}}{\hbar} dx \equiv S(x_-, x_+) \quad 8C.6$$

la trasformazione di coordinate $x \rightarrow y$ è data implicitamente da

$$S(x_+, x) = \hbar \int_{-\sqrt{t}}^{y(x)} (t - z^2)^{\frac{1}{2}} dz. \quad 8C.7$$

Due soluzioni linearmente indipendenti sono le funzioni paraboliche $D_{t-\frac{1}{2}}(\pm y\sqrt{2})$ [WW46] in cui comportamento asintotico è noto e può essere dato in termini di serie convergenti.

Noi non diamo qui la forma esplicita dell'approssimazione [BM72, WW46]; notiamo solamente che gli stati legati corrispondono ad energie in cui le soluzioni nelle regioni esterne hanno un andamento esponenziale decrescente e all'interno è possibile raccordare in modo due volte differenziabile le soluzioni che hanno questa proprietà. Questo fornisce i valori permessi per lo spettro (lo spettro discreto non è vuoto perché $V(x) - E$ è negativo in quest'intervallo).

Nel caso del potenziale quadratico (oscillatore armonico) la condizione di esistenza di un autovalore coincide con la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld.

La procedura che abbiamo descritto può portare in casi semplici a determinare se E_0 sia un'autovalore dell'operatore di Schrödinger, ma non può essere una regola sistematica per ottenere lo spettro puntuale nel limite semiclassico.

Per questo sarebbe più conveniente notare che lo spettro puntuale di un operatore è costituito dai poli della sua risolvente. Si può cercare quindi di ottenere una espressione della risolvente in termini di un integrale su traiettorie classiche che presenta oscillazione sempre più marcate quando $\hbar \rightarrow 0$, per utilizzare poi il teorema della fase stazionaria per dimostrare che il contributo principale all'integrale viene da traiettorie classiche chiuse con energia data dalle regole di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld, con una correzione dovuta alla presenza di caustiche nella descrizione delle traiettorie nello spazio delle configurazioni. Queste correzioni sono legate quindi all'indice di Maslov.

Questo programma presenta notevoli difficoltà.

Denotiamo con Γ_1 la classe di funzioni assolutamente continue. L'azione classica

$$S(t, s; x, y) = \int_s^t L(\tau, x(\tau), \frac{dx(\tau)}{d\tau}) d\tau \quad 8C.8$$

è, se $t - s$ è sufficientemente piccolo (dipendentemente da x e y), stazionaria sulle orbite classiche (soluzioni delle equazione di Lagrange con estremi x e y che appartengono al Γ_1) ed è la generatrice della trasformazione canonica che definisce il moto nello spazio delle fasi.

Si può dimostrare ([20] ovvero [Mor51, Fuj80]) che se il potenziale V (che può dipendere dal tempo) è sufficientemente regolare, il propagatore (soluzione fondamentale) $U(t, s)$ soddisfa la seguente relazione, valida per ogni funzione $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$

$$U(t, s)\phi(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \lim_{\delta \rightarrow 0} I(\delta; t, s; x, y)\phi(y) dy \quad 8C.9$$

dove il limite è inteso nel senso delle distribuzioni e la funzione integranda è data da

$$I(\delta; t, s; x, y) = \left\{ \prod_{j=1}^{N-1} \left[\frac{-i}{2\pi(t_j - t_{j-1})^{\frac{d}{2}}} \right] \right\} \cdot \int_{\mathbb{R}^d} dx_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^d} dx_{N-1} \prod_{j=1}^{N-1} \left\{ a(t_j, t_{j-1}; x_j, x_{j-1}) e^{-iS(t_j, t_{j-1}; x_j, x_{j-1})} \right\}, \quad 8C.10$$

rispetto ad una partizione $[t_{j-1}, t_j] \subset [s, t]$ in intervalli uguali $t_j - t_{j-1} = \delta = (t - s)/N$ e $t_0 = s$, $t_N = t$, mentre la funzione a è definita da

$$a(t_j, t_{j-1}; x_j, x_{j-1}) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_s^t (\tau - s) \Delta_x \omega(\tau, s; x(\tau), y) d\tau \right\}$$

con ω tale che

$$S(t, s; x, y) = \frac{1}{2} \frac{|x - y|^2}{t - s} + (t - s) \omega(t, s; x, y)$$

(questa definizione deriva dall'aver utilizzato il teorema della fase stazionaria con valutazione di termini residui).

Notare che in ciascun intervallo l'azione S è l'integrale della lagrangiana lungo la traiettoria classica. L'equazione (8C.9) è stata utilizzato da K.Yajima per studiare il limite semiclassico degli operatori d'onda (vedere cap. 17).

Se esistesse una misura limite di $\prod_{j=1}^{N-1} dx_j$ quando $N \rightarrow \infty$ potremmo quindi esprimere il nucleo integrale $e^{itH}(x, y)$ come integrale su opportuni cammini. Ma tale misura limite non esiste (la misura di Lebesgue su R^d non è una misura di probabilità) e pertanto risulta puramente formale l'espressione

$$e^{-itH}(x, y) = C \int_{\Gamma} e^{i \int_{\gamma} L((x(t)), \dot{x}(x, t)) dt} \quad 8C.11$$

(dove C è una costante di normalizzazione che, utilizzando (8C.10), risulterebbe infinita).

Se fosse applicabile al caso dell'interazione Coulombiana, la (8C.10) darebbe nel limite semi-classico la regola di quantizzazione proposta da Einstein – Brillouin – Keller (E.B.K.) per sistemi il cui analogo classico è completamente integrabile, in particolare ammette una descrizione mediante variabili azione-angolo.

Ricordiamo che la quantizzazione E.B.K. corrisponde alla prescrizione

$$E(k_1, \dots, k_n) = H(\pi\hbar(k_1 + \frac{\alpha_1}{4}), \dots, \pi\hbar(k_n + \frac{\alpha_n}{4}))$$

dove n è il numero di gradi di libertà del sistema, $\{E(k_1, \dots, k_n)\}$ è l'insieme degli autovalori, $H(I_1, \dots, I_N)$ è la hamiltoniana classica espressa in variabili azione-angolo (I_k sono le variabili d'azione) e si considerano solamente regione limitate dello spazio della fasi. I numeri α_k sono gli indici di Maslov, e contano quante riflessioni vi sono state dell'angolo θ_k in un periodo (si considerano solamente orbite periodiche).

Per un oscillatore armonico unidimensionale si ha $\alpha = 2$. Nel caso dell'oscillatore armonico bidimensionale, utilizzando coordinate angolari, si ha $\alpha_1 = 2$, $\alpha_2 = 0$ (il moto angolare non ha punti di inversione). Per sistemi unidimensionali queste regole di quantizzazione si riducono alla regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld. Per una descrizione del metodo E.B.K. ed un'analisi della sua validità si può vedere [Kel58].

Un ingegnoso procedimento per costruire un'espressione semiclassica della risolvente e dell'operatore di propagazione e quindi giungere ad una giustificazione *formale* delle regole di quantizzazione E.K.B. si può trovare in [BM72]. Rimandiamo a quest'articolo molto interessante per una trattazione dettagliata. Esso

consiste nello scambiare in (8C.9) l'ordine in cui si valutano i limiti $N \rightarrow \infty$ e $\hbar \rightarrow 0$, utilizzando prima i teoremi di fase stazionaria e poi restringendo a zero l'intervallo temporale.

In questo modo si ottiene (si veda [Gut67]) per il nucleo della risolvente $(H - E)^{-1}(x, y)$ l'espressione semiclassica

$$(H - E)^{-1}(x, y)_{\text{semicl}} = \frac{2\pi\hbar^{\frac{(d-1)}{2}}}{i\hbar} \sum_r |\pi\Delta_{x,y;r} S_{x,y;r}(E)|^{\frac{1}{2}} H_{\frac{1}{2}d-1}^1 \left(\frac{S_{x,y;r}}{\hbar} - \frac{M_r\pi}{2} \right) \quad 8C.12$$

dove la somma è su tutte le orbite classiche chiuse di energia E che congiungono x con y , mentre M_r è il relativo indice di Maslov. H^1 è la prima funzione di Hankel e $S_r(x, y, E)$ è l'integrale d'azione lungo la r^{ma} orbita di energia E .

La funzione $\Delta_{x,y;r}$ dipende dal cammino ed è data da

$$\Delta_{x,y} = -\frac{\partial^2 S_{x,y}(E)^{1-\frac{1}{d}}}{\partial E^2} \det \left[\frac{\partial^2 S}{dE^2} \frac{\partial S}{\partial x_i \partial y_j} - \frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial E} \frac{\partial^2 S}{\partial y_j \partial E} \right] \quad 8C.13$$

Quest'espressione si semplifica in dimensione uno per hamiltoniane classiche. Nel caso di dimensione uno si possono dedurre, con ulteriori approssimazioni, le regole di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld, e nel caso di sistemi totalmente integrabili scritti in variabili azione-angolo le relazioni di quantizzazione E.K.B. Nel caso unidimensionale con $H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ si ha

$$S_{x_1, x_2}(E) = 2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - V(x))} dx, \quad \Delta = \frac{m}{2(E - V(x))}$$

e risulta

$$n(E) = \frac{1}{\pi\hbar} \sum_{r=-\infty}^{\infty} \cos\left(\frac{rS(E)}{\hbar}\right) \int_{x_1}^{x_2} dx \left[\frac{m}{2(E - V(x))} \right]^{\frac{1}{2}} = \sum_0^{\infty} \delta(E - E_n)$$

con E_n tale che $S(E_n)(2n+1)\pi\hbar$, coerentemente alla quantizzazione di Bohr-Sommerfeld.

L'espressione semiclassica è utilizzata più frequentemente per dedurre formule euristiche approssimate per la densità degli stati legati E_n , utilizzando la formula (di traccia) per la densità

$$n(E) = \sum_n \delta(E - E_n) = -\frac{1}{\pi} \mathfrak{Im} \int dx (H - E)_+^{-1}(x, x), \quad x \in R^d$$

dove $(H - E)_+^{-1}(x, y)$ è il limite del nucleo integrale dell'operatore $(H - z)^{-1}$ per $\mathfrak{Im} z \rightarrow 0_+$.

Se H è positivo si può utilizzare l'espressione della risolvente ottenuta dal nucleo integrale del semigruppato e^{tH} scritto come integrale sui cammini browniani,

come vedremo nel cap. 14, ma questo fa perdere la connessione con il limite semiclassico.

Un'interessante deduzione della formula semiclassica di traccia di Gutzwiller² è stata data più recentemente in [CRR99], utilizzando una decomposizione della funzione d'onda in stati coerenti. Abbiamo visto in questo capitolo che gli stati coerenti ben localizzati si muovono secondo traiettorie classiche. Il procedimento seguito da questi autori è quindi naturale, almeno per operatori di Schrödinger del tipo $H = -\Delta + V$, e semplifica trattazioni precedenti. Esso fa uso di stime semiclassiche per stati coerenti unito ad un controllo uniforme per l'integrazione sugli stati coerenti.

Non ci soffermiamo in dettaglio su questo metodo, che viene molto chiaramente esposto in [CRR99]; notiamo solo che viene data una formula semiclassica per le densità di stati regolarizzate, e non una stima precisa del numero di autovalori contenuti in intervallo dell'asse reale. Sotto ipotesi relativamente poco restrittive sul potenziale V e nel caso di hamiltoniane con spettro puramente puntuale le densità regolarizzate sono definite da

$$\rho(E) = \sum_{1 \leq j \leq N} g\left(\frac{E - E_j}{\hbar}\right) \xi^2(E_j)$$

dove $E_1 \leq \dots \leq E_N$ sono gli autovalori di H nell'intervallo $]E - \delta E, E + \delta E[$ e ξ è una funzione liscia il cui supporto è contenuto in $]E - \delta E, E + \delta E[$.

La funzione g è una funzione C^∞ la cui trasformata di Fourier ha supporto in $[-T, T]$.

Di queste densità regolarizzate viene dato uno sviluppo asintotico ad ogni ordine in \hbar , in termini degli integrali d'azione lungo soluzioni periodiche sulla varietà $H_{class} = E$ di periodo minore o uguale a T , e dell'indice di Maslov associato a queste traiettorie (che quindi conta approssimativamente i punti di inversione del moto lungo le traiettorie). Viene utilizzato il fatto che gli stati coerenti ben localizzati seguono traiettorie classiche, e che la loro evoluzione quantistica risulta ben descritta da hamiltoniane quadratiche, analogamente alle dinamiche classiche corrispondenti date da trasformazioni (lineari) simplettiche.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

[BM72] M.Berry, K.Mount, Rep. Progress in Physics 35 (1972) 315-397.

[Bir33] B.Birkhoff, Bull. Am.Math.Soc. 39, 8 (1933) 61-79.

²Contributi importanti all'analisi del problema sono stati dati da Albeverio, Brezniak, Boutet de Monvel.

- [CRR99] M.Combescure, J.Ralston, D.Robert, *Comm. Math. Phys.* 202 (1999) 463-480.
- [Dui74] J.J.Duistermatt, *Comm.Pure Applied Math.* 27 (1974) 207-281.
- [Eva98] L.Evans, *P.D.E.*, Graduate Studies in Mathematics 19, AMS (1998, 2002 - reprinted).
- [Fed99] M.Fedoryuk, *P.D.E. - Encyclopedia of Mathematical Sciences* 34, Springer (1999).
- [FF65] N.Frohman, P.O.Frohman, *JWKB approximation*, North-Holland (1965).
- [Fuj80] D.Fujiwara, *Duke Math. Journal* 47 (1980) 559-600.
- [Gut67] M. Gutzwiller, *J.Math.Phys.* 8 (1967) 1979-2000.
- [Hag85] G.Hagedorn, *Ann. Inst. H.Poincaré* 42 (1985) 363-374.
- [Hea62] J.Heading, *An Introduction to Phase-integral methods*, Methuen (1962).
- [Hor67] L.Hormander, *Proc. Symp. Pure and Applied Mathematics* 10 (1967) 138-183.
- [Kel58] J.Keller, *Ann.Phys.* 4 (1958) 180-188.
- [Lax67] P.Lax, *Duke Mathematical Journal* 24 (1967) 627-651.
- [Mor51] C.Morette, *Phys. Rev.* 81 (1951) 848-852.
- [WW46] E.Wittaker, G.Watson, *A Course of Modern Analysis*, Cambridge Univ. Press (1946).

CAPITOLO 9
 ESTENSIONI AUTOAGGIUNTE. METODO DI KREIN. INTERAZIONI
 PUNTUALI. TRIPLE DI BORDO

Abbiamo visto nel cap. 6 che la condizione che un operatore su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} sia simmetrico non è sufficiente affinché esso sia il generatore di un gruppo ad un parametro di operatori unitari e quindi di una dinamica. Diamo in questo capitolo alcuni elementi di un procedimento che in alcuni casi permette di costruire dinamiche estendendo il dominio dell'operatore e costruendo così un operatore autoaggiunto.

Sia A un operatore chiuso, simmetrico e densamente definito su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} . Definiamo

$$\mathcal{K}_+ \equiv \ker(A^* - iI), \quad \mathcal{K}_- \equiv \ker(A^* + iI), \quad 9.1$$

$$m_+ \equiv \dim \mathcal{K}_+, \quad m_- \equiv \dim \mathcal{K}_-. \quad 9.2$$

Definizione 9.1

Gli interi m_{\pm} vengono detti *indici di difetto* dell'operatore simmetrico A e \mathcal{K}_{\pm} sono i suoi *sottospazi di difetto*. ◇

Dalla definizione di operatore autoaggiunto si vede che A è autoaggiunto se e solo se $m_+ = m_- = 0$.

Esempio 1

Sia $A = i \frac{d}{dx}$ su $L^2(0, 1)$ con dominio composto dalle funzioni assolutamente continue in $[0, 1]$ e nulle agli estremi. Notiamo che per queste funzioni la derivata distribuzionale è un elemento di $L^2(0, 1)$.

Dalla definizione di aggiunto, utilizzando un'integrazione per parti, è facile verificare che il dominio dell'operatore A^* è composto dalle funzioni assolutamente continue in $[0, 1]$ e su questo dominio l'operatore coincide (a parte il fattore numerico i) con la derivata distribuzionale. Notiamo che i termini che si otterrebbero per integrazione per parti si annullano per le ipotesi sul dominio di A . Quindi A^* estende A . In questo caso

$$\mathcal{K}_{\pm} = \{\lambda e^{\pm x}, \lambda \in C\}, \quad m_{\pm} = 1.$$

Ne segue che A non è autoaggiunto.

Conviene ancora notare che A^* non è un operatore simmetrico. Infatti se $f, g \in D(A^*)$ si ha

$$\begin{aligned} (A^* f, g) &= \int_0^1 -i \frac{d\bar{f}(x)}{dx} g(x) dx \\ &= -i(\bar{f}(1)g(1) - \bar{f}(0)g(0)) + \int_0^1 i\bar{f}(x) \frac{dg(x)}{dx} dx = (f, A^* g). \end{aligned}$$

9.3

Poiché i termini di bordo non sono continui in f nella topologia di $L^2(0,1)$, il dominio di $(A^*)^*$ è composto dalle funzioni assolutamente continue che si annullano in 0 e in 1 (e quindi $(A^*)^*$ coincide con A). Dunque

$$D((A^*)^*) \subset D(A^*)$$

con inclusione stretta.

Come si vede, in questo caso i domini di A e di A^* differiscono solo per le condizioni al bordo. Questo è tipico per gli operatori di Schrödinger definiti su un insieme aperto Ω .

♣

Esempio 2

Sia $A = i \frac{d}{dx}$ con dominio le funzioni su R^+ , assolutamente continue, a supporto compatto e nulle all'origine. In questo caso si ha

$$\mathcal{K}_+ = \{0\}, \quad \mathcal{K}_- = \{\lambda e^{-x}, \lambda \in C\}, \quad m_+ = 0, \quad m_- = 1. \quad 9.4$$

Anche qui l'operatore A^* è dato da $i \frac{d}{dx}$ definito su funzioni in $L^2(R^+)$ e assolutamente continue, senza limitazioni sul valore che assumono all'origine; quindi A^* estende A .

Integrando per parti, si vede che gli eventuali termini al bordo non sono continui nella topologia di $L^2(R^+)$; quindi $(A^*)^*$ è l'operatore $i \frac{d}{dx}$ definito sulle funzioni in $L^2(R^+)$ assolutamente continue, che valgono zero all'origine. Dunque $(A^*)^*$ coincide con la chiusura di A .

♣

Esempio 3

Sia $A = \frac{d^2}{dx^2}$ definito sulle funzioni in $L^2(R^+)$ di classe C^∞ , nulle in un intorno dell'origine e a supporto compatto.

Non è difficile verificare che in questo caso

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_+ &= \{\lambda e^{\frac{(i-1)x}{\sqrt{2}}}, \lambda \in C\}, \quad m_+ = 1, \\ \mathcal{K}_- &= \{\lambda e^{-\frac{(i+1)x}{\sqrt{2}}}, \lambda \in C\}, \quad m_- = 1. \end{aligned} \quad 9.5$$

Anche in questo caso, $D(A) \subset D(A^*)$ e $(A^*)^* = \bar{A}$.

Il dominio di A^* è costituito dalle funzioni su R^+ che sono a quadrato sommabile insieme alle loro derivate prime e seconde (mentre il dominio della chiusura di A è costituito dalle funzioni che sono a quadrato sommabile insieme alle loro derivate prime e seconde e che si annullano, insieme alle loro derivate prime, nell'origine).



Gli esempi dati di operatori differenziali suggeriscono la strategia per determinare le condizioni sotto le quali un operatore chiuso e simmetrico ammette un'estensione autoaggiunta, intendendosi con questo che esiste un operatore autoaggiunto A_1 con dominio $D(A_1) \supset D(A)$ e tale che su $D(A)$ si abbia $A_1 = A$.

Poiché in ogni caso $D(A_1) \subset D(A^*)$, l'operatore A_1 appare anche come una restrizione di A^* . Se A_1 è autoaggiunto si deve avere $D(A_1) = D(A_1^*)$ e quindi A_1 deve essere un'estensione massimale di A (o equivalentemente una restrizione minimale di A^*).

In questo capitolo daremo una classificazione di tutte (quando esistono) le estensioni autoaggiunte di un operatore simmetrico A .

A questo fine diamo una struttura topologica conveniente al prodotto $D(A^*) \times \mathcal{H}$. Questo ci permetterà di costruire forme quadratiche σ_A (antisimmetriche) in analogia con le strutture simplettiche sullo spazio della fasi, e definire l'analogo di varietà Lagrangiane.

La restrizione del grafico di A^* ad una varietà Lagrangiana (se una tale varietà esiste) fornirà un'estensione di A a un operatore autoaggiunto.

Consideriamo il grafico di A^*

$$\Gamma(A^*) \equiv \{ \{ \phi, A^* \phi \}, \quad \phi \in D(A^*) \} . \quad 9.6$$

Per definizione, essendo A^* un operatore chiuso (abbiamo supposto che A sia definito densamente in \mathcal{H}), il grafico di A^* è un sottoinsieme chiuso di $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$. La chiusura è intesa nella norma del grafico, che è definita da

$$\| \{ \phi, A^* \phi \} \|^2 \equiv \| \phi \|^2 + \| A^* \phi \|^2 . \quad 9.7$$

Considereremo sempre $\Gamma(A^*)$ come uno spazio normato con norma (9.7).

Definiamo su $\Gamma(A^*)$ una struttura Hilbertiana mediante il prodotto scalare

$$\langle \tilde{\phi}, \tilde{\psi} \rangle \equiv (\phi, \psi) + (A^* \phi, A^* \psi) . \quad 9.8$$

Indichiamo con $\tilde{\mathcal{H}}$ lo spazio di Hilbert così ottenuto, e denotiamo con $\tilde{\phi} \in \tilde{\mathcal{H}}$ l'elemento $\tilde{\phi} \equiv \{ \phi, A^* \phi \}$. Introduciamo in $\tilde{\mathcal{H}}$ la forma antisimmetrica

$$\sigma_A(\tilde{\phi}, \tilde{\psi}) \equiv (\phi, A^* \psi) - (A^* \phi, \psi) \quad 9.9$$

e diciamo che il sottospazio $\mathcal{K} \subset D(A^*)$ è A -simmetrico se

$$\sigma_A(\tilde{\psi}, \tilde{\phi}) = 0 \quad \forall \phi, \psi \in \mathcal{K}$$

(in altre parole se A^* ristretto a \mathcal{K} è un operatore simmetrico). Notiamo esplicitamente che $\sigma_A(\tilde{\phi}, \tilde{\psi}) = 0$ se $\phi, \psi \in D(A)$.

Denotiamo con $\tilde{\mathcal{K}}$ il sottospazio di \mathcal{H} definito da

$$\tilde{\mathcal{K}} \equiv \{\{\phi, A^*\phi\}, \quad \phi \in \mathcal{K}\}. \quad 9.10$$

Il sottospazio $\tilde{\mathcal{K}}$ è un sottospazio chiuso di $\Gamma(A^*)$; la forma antisimmetrica $\sigma(A)$ (chiusa e continua nella topologia di $\Gamma(A^*)$) è degenera su questo sottospazio. Indichiamo con $\Gamma(A)^\perp$ il complemento ortogonale di $\Gamma(A)$ in $\Gamma(A^*)$ (considerato nella sua struttura di spazio di Hilbert). Notiamo che l'estensione di A ad A^* avviene solo in questo sottospazio.

La forma antisimmetrica σ_A può essere degenera su $\Gamma(A)^\perp$. Se σ_A viene interpretata come struttura simplettica, un sottospazio chiuso A -simmetrico di $\Gamma(A)^\perp$ viene in modo naturale interpretato come varietà isotropica. Se è un sottospazio A -simmetrico massimale, si tratterà di una varietà Lagrangiana.

Con queste notazioni, vale il Teorema

Teorema 9.1 (Riesz-Nagy)

Le estensioni chiuse e simmetriche dell'operatore A sono in corrispondenza biunivoca con i sottospazi A -simmetrici di $\Gamma(A)^\perp$.

In particolare, A è autoaggiunto se e solo $\Gamma(A)^\perp = \{0\}$.

◇

Non dimostreremo qui questo teorema (vedere ad esempio [RN90]) ma analizzeremo la struttura dei sottospazi A -simmetrici, e daremo un'utile caratterizzazione (costruzione) delle estensioni autoaggiunte, qualora esistano.

Notiamo che il teorema implica che ogni estensione autoaggiunta A_1 definisce una sottovarietà Lagrangiana e un sottospazio A -simmetrico massimale. Infatti, essendo A_1 autoaggiunto e $D(A_1) \subset D(A^*)$, il sottospazio $\Gamma(A_1)$ è A -simmetrico ed è ovviamente contenuto in $\Gamma(A^*)$; se non fosse massimale, esisterebbe $\xi \notin D(A_1)$ per il quale varrebbe

$$(\phi, A^*\xi) = (A_1\phi, \xi), \quad \forall \phi \in D(A_1). \quad 9.11$$

Dunque si avrebbe $\xi \in D(A_1^*) = D(A_1)$, che è una contraddizione.

Per caratterizzare l'estensione autoaggiunta corrispondente a un sottospazio massimale, notiamo innanzitutto che, rispetto al prodotto scalare (9.8) definito mediante la norma del grafico, si ha la decomposizione ortogonale

$$\Gamma(A^*) = \Gamma(A) \oplus \Gamma_+ \oplus \Gamma_-, \quad 9.12$$

dove abbiamo posto

$$\Gamma_+ \equiv \{\phi, i\phi\}, \quad \phi \in \mathcal{K}_+, \quad \Gamma_- \equiv \{\phi, -i\phi\}, \quad \phi \in \mathcal{K}_-.$$

Per dimostrare la (9.12) iniziamo con dimostrare che $\Gamma(A) \perp \Gamma_+$.

Se $\tilde{\phi} = \{\phi, A\phi\} \in \Gamma(A)$, e $\tilde{\eta} = \{\eta, i\eta\} \in \Gamma_+$, si ha

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\phi}, \tilde{\eta} \rangle &= (\phi, \eta) + (A^*\phi, A^*\eta) = (\phi, \eta) + (A^*\phi, \eta) \\ &= (\phi, \eta) + i(\phi, A^*\eta) = (\phi, \eta) - (\phi, \eta) = 0. \end{aligned}$$

9.13

Analogamente si dimostra $\Gamma(A) \perp \Gamma_-$.

Per completare la dimostrazione dobbiamo dimostrare che se $\tilde{\phi}$ è ortogonale (in $\Gamma(A^*)$) a $\Gamma(A)$ e anche a Γ_{\pm} , allora ϕ è nullo.

Notiamo che se $\phi \in D(A)$, e $\langle \tilde{\phi}, \tilde{\psi} \rangle = 0$, allora vale

$$(\phi, \psi) + (A^*\phi, \psi) = 0. \quad 9.14$$

Ne segue che $A\phi \in D(A^*)$ e che $(A^*)^*\phi = -\phi$. Ma allora $(A^* + i)(A^* - i)\phi = 0$ e quindi $(A^* - i)\phi \in \mathcal{K}_-$. D'altra parte, per $\xi \in \mathcal{K}_-$ si ha $i(\xi, (A^* - i)\phi) = (\xi, \phi) = 0$. Dunque $(A^* - i)\phi \in \mathcal{K}_- \cap \mathcal{K}_-^{\perp} = \{0\}$ e ne segue $\phi \in \mathcal{K}_+$. Ma per ipotesi ϕ non appartiene a \mathcal{K}_+ . Dunque $\tilde{\phi} = 0$, quindi $\phi = 0$ e la dimostrazione è completa.

Notiamo infine

$$\tilde{\xi} + \tilde{\eta} \in \Gamma_+ \oplus \Gamma_- \iff \|\xi\| = \|\eta\|. \quad 9.15$$

Infatti da $A^*\xi = i\xi$, e $A^*\eta = -i\eta$, segue

$$0 = (\xi + \eta, A^*(\xi + \eta)) - (A^*(\xi + \eta), \xi + \eta) = 2(\|\xi\|^2 - \|\eta\|^2) \quad 9.16$$

(abbiamo utilizzato il fatto che il sottospazio considerato è A -simmetrico). Ne concludiamo che i sottospazi A -simmetrici hanno la forma

$$\{\phi = \psi + \xi + \eta, \|\xi\| = \|\eta\|, \xi \in \mathcal{K}_+, \eta \in \mathcal{K}_-, \psi \in D(A)\}. \quad 9.17$$

Un sottospazio di questa forma non può essere massimale se $\dim \mathcal{K}_+ \neq \dim \mathcal{K}_-$.

Se

$$\phi_k = \psi_k + \xi_k + \eta_k, \quad k = 1, 2 \quad \psi \in D(A),$$

allora la due-forma antisimmetrica σ_A

$$\sigma_A(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2) = i[(\xi_1, \eta_2) - (\xi_2, \eta_1)] \quad 9.18$$

non è degenera solo se $\dim \mathcal{K}_+ = \dim \mathcal{K}_-$. Abbiamo dunque dimostrato

Teorema 9.2

Sia A chiuso e simmetrico. Le sue estensioni chiuse e simmetriche sono in corrispondenza biunivoca con le isometrie parziali tra \mathcal{K}_+ e \mathcal{K}_- .

◇

Sia $m_+ \geq m_-$. Indichiamo con V un'isometria parziale di \mathcal{K}_+ in \mathcal{K}_- . Il dominio dell'estensione corrispondente, che indicheremo con A_V , è

$$D(A_V) = \{\psi + \xi + V\xi, \quad \psi \in D(A), \quad \xi \in I_V\}, \quad 9.19$$

dove I_V è il dominio dell'isometria parziale V . Su questo dominio si ha

$$A_V \phi = A\psi + i\xi - iV\xi \quad 9.20$$

Se $m_- \geq m_+$, il ruolo di \mathcal{K}_+ e di \mathcal{K}_- è invertito.

L'operatore A ha estensioni autoaggiunte se e solo se $m_+(A) = m_-(A)$. In questo caso l'isometria V è una corrispondenza isometrica invertibile; quindi le estensioni autoaggiunte sono in corrispondenza biunivoca con le trasformazioni unitarie (isometriche invertibili) da \mathcal{K}_+ a \mathcal{K}_- . Il dominio e l'azione dell'estensione corrispondente all'isometria V sono date in (9.19) e (9.20). \diamond

Nota 9.1

L'estensione che indichiamo con A_V è stata ottenuta aggiungendo alla chiusura del dominio di A il sottospazio di dimensione m_+ costituito dai vettori della forma $\xi + V\xi$, con $\xi \in \mathcal{K}_+$, e l'immagine di questi vettori attraverso A^* è $i(\xi - V\xi)$. \clubsuit

Ricordiamo che tutti gli spazi di Hilbert separabili che hanno la stessa dimensione (eventualmente infinita) sono tra loro isomorfi. Se si fa un'identificazione (ad esempio scegliendo in ciascuno spazio una base ortonormale completa), l'isomorfismo è rappresentato da un operatore unitario U . Poiché la scelta dell'identificazione è arbitraria, questo operatore è definito a meno di moltiplicazione (a destra o a sinistra) per un arbitrario operatore unitario.

Dunque si ha, indicando con I l'identità nello spazio \mathcal{K}_+ ,

$$A_U(I + U) = i(I - U)$$

o equivalentemente

$$A_U = i(I - U)(I + U)^{-1}. \quad 9.21$$

Questa parametrizzazione è detta *parametrizzazione di Krein*.

L'identificazione dipende dalla base scelta e non è legittima (ovvero è singolare) se per la scelta fatta l'operatore unitario U ha ± 1 come autovalore.

In generale non esistono criteri per la scelta delle basi e quindi della matrice unitaria U . Nel caso di operatori differenziali del secondo ordine a coefficienti reali, notiamo che se una funzione f appartiene a \mathcal{K}_+ , la sua complessa coniugata appartiene a \mathcal{K}_- (questo non è vero per operatori differenziali del primo ordine, perché l'operatore simmetrico $i \frac{d}{dx}$ non lascia invariante l'insieme delle funzioni a valori reale).

In questo caso esiste un'identificazione naturale prendendo basi ortonormali complete della forma $\{\xi_k(x)\}$ per \mathcal{K}_+ e $\{\bar{\xi}_k(x)\}$ per \mathcal{K}_- .

Indicando con J l'operatore antiunitario che estende questa corrispondenza tra le basi a una corrispondenza tra \mathcal{K}_+ e \mathcal{K}_- , l'isometria V può essere scritta nella forma $V = UJ$ con U operatore unitario in \mathcal{K}_+ .

Si può altresì utilizzare una base $\mathcal{K}_+ \oplus \mathcal{K}_-$ reale rispetto a V

$$W_k^+ = \frac{1}{2}(\xi_k + V\xi_k), \quad W_k^- = -\frac{i}{2}(\xi_k - V^*\xi_k). \quad 9.22$$

In questa base si ha

$$A_V W_k^\pm = W_k^\mp$$

e inoltre

$$\begin{aligned} (W_h^\pm, W_k^\pm) &= \pm((A_V + 1)^{-1}\phi_h, \phi_k) + \frac{1}{2}\delta_{h,k} \pm \frac{1}{2}\delta_{h,k}, \\ (W_h^\pm, W_k^\mp) &= -((A_V + 1)^{-1}A_V\phi_h, \phi_k). \end{aligned} \quad 9.23$$

Notando che si ha

$$u = \phi + \sum_{k=1}^m (c_k^+(u)W_k^+ + c_k^-(u)W_k^-), \quad \phi \in D(A),$$

si ottiene, per $u, v \in D(A^*)$,

$$(A_V u, v) - (u, A_V v) = \sum_{k=1}^m (c_k^-(u)c_k^+(v) - c_k^+(u)c_k^-(v)) \equiv (\xi(u), J\xi(v)), \quad 9.24$$

dove J è una matrice simplettica.

In questo modo gli spazi di difetto assumono la struttura di uno spazio simplettico standard. Tutte le altre estensioni autoaggiunte sono ottenute mediante trasformazioni lineari simplettiche.

In molti casi questa struttura simplettica appare in modo naturale. Ad esempio, nel caso dell'operatore

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V\right)u \equiv A_0 u, \quad u \in C_0^\infty(\mathbb{R}^+), \quad 9.25$$

si ha

$$(A_0^* u, v) - (u, A_0^* v) = (u'(0), v(0)) - (u(0), v'(0)).$$

Con queste notazioni, la relazione tra le risolventi A_V e A_W , corrispondenti a due estensioni ottenute attraverso diversi operatori V e W isometrici invertibili

da \mathcal{K}_+ a \mathcal{K}_- , è data esplicitamente, per $\Im \lambda \neq 0$, scegliendo la base adattata a V data da (9.22), dall'espressione

$$(A_W - \lambda)^{-1} - (A_V - \lambda)^{-1} = \frac{A_V + \lambda I}{A_V - \lambda I} P \left(Q - P \frac{1 + \lambda A_V}{A_V - \lambda} P \right)^{-1} P \frac{A_W + \lambda I}{A_W - \lambda I}, \quad 9.26$$

dove

$$Q \equiv \sum_{k,h} \phi_k \Gamma_{k,h}(\cdot, \phi_h),$$

mentre P è il proiettore ortogonale sullo spazio H_i (relativo all'autovalore $+i$ di A_V) e Γ è la matrice definita da

$$\psi = \phi + \Gamma \xi_+ + \xi_-. \quad 9.27$$

Questa relazione, di cui non daremo la dimostrazione, venne ottenuta in [Kre44] nel caso di indici di difetto $\{1, 1\}$ e poi estesa dallo stesso autore ad indici di difetto finiti (e uguali) [Kre46]. Diamo alcuni esempi di estensioni autoaggiunte ottenute mediante la teoria di Krein.

Esempio 4

$$A = -\frac{d^2}{dx^2}, \quad D(A) = \left\{ \phi, \frac{d\phi}{dx} \in AC[0, \pi], \quad \phi(0) = \phi(\pi) = \frac{d\phi}{dx}(0) = \frac{d\phi}{dx}(\pi) = 0 \right\}.$$

Gli spazi di difetto \mathcal{K}_+ e \mathcal{K}_- sono entrambi di dimensione (complessa) 2. Lo spazio \mathcal{K}_+ è sotteso dalle soluzioni distribuzionali di

$$-\frac{d^2}{dx^2} \phi_+(x) = i \phi_+(x)$$

in $L^2(0, \pi)$, cioè dalle funzioni

$$\phi_+^\pm(x) = e^{\pm \frac{i-1}{\sqrt{2}} x}.$$

Analogamente lo spazio \mathcal{K}_- è sotteso dalla funzione

$$\phi_-^\pm = e^{\pm \frac{i+1}{\sqrt{2}} x}.$$

Le isometrie tra \mathcal{K}_+ e \mathcal{K}_- sono pertanto parametrizzate da matrici 2×2 unitarie U . Queste matrici danno due relazioni lineari tra le quattro quantità

$$a_1 \equiv \phi(0), \quad a_2 \equiv \phi(\pi), \quad b_1 \equiv \frac{d\phi}{dx}(0), \quad b_2 \equiv \frac{d\phi}{dx}(\pi). \quad 9.33$$

La relazione ha la forma

$$Ma + Nb = 0, \quad a = \{a_1, a_2\}, \quad b \equiv \{b_1, b_2\},$$

dove M e N sono matrici 2×2 tali che la matrice 4×2 ottenuta accostando M e N sia di rango massimo.

Queste relazioni vengono dette *locali* se coinvolgono una relazione solamente tra le coppie $\phi(0), \frac{d\phi}{dx}(0)$ e tra le coppie $\phi(\pi), \frac{d\phi}{dx}(\pi)$.



Nota 9.2

A questa struttura può essere anche ricondotto il caso di interazioni in R^1 collocate in N punti y_1, \dots, y_N ; quando $N = \infty$, casi particolarmente interessanti sono dati da $y_{n+1} - y_n = c$ (reticolo periodico) e $y_{i+1} - y_i$ realizzazione i^{ma} di una variabile casuale la cui distribuzione è uniforme nell'intervallo $[0, 1]$ (in questo caso i centri di interazione sono distribuiti secondo una legge casuale). Il primo caso corrisponde al modello di Kronig-Penney di un cristallo unidimensionale, e dà un operatore autoaggiunto con uno spettro assolutamente continuo costituito da bande; il secondo è stato il primo esempio di equazione di Schrödinger con potenziale casuale studiato a fondo, e dà un operatore autoaggiunto il cui spettro è totalmente puntuale.



Va notato che, indipendentemente dalla scelta delle condizioni al bordo, tutte le estensioni autoaggiunte che abbiamo descritto corrispondono a operatori che sono locali nel senso comunemente dato a questo termine nel caso di operatori differenziali: un operatore A è detto locale se per ogni $\phi \in D(A)$ il supporto della funzione $A\phi$ non è più esteso del supporto della funzione ϕ .

Nota 9.3

È facile generalizzare gli esempi 3 e 4 al caso dell'operatore $-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ con $V(x)$ una funzione continua nell'origine e limitata (utilizzando stime che discuteremo nel cap. 10 è anche possibile scegliere la funzione V in $L^2(R)$ e continua nell'origine).



Consideriamo più in dettaglio le estensioni autoaggiunte dell'operatore $\frac{d^2}{dx^2}$ definito sulle funzioni di classe $C^2(0, 2\pi)$ che soddisfano una delle seguenti tre condizioni:

i) *condizioni di Dirichlet:*

$$\phi(0) = \phi(2\pi) = 0, \quad 9.34$$

ii) *condizioni di Neumann:*

$$\phi'(0) = \phi'(2\pi) = 0, \quad 9.35$$

con $\phi' = d\phi/dx$;

iii) *condizioni di periodicità:*

$$\phi(0) = \phi(2\pi), \quad \phi'(0) = \phi'(2\pi). \quad 9.36$$

Iniziamo con le condizioni di periodicità (9.36). Indichiamo con $-\Delta_P$ il corrispondente operatore autoaggiunto.

Consideriamo l'operatore che agisce sulle funzioni periodiche di periodo 2π e due volte differenziabili con derivata seconda a quadrato sommabile. Le sue autofunzioni sono le soluzioni periodiche di

$$-\frac{d^2}{dx^2}f = \lambda f.$$

La condizione di periodicità implica che $\lambda = 0, 1, 4, \dots, n^2, \dots$ e le soluzioni sono quindi

$$\psi_P^n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{inx}, \quad n \in N. \quad 9.37$$

Queste funzioni costituiscono una base ortonormale completa in $L^2(0, 2\pi)$. Ne segue che l'operatore descritto dalle condizioni di periodicità è diagonale nella rappresentazione di Fourier, e quindi è autoaggiunto. Il suo spettro è costituito dal quadrato dei numeri naturali, compreso lo zero.

L'operatore considerato è il quadrato dell'operatore autoaggiunto definito da $i \frac{d}{dx}$ con condizioni periodiche al bordo.

La molteplicità dello spettro è due, per i numeri interi non nulli (le autofunzioni $\{e^{inx}\}$ ed $\{e^{-inx}\}$ corrispondono entrambe all'autovalore n^2) mentre l'autovalore 0 è semplice.

Consideriamo ora le condizioni di Dirichlet (9.34). Denoteremo il corrispondente operatore con il simbolo $-\Delta_D$.

Le condizioni al bordo sono soddisfatte da

$$\psi_D^n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin\left(\frac{nx}{2}\right).$$

Gli autovalori corrispondenti sono dati $\lambda = \frac{n^2}{4}$, $n = 1, 2, 3, \dots$, e hanno molteplicità uno. Questo corrisponde al fatto che $-\Delta_D$ non è il quadrato di un operatore autoaggiunto. Nel dominio di $-\Delta_D$ stanno tutte (e sole) le funzioni che possono essere scritte nella forma

$$\phi(x) = \sum_k c_k \psi_D^k, \quad \sum_k |k|^4 |c_k|^2 < \infty. \quad 9.38$$

Dalla teoria delle serie di Fourier segue che il dominio di Δ_D è costituito dalle funzioni che hanno valore zero in 0 e 2π e la cui derivata seconda sia a quadrato sommabile in $(0, 2\pi)$.

Consideriamo infine le condizioni di Neumann (9.35). Denoteremo il corrispondente operatore con il simbolo $-\Delta_N$.

Le condizioni al bordo sono soddisfatte da

$$\psi_N^n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos\left(\frac{nx}{2}\right).$$

Gli autovalori corrispondenti sono dati da $\lambda = \frac{n^2}{4}$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, e hanno molteplicità uno. Ciò corrisponde al fatto che Δ_N non è il quadrato di un operatore autoaggiunto. Nel dominio di Δ_N stanno tutte (e sole) le funzioni che possono essere scritte nella forma

$$\phi(x) = \sum_k c_k \psi_N^k, \quad \sum_k k^4 |c_k|^2 < \infty.$$

Dalla teoria delle serie di Fourier segue il dominio di Δ_N è costituito dalle funzioni a quadrato sommabile in $(0, 2\pi)$ la cui derivata seconda sia a quadrato sommabile e la cui derivata prima abbia valore zero al bordo.

Nota 9.4

È interessante notare che le autofunzioni dell'operatore Δ_D non appartengono al dominio dell'operatore Δ_N (e viceversa) sebbene i due operatori abbiano un dominio denso comune (le funzioni due volte differenziabili a supporto strettamente contenuto in $(0, 2\pi)$).

Sebbene gli operatori $-\Delta_N$ e $-\Delta_D$ non siano il quadrato di un operatore autoaggiunto, esiste una relazione tra ciascuno di questi operatori e l'operatore (non autoaggiunto) ∂ definito come $i\frac{d}{dx}$ sulle funzioni assolutamente continue che si annullano in 0 e 2π .

Notiamo che l'aggiunto ∂^* è per costruzione l'operatore $i\frac{d}{dx}$ con dominio di definizione le funzioni assolutamente continue in $[0, 2\pi]$.

Consideriamo l'operatore $\partial^*\partial$. Il suo dominio di definizione sono le funzioni due volte differenziabili che si annullano in 0 e 2π e con derivata prima in $L^2[0, 2\pi]$ (perché per essere nel dominio la funzione f deve appartenere al dominio di ∂ , e ∂f deve appartenere al dominio di ∂^* e quindi deve avere la derivata prima in $L^2[0, 2\pi]$). Su queste funzioni $\partial^*\partial$ agisce come $-\frac{d^2}{dx^2}$; ne segue che $\partial^*\partial \equiv -\Delta_D$. Procedendo in modo analogo, si verifica che $\partial\partial^* \equiv -\Delta_N$. Vedremo nel seguito che questo risultato è un caso particolare della seguente affermazione:

Se A è un operatore chiuso, densamente definito (non necessariamente simmetrico), l'operatore A^*A , definito sugli elementi del dominio di A la cui immagine sotto l'azione di A sta nel dominio di A^* , è sempre un operatore autoaggiunto.



Gli esempi 3 e 4 possono essere generalizzati senza difficoltà al caso dell'operatore $-\frac{d^2}{dx^2} + V$ definito sull'unione disgiunta di N intervalli $[0, a_n]$, $n = 1, \dots, N$ (per qualche valore dell'indice n si può anche avere $a_n = +\infty$).

A questo esempio può essere ricondotto lo studio dell'operatore di Schrödinger unidimensionale su un grafico metrico (in modo da poter definire l'operatore $\frac{d}{dx}$). Le condizioni al bordo vengono poste ai vertici del grafico, e possono essere *locali* quando per ciascun vertice v vengono date delle relazioni lineari che si riferiscono esclusivamente ai limiti al vertice v delle soluzioni e delle loro derivate direzionali, non locali altrimenti.

Come nel caso dell'intervallo è necessario porre delle restrizioni a queste relazioni lineari. Per esempio, il caso di un grafico di un solo vertice e due raggi semifiniti che ne originano è, dal punto di vista delle estensioni autoaggiunte, equivalente a una retta, i due raggi essendo R^+ e R^- .

In questo caso si considera un operatore differenziale del second'ordine ellittico (ad esempio $-\frac{d^2}{dx^2}$) definito sulle funzioni C^∞ che si annullano in un intorno dell'origine, e le condizioni che descrivono un'estensione autoaggiunta sono del tipo $A\tilde{\phi}(0) + B(\partial\tilde{\phi})(0) = 0$ dove A e B sono matrici 2×2 e abbiamo posto

$$\tilde{\phi}(0) = \left\{ \lim_{x \rightarrow 0_-} \phi(x), \lim_{x \rightarrow 0_+} \phi(x) \right\}, \quad \partial\tilde{\phi}(0) = \left\{ \lim_{x \rightarrow 0_-} \phi'(x), \lim_{x \rightarrow 0_+} \phi'(x) \right\}.$$

Per ottenere un'estensione autoaggiunta è necessario che la matrice 2×4 ottenuta affiancando le matrici A e B sia di rango massimo (cioè due); è facile vedere che questa è condizione necessaria e sufficiente affinché sia non-degenere la forma simplettica che si ottiene al bordo mediante la costruzione dei sottospazi di difetto.

In generale, un grafico finito (o localmente finito) è una quadrupla

$$\mathcal{G} = \{\mathcal{V}, \mathcal{I}, \mathcal{E}, \partial\}, \quad 9.39$$

dove \mathcal{V} è un insieme finito di *vertici* (o localmente finito se il grafico viene visto come immerso in uno spazio ambiente, ad esempio in R^3), \mathcal{I} è un insieme finito di *segmenti orientati* che dividiamo in due classi, i *segmenti interni* \mathcal{I} che hanno lunghezza finita e i *segmenti esterni* \mathcal{E} che sono isomorfi a semirette. Assumeremo sempre che il numero di vertici sia localmente finito.

L'applicazione ∂ assegna a ciascun segmento interno i una coppia ordinata di vertici $\partial(i) = \{v_1, v_2\}$ (alcuni vertici possono coincidere; in questo caso il grafico presenta dei *lacci*).

Chiameremo v_1 *vertice iniziale* del segmento i , e v_2 *vertice finale*. Indicheremo con $\partial(e)$ il vertice al finito del segmento semi-infinito e .

Un grafico è *compatto* se non ha segmenti esterni. Assumeremo sempre che il grafico sia connesso.

Il grado di un vertice v è per definizione il numero di segmenti incidenti nel vertice; un segmento che abbia uno stesso vertice come vertice iniziale e anche finale (un laccio) va contato due volte.

Consideriamo il grafico come *grafico metrico*. Con questo intendiamo l'associare ad ogni segmento interno i un intervallo $[0, a_i]$, $a_i > 0$, dell'asse reale (con la

convenzione che il vertice iniziale del segmento i coincide con 0 e il vertice finale coincide con a_i) e ad ogni segmento esterno e la semiretta $[0, \infty)$ (con la convenzione che il vertice coincide con l'origine).

Questa struttura astratta è per grafici finiti realizzabile – in virtù di un teorema di Whitney – in uno spazio Euclideo di dimensione sufficientemente grande (dipendente dal numero dei vertici e dalle connessioni tra i vertici) ma non necessariamente in R^3 .

Per visualizzare nello spazio la struttura del grafico (e quindi per le applicazioni a grafici che vengono utilizzati come modelli semplificati di nano-strutture fisiche) è conveniente restringere l'attenzione a particolari grafici.

Dato un grafico metrico, consideriamo lo spazio di Hilbert

$$\mathcal{H}(\mathcal{G}) = \mathcal{H}_{\mathcal{E}} \oplus \mathcal{H}_{\mathcal{I}}, \quad \mathcal{H}_{\mathcal{E}} = \bigoplus_{e \in \mathcal{E}} \mathcal{H}_e, \quad \mathcal{H}_{\mathcal{I}} = \bigoplus_{i \in \mathcal{I}} \mathcal{H}_i, \quad 9.40$$

dove abbiamo posto $\mathcal{H}_i = L^2(I_i)$ con $I_i = [0, a_i]$ per un segmento finito e $I_i = [0, \infty)$ per un segmento semifinito.

Consideriamo l'operatore Δ_0 ,

$$(\Delta_0 \phi)(x) = \frac{d^2 \phi}{dx^2}, \quad x \in I_i, \quad i \in \mathcal{I} \cup \mathcal{E}, \quad 9.41$$

con dominio le funzioni che in ciascun segmento sono due volte differenziabili e nulle in un intorno dei vertici. È facile vedere che Δ_0 è un operatore simmetrico con indici difetto $m_{\pm} = |\mathcal{I}| + |\mathcal{E}|$.

Per studiare le sue estensioni autoaggiunte introduciamo uno spazio di Hilbert ausiliario (di dimensione finita se il grafico è finito)

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}_{\mathcal{E}} \oplus \mathcal{K}_{\mathcal{I}}^- \oplus \mathcal{K}_{\mathcal{I}}^+,$$

che interpreteremo come spazio dei valori al bordo delle funzioni nella chiusura del dominio di Δ_0 . Avremo

$$\mathcal{K}_{\mathcal{E}} \equiv C^{|\mathcal{E}|}, \quad \mathcal{K}_{\mathcal{I}}^{\pm} \equiv C^{|\mathcal{I}|}.$$

Visto che le estensioni autoaggiunte saranno classificate da applicazioni lineari di \mathcal{K} in sé, conviene introdurre anche lo spazio $\mathcal{K} \oplus \mathcal{K}$ in cui queste applicazioni avranno la struttura di forme simplettiche [Nov99, KS99].

Indichiamo con $\mathcal{J} \subset \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ un sottoinsieme dei segmenti, e consideriamo nel prodotto cartesiano $\otimes_{j \in \mathcal{J}} I_j$ una funzione ϕ

$$\phi(x) \equiv \{\phi_j(x_j), j \in \mathcal{J}\}. \quad 9.42$$

Se $\phi \in D \equiv \bigoplus_{j \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} D_j$, poniamo

$$\psi \oplus \psi' \in \mathcal{K} \oplus \mathcal{K},$$

dove ψ è il vettore

$$\psi \equiv \{\phi_{\mathcal{E}}(0), \phi_{\mathcal{I}}(0), \phi_{\mathcal{I}}(a_i)\} \quad 9.43$$

e ψ' è il vettore

$$\psi' \equiv \{\phi'_{\mathcal{E}}(0), \phi'_{\mathcal{I}}(0), -\phi'_{\mathcal{I}}(a_i)\} \quad 9.44$$

(l'apice indica ancora una volta la derivata prima nella direzione del vertice). Siano A e B applicazioni lineari di \mathcal{K} in sé. Indichiamo con $\{A, B\}$ l'applicazione lineare da $\mathcal{K} \oplus \mathcal{K}$ a \mathcal{K} definita da

$$\{A, B\}(\xi_1 \oplus \xi_2) = A\xi_1 + B\xi_2.$$

Definiamo $\mathcal{M}(A, B) \equiv \ker \{A, B\}$.

Un'analisi simile a quella fatta negli esempi 3, 4 mostra che le condizioni al bordo date dall'annullarsi dell'applicazione $\{A, B\}$ forniscono un'estensione massimale simmetrica (quindi autoaggiunta) dell'operatore Δ_0 . Infatti questa condizione coincide con la condizione che l'applicazione trasposta $\{A, B\}^t$ abbia rango massimo (eguale a $|\mathcal{E}| + 2|\mathcal{I}|$).

Le applicazioni $\{A, B\}$ e $\{A', B'\}$ danno luogo alla stessa estensione autoaggiunta se e solo se esiste un'applicazione invertibile $C : \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}$ tale che sia $A = CA$, $B' = CB$.

Le estensioni ottenute si dicono *locali* se $\ker \{A, B\} = \oplus_v \{\mathcal{M}_v\}$, dove \mathcal{M}_v è il nucleo di un'applicazione costruita considerando separatamente i vertici (non vi sono relazioni tra valori al bordo in vertici diversi della funzione e delle sue derivate direzionali).

È facile vedere che, considerando questi valori ai vertici come variabili simpletiche, le varie condizioni lineari al bordo individuano varietà Lagrangiane e sono connesse tra loro da trasformazioni lineari simpletiche.

Se il grafico è finito, lo spettro singolare continuo è assente e lo spettro assolutamente continuo coincide con l'asse reale positivo se almeno uno dei segmenti ha lunghezza infinita.

Nota 9.5

Gli esempi che abbiamo dato finora riguardano gli operatori $i\frac{d}{dx}$ oppure $\frac{d^2}{dx^2}$ (eventualmente modificati mediante l'aggiunta di una potenziale) su una collezione di intervalli dell'asse reale, limitati o semilimitati.

Con ovvie modificazioni si possono trattare anche le estensioni autoaggiunte dell'operatore di Laplace-Beltrami definito su una collezione di segmenti di curva regolare nello spazio.

In tutti questi casi il bordo dell'insieme considerato è costituito da punti; abbiamo visto che in questo caso, se la collezione di segmenti è finita, la dimensione dei sottospazi di difetto è finita e le condizioni al bordo che qualificano l'estensione autoaggiunta considerata (con il suo dominio) coinvolgono i valori delle funzioni e della loro derivata al bordo.



Un generalizzazione naturale in dimensioni maggiori consiste nel considerare operatori ellittici definiti all'interno di un dominio regolare $\Omega \subset R^d$, $d \geq 2$ con bordo regolare $\partial\Omega$.

In questo caso ci aspettiamo che i sottospazi di difetto abbiano dimensione infinita e siano in qualche modo in corrispondenza con due insiemi di funzioni (di classe opportuna) definite sul bordo $\partial\Omega$; un insieme *rappresenta* il limite al bordo $\partial\Omega$ delle funzioni nel dominio di Δ^* , mentre l'altro insieme *rappresenta* il limite al bordo delle derivate normali.

Questo è ad esempio il caso dei potenziale di strato semplice o doppio in elettrostatica (potenziale di carica o di dipolo).

Le proprietà dello spazio di Sobolev $H^2(\Omega)$ permettono di concludere che ogni funzione in $H^2(\Omega)$ ha come valore al bordo $\partial\Omega$ un funzione di classe di Sobolev $H^{\frac{3}{2}}(\partial\Omega)$ (gli spazi di Sobolev del bordo sono definiti mediante l'operatore di Laplace-Beltrami del bordo) e che la sua derivata normale può essere rappresentata da una funzione di classe di Sobolev $H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$.

In questo caso le condizioni al bordo di Dirichlet corrispondono all'azzerarsi della funzione sul bordo, le condizioni di Neumann corrispondono all'azzerarsi della derivata normale, mentre condizioni intermedie (condizioni di Robin) corrispondono a relazioni lineari tra i valori al bordo della funzione e quelli della sua derivata normale, e sono in generale rappresentate da un nucleo integrale su $\partial\Omega$. Diamo alcuni dettagli di quest'esempio.

Vogliamo dunque classificare le estensioni autoaggiunte dell'operatore A definito come $\Delta_0 \equiv \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ sulle funzioni due volte differenziabili con derivata seconda a quadrato integrabile e con supporto strettamente contenuto in un dominio aperto limitato $\Omega \subset R^d$, con frontiera una superficie regolare $\partial\Omega$ di classe C^2 . Per una trattazione più estesa degli spazi di Sobolev su $\partial\Omega$ e dei problemi al bordo per equazioni ellittiche si può vedere [LM72].

Denotiamo con $H^m(\Omega)$ lo spazio di Sobolev delle funzioni a quadrato integrabile con tutte le loro derivate (distribuzionali) di ordine minore o uguale a m . Denotiamo con $H^s(\partial\Omega)$, $s \in R$, il completamento delle funzioni C^∞ su $\partial\Omega$ rispetto al prodotto scalare

$$(f, g)_{H^s(\partial\Omega)} \equiv (f, (-\Delta_{L.B.} + 1)^s g)_{L^2(\partial\Omega)} \quad 9.45$$

dove $\Delta_{L.B.}(\partial\Omega)$ è l'operatore di Laplace-Beltrami su $\partial\Omega$ (visto come varietà Riemanniana compatta).

Utilizziamo il fatto (cfr. [LM72]) che $(-\Delta_{L.B.} + 1)^{\frac{s}{2}}$ definisce per ogni scelta di r e di s un'applicazione *unitaria*

$$(-\Delta_{L.B.} + 1)^{\frac{s}{2}} : H^r(\partial\Omega) \rightarrow H^{r-s}(\partial\Omega).$$

Indichiamo con γ_j l'operatore lineare suriettivo

$$\gamma_j : H^2(\Omega) \rightarrow H^{2-j-1/2}(\partial\Omega), \quad j = 0, 1$$

definito come estensione limitata di

$$\hat{\gamma}_j \equiv \frac{\partial^j \phi}{\partial n}, \quad D(\hat{\gamma}_j) = C^\infty(\Omega),$$

dove abbiamo indicato con $n(x)$ il vettore normale a $\partial\Omega$ nel punto $x \in \partial\Omega$ rivolto verso l'interno di Ω . Nella costruzione delle estensioni autoaggiunte del Laplaciano in Ω interverranno i due operatori

$$\rho \equiv \gamma_0 : H^2(\Omega) \rightarrow H^{\frac{3}{2}}(\partial\Omega) \quad 9.46$$

(operatore di valutazione o di *traccia al bordo*) e

$$\tau \equiv \gamma_1 : H^2(\Omega) \rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega) \quad 9.47$$

(operatore *derivata normale*).

Indichiamo con A il Laplaciano definito sulle funzioni di classe $C^2(\Omega)$ nulle in un intorno di $\partial\Omega$. Introduciamo anche l'operatore simmetrico chiuso Δ_{min} estensione di A con dominio le funzioni che *si annullano al bordo insieme alla loro derivata normale*

$$D(\Delta_{min}) \equiv \{\phi \in H^2(\Omega) : \rho\phi = \tau\phi = 0\},$$

e il suo aggiunto Δ_{max} con dominio

$$D(\Delta_{max}) \equiv \{\phi \in H^2(\Omega) : \Delta\phi \in L^2(\Omega)\}.$$

In queste notazioni il Laplaciano con condizioni di Dirichlet al bordo di $\partial\Omega$, che noi indicheremo con Δ_D , è dato dalla condizione sul suo dominio

$$D(\Delta_D) \equiv \{\phi \in D(\Delta_{max}) : \hat{\rho}\phi = 0\} \equiv \{\phi \in H^2(\Omega) : \rho\phi = 0\} \quad 9.48$$

e il Laplaciano con condizioni di Neumann Δ_N è dato dalle condizioni al bordo

$$D(\Delta_N) \equiv \{\phi \in D(\Delta_{max}) : \hat{\tau}\phi = 0\} \equiv \{\phi \in H^2(\Omega) : \tau\phi = 0\}, \quad 9.49$$

dove $\hat{\rho}$ e $\hat{\tau}$ sono estensioni di ρ e τ al dominio di Δ_{max} .

Nota 9.6

Le funzioni di Green di queste estensioni sono note nella letteratura fisica, soprattutto nei testi di elettrostatica, come potenziali di strato semplice (cariche di bordo) e di strato doppio (distribuzioni di dipolo di bordo).



Consideriamo l'operatore Λ

$$\Lambda \equiv (-\Delta_{L.B.} + 1)^{\frac{1}{2}} : H^s(\partial\Omega) \rightarrow H^{s-1}(\partial\Omega)$$

e definiamo G_0 mediante

$$\langle G_0 u, \phi \rangle_{L^2(\Omega)} = - \langle \Lambda u, \tau(\Delta_D)^{-1} \phi \rangle_{L^2(\partial\Omega)}, \quad \forall u \in H^1(\partial\Omega).$$

Ne segue che $G_0 = K\Lambda$, dove $K : H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega) \rightarrow D(\Delta_{max})$ è l'operatore (detto operatore di Poisson) che risolve il problema

$$\Delta(Ku) = 0, \quad \hat{\rho}(Ku) = u, \quad \forall u \in H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega). \quad 9.50$$

Introduciamo anche l'operatore $G_z = G_0 - z(-\Delta_D + z)^{-1}G_0$ che risolve il problema

$$\Delta G_z u = z G_z u, \quad \hat{\rho} G_z u = \Lambda u, \quad u \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega) \quad 9.51$$

e l'operatore $P \equiv \hat{\tau}K$, un operatore lineare continuo da $H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ a $H^{-\frac{3}{2}}(\partial\Omega)$ detto anche operatore Dirichlet-Neumann (*Neumann-Dirichlet map*) nel senso che fa corrispondere alla traccia sul bordo (dato di Dirichlet) la derivata normale al bordo (dato di Neumann).

Per mezzo di questi operatori si può costruire un operatore Γ_z che è utilizzato per descrivere le estensioni autoaggiunte dell'operatore A (la restrizione di $-\Delta_{min}$ alle funzioni due volte differenziabili e con supporto contenuto in Ω).

Le risolventi di tutte le estensioni autoaggiunte di A sono classificate da una coppia $\{\Pi, \Theta\}$, dove Π è una proiezione ortogonale in $\mathcal{K} \equiv H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$ e Θ è un operatore autoaggiunto nello spazio di Hilbert dato da $\text{Ran}(\Pi\mathcal{K})$.

Indichiamo con $\Delta_{\Pi, \Theta}$ la corrispondente estensione, con dominio

$$D(\Delta_{\Pi, \Theta}) = \{\phi \in D(\Delta_{max}) : \Lambda^{-1} \hat{\rho} \phi \in D(\Theta), \quad \Pi \hat{\tau}_0 \phi = \Theta \Lambda^{-1} \hat{\rho} \phi\},$$

con $\hat{\tau}_0 \phi \equiv \tau \Delta_D^{-1} \Delta_{max} \phi = \hat{\tau} \phi - P \hat{\rho} \phi$. La risolvente di $\Delta_{\Pi, \Theta}$ può essere scritta nella forma, analoga alla formula di Krein (9.26)

$$(-\Delta_{\Pi, \Theta} + z)^{-1} = (-\Delta_D + z)^{-1} + G_z \Pi [\Theta + \Pi \tau (G_0 - G_z) \Pi]^{-1} \Pi G_z^*. \quad 9.52$$

Casi particolari sono gli operatori con condizioni di Dirichlet o di Neumann al bordo, e gli operatori relativi a condizioni di Robin al bordo, caratterizzate da operatori

$$B : H^{\frac{3}{2}}(\partial\Omega) \rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$$

che connettono la traccia in $x \in \partial\Omega$ della funzione con la traccia della sua derivata normale *nello stesso punto* x . Estensioni più generali si ottengono introducendo le connessioni attraverso nuclei integrali. Una dettagliata analisi di questo problema si può trovare in [Gru68, Pos08].



Nel caso di varietà Σ di codimensione due e tre, il valore al bordo di una funzione nel dominio del Laplaciano non è più definito in senso classico, e l'estensione

autoaggiunta viene parametrizzata dal confronto della parte singolare (su Σ) della funzione con la sua parte regolare (per analogia con il caso elettrostatico, indicheremo anche qui con il nome di *densità di carica* il coefficiente dalla parte più singolare).

La carica risulterà distribuita sulla varietà Σ (nel caso $d = 3$ e codimensione tre l'insieme Σ è composto da punti e le cariche sono attribuite ai punti).

Nota 9.7

Si può dimostrare che il Laplaciano Δ_0 definito in R^d , $d \geq 4$, sulle funzioni che si annullano in un intorno della varietà Σ di codimensione $d_1 \geq 4$ (ad esempio in un insieme discreto di punti se $d = 4$) è un operatore essenzialmente autoaggiunto, la sua chiusura in $L^2(R^d)$ è cioè un operatore autoaggiunto. Ciò è dovuto al fatto che la capacità (Newtoniana) dell'insieme Σ è nulla in questo caso.



Queste *condizioni al bordo in senso generalizzato* danno il nome a un procedimento alternativo (equivalente a quello di Krein) per costruire tutte le estensioni di un operatore simmetrico i cui spazi di difetto \mathcal{K}_\pm abbiano dimensioni uguali (eventualmente $+\infty$).

Per motivare la struttura di questo formalismo generale, detto delle *triple di bordo*, consideriamo il caso in cui l'operatore simmetrico A che analizziamo sia l'operatore di Laplace definito sulle funzioni di classe C_0^∞ su R^3 con supporto che esclude l'origine

$$A = \sum_{k=0}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}, \quad D(A) = C_0^\infty(R^3 \setminus \{0\}). \quad 9.53$$

Lo spazio \mathcal{K}_\pm è composto dalle soluzioni distribuzionali di

$$\Delta\psi = \pm i\psi \quad 9.54$$

che sono a quadrato sommabile in R^3 , cioè dallo spazio unidimensionale complesso generato dalla funzione di Green (del Laplaciano) che si annulla all'infinito

$$G(x) \equiv \frac{e^{-\sqrt{\pm i}|x|}}{4\pi|x|} \quad 9.55$$

(la determinazione della radice quadrata è scelta in modo tale che la funzione sia a quadrato sommabile). In questo esempio, essendo \mathcal{K}_\pm uno spazio complesso di dimensione uno, gli unitari che classificano le possibili estensioni autoaggiunte consistono in moltiplicazione per un fattore di fase $e^{i\beta}$, con $\beta \in R$. Scegliendo come base gli elementi di \mathcal{K}_\pm , il dominio dell'estensione autoaggiunta corrispondente a $e^{i\beta}$ è costituito dalle funzioni che appartengono a $L^2(R^3)$ e possono

essere scritte nella forma

$$\phi(x) = q[G_i(x) + e^{i\beta}G_i(x)] + \psi(x), \quad q \in C, \quad \psi \in H_{loc}^2(\mathbb{R}^3) \cap L^2(\mathbb{R}^3), \quad \psi(0) = 0. \quad 9.56$$

Scegliendo combinazioni lineari degli elementi di \mathcal{K}_\pm si può vedere che le funzioni nel dominio delle estensioni autoaggiunte hanno nell'intorno dell'origine la forma

$$\phi(x) = \frac{q}{2\pi|x|} + c + \psi_1(x), \quad \psi_1 \in C(\mathbb{R}^3), \quad \psi_1(0) = 0$$

e le estensioni autoaggiunte sono completamente determinate dalla relazione

$$\lim_{x \rightarrow 0} \left(\phi(x) - \frac{q}{2\pi|x|} \right) = \alpha q, \quad \alpha \equiv \frac{\cos \beta/2}{\cos \beta/2 + \sin \beta/2}. \quad 9.57$$

Le estensioni autoaggiunte sono quindi classificate dalle condizioni all'origine $\phi(0) = \alpha q$; il parametro α può assumere valore in $\dot{\mathbb{R}}$ (la compattificazione a un punto dell'asse reale). Indichiamo con H_α l'estensione corrispondente al valore α del parametro.

Per $\alpha = \infty$ la condizione è equivalente a $q = 0$; si tratta dell'operatore di Laplace con dominio $H^2(\mathbb{R}^3)$.

Per $\alpha = 0$ si ha un'estensione autoaggiunta con dominio le funzioni in $L^2(\mathbb{R}^3)$ della forma

$$\phi(x) = \frac{q}{|x|} + \psi(x), \quad \psi \in H_{loc}^2(\mathbb{R}^3) \cap L^2(\mathbb{R}^3), \quad \psi(0) = 0. \quad 9.58$$

Notiamo anche che tutte le estensioni autoaggiunte H_α soddisfano

$$\phi \in D(H_\alpha), \quad \phi(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad H_\alpha \phi = -\Delta \phi,$$

quindi coincidono con $-\Delta$ sul dominio comune.

Nel cap. 19 in cui discuteremo le forme quadratiche vedremo che le forme quadratiche associate alle varie estensioni autoaggiunte in questo caso hanno dominio comune ma sono diverse fra loro; quella che corrisponde ad $\alpha = \infty$ è la chiusura nella norma H^1 di $\int |\nabla \phi|^2 dx$ definito sulle funzioni a supporto compatto.

Le altre fanno intervenire esplicitamente il parametro α e sono tutte definite sull'insieme \mathcal{K} di funzioni in $L^2(\mathbb{R}^3)$ che possono essere scritte nella forma

$$\phi(x) = \frac{q}{|x|} + \psi(x), \quad \psi \in H_{loc}^1(\mathbb{R}^3) \cap L^2(\mathbb{R}^3). \quad 9.59$$

L'espressione esplicita della forma quadratica associata all'estensione H_α può essere ottenuta valutando

$$(\xi, H_\alpha \phi), \quad \phi \in D(H_\alpha), \quad \xi \in C_0^\infty$$

e integrando per parti. L'espressione così ottenuta, per $\phi \in D(H_\alpha)$, può essere estesa in ξ allo spazio \mathcal{K} , fornendo la forma quadratica limitata dal basso

$$Q_\alpha(\phi, \phi) = \alpha|q|^2 + \int_{R^3} |\nabla\phi|^2 dx.$$

Nota 9.8

L'interazione descritta in questo esempio viene spesso indicata come *interazione puntuale* localizzata nell'origine, o anche interazione di portata zero. Viene spesso utilizzata come approssimazione per trattare problemi in cui l'estensione della regione d'interazione è molto piccola relativamente a dimensioni caratteristiche del sistema; ad esempio venne utilizzata da E.Fermi nell'analisi della diffusione di neutroni lenti [Fer36].

Il nome *interazione puntuale* (o interazione di portata nulla) viene dal fatto che l'azione del nuovo operatore coincide con quella di $-\Delta$ su funzioni nulle in un intorno dell'origine: *se descrivesse una perturbazione ad una dinamica libera data mediante l'aggiunta di un potenziale*, questo potenziale dovrebbe aver supporto concentrato nell'origine.

Vale la pena notare che questa analogia è del tutto formale; in circostanze semplici il termine di ordine più basso significativo (in generale il termine del second'ordine) nella serie perturbativa (serie di Born) per la risolvente dà un risultato finito (e spesso coincidente con il risultato esatto) mentre i termini di ordine successivo portano a risultati divergenti.

Questo è dovuto al fatto (lo vedremo nel cap. 10), che non si può definire in R^3 un operatore che sia in qualche senso rappresentabile come $-\Delta + c\delta(x)$. Su uno spazio di dimensione uno si può definire l'operatore $-\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x)$ mediante la teoria delle forme quadratiche (il termine potenziale che si aggiunge è piccolo rispetto al Laplaciano nel senso delle forme quadratiche). Questo dà *alcune* delle estensioni autoaggiunte discusse nell'esempio 3.

Per una descrizione ampia del senso rigoroso delle interazioni a δ si rimanda a [AGH-KH88, AK00].



Nota 9.9

La costruzione che abbiamo fatto utilizzando la funzione di Green del Laplaciano può essere anche fatta utilizzando la funzione di Green dell'operatore $H_V \equiv -\Delta + V$ con V sufficientemente regolare, in modo che la sua funzione di Green abbia le stesse caratteristiche di singolarità della funzione di Green del Laplaciano. In questo caso la costruzione di tutte le estensioni autoaggiunte dell'operatore A_V , restrizioni di H_V alle funzioni di classe C_0^2 che si annullano in un intorno dell'origine, è del tutto analoga a quella descritta per il Laplaciano. Si può dimostrare che, se il potenziale V è continuo nell'origine e piccolo rispetto al Laplaciano, l'insieme delle estensioni autoaggiunte dell'operatore A_V coincide

con l'insieme degli operatori ottenuti come somma (operatoriale) di V con le estensioni dell'operatore ottenuto restringendo Δ a tali funzioni.

L'analisi che abbiamo fatto si può estendere in modo naturale a operatori alle derivate parziali ellittici a coefficienti di classe C^1 definiti su un dominio Ω a frontiera regolare $\partial\Omega$ in R^3 (o R^2)

$$\mathcal{L} \equiv \sum_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_i} A_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad A \geq cI, \quad c > 0. \quad 9.60$$

Le funzioni nel dominio di questi operatori sono la somma di una parte regolare al bordo e di una parte singolare che può essere scritta come integrale sul bordo di funzioni di Green. Le condizioni *al bordo* che qualificano l'estensione sono delle relazioni tra queste due parti delle funzioni nel dominio.



Nota 9.10

In R^3 le interazioni puntuali possono essere definite con la procedura indicata negli esempi precedenti anche nel caso di singolarità localizzate in N punti.

Indichiamo con Δ l'operatore di Laplace definito su tutto $H^2(R^3)$. In questo caso l'operatore simmetrico A è dato da

$$A : D(A) \subset L^2(R^3) \rightarrow L^2(R^3), \quad 9.61$$

il cui dominio $D(A)$ è l'insieme della funzioni che appartengono a $H^2(R^3)$ e che sono nulle in un intorno dei punti $\{x_k, k = 1, \dots, N\}$. Sul dominio $D(A)$ vale $A\phi = -\Delta\phi$.

Il dominio dell'aggiunto A^* è costituito da funzioni che sono la somma di una parte $\phi \in H_{loc}^2(R^3) \cap L^2(R^3)$ con una parte che è la somma $\sum_k q_k G_k^\lambda(x - x_k)$, con $q_k \in C$, delle funzioni di Green relative ai punti $x_k \in R^3$ (abbiamo indicato con G_k^λ la funzione di Green relativa al k^{mo} degli N punti considerati).

Notiamo che le funzioni $\psi \in H_{loc}^2(R^3)$ sono in particolare funzioni continue e che quindi resta definita la loro valutazione $\psi(x_k)$, $k = 1, \dots, N$.

Un calcolo elementare dimostra che in questo caso i due sottospazi di difetto hanno entrambi dimensione N e quindi le estensioni autoaggiunte sono parametrizzate da matrici $N \times N$ unitarie a valori complessi. Ciascuna di queste matrici individua una relazione lineare tra i valori assunti nei punti x_1, \dots, x_N dalle funzioni nel dominio della corrispondente estensione e i coefficienti delle parti singolari delle stesse funzioni in questi punti.

Nello scegliere la relazione tra parte singolare e parte regolare che individua una particolare estensione autoaggiunta (attraverso l'individuazione del suo dominio), bisogna prestare attenzione al fatto che la parte regolare nel punto x_k contiene non solo il termine $\psi(x_k)$, ma anche il termine

$$\sum_{i \neq k} q_i G_i^\lambda(x_k - x_i), \quad 9.62$$

dove q_h sono le cariche nei punti x_h (coefficienti del termine singolare). ♣

Nota 9.11

L'esempio precedente può essere generalizzato al caso in cui lo spazio di funzioni considerato sia $L^2(\mathbb{R}^3; \mathcal{X})$ dove \mathcal{X} è uno spazio di dimensione finita (si può pensare al caso di una particella con gradi di libertà interni (spin) che interagisce con N centri attraverso interazioni puntuali).

In questo caso si vuole estendere, anziché il Laplaciano, l'operatore

$$A\phi = \Delta_0 \otimes I + I \otimes M \quad 9.63$$

con M una matrice simmetrica, e l'estensione viene realizzata stabilendo, per gli elementi del suo dominio, una relazione lineare tra la parte singolare della funzione negli N centri di interazione e il valore in questi punti della parte regolare (entrambe queste funzioni hanno valore in \mathcal{X}). ♣

Diamo infine una formulazione generale del metodo delle triple di bordo.

Definizione 9.2: Triple di Bordo (Boundary triples)

Sia A un operatore simmetrico chiuso su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} . Una tripla $\{\mathcal{K}, \beta_1, \beta_2\}$ dove \mathcal{K} è uno spazio di Hilbert con prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle$ e

$$\beta_1 : D(A^*) \rightarrow \mathcal{K}, \quad \beta_2 : D(A^*) \rightarrow \mathcal{K} \quad 9.64$$

sono due applicazioni lineari suriettive, è detta essere un *trippla di bordo* per A^* se, per $\phi, \psi \in D(A^*)$, si ha

$$(\psi, A^*\phi) - (A^*\phi, \psi) = \langle \beta_1\psi, \beta_2\phi \rangle - \langle \beta_2\psi, \beta_1\phi \rangle \quad 9.65$$

(cioè A^* individua una forma симплетica su \mathcal{K}). ◇

Nota 9.12

Questa terminologia è dovuta al fatto che nelle applicazioni al caso di operatori differenziali definiti su un dominio aperto Ω con frontiera regolare, lo spazio di Hilbert \mathcal{K} è composto da funzioni definite sul bordo $\partial\Omega$. ♣

Definizione 9.3

Un sottospazio chiuso $\Lambda \in \mathcal{K} \oplus \mathcal{K}$ è detto definire una relazione chiusa simmetrica se

$$\langle \zeta_1, \xi_2 \rangle = \langle \zeta_2, \xi_1 \rangle, \quad \forall \{(\zeta_1, \zeta_2), (\xi_1, \xi_2)\} \in \Lambda \oplus \Lambda. \quad 9.66$$

Una relazione è detta essere autoaggiunta (massimale simmetrica) se non esiste una relazione simmetrica chiusa che la contiene.

◇

Il risultato principale nella teoria delle triple di bordo è il seguente teorema (vedi ad esempio [GG91]).

Teorema 9.3

Le estensioni autoaggiunte dell'operatore A sono parametrizzate dalle relazioni autoaggiunte in $\mathcal{K} \oplus \mathcal{K}$. Ogni estensione autoaggiunta è ottenuta restringendo A^* al sottospazio

$$\{\phi \in D(A^*) : (\beta_1\phi, \beta_2\phi) \in \Lambda\}, \quad 9.67$$

dove Λ è una relazione autoaggiunta e $\{\mathcal{K}, \beta_1, \beta_2\}$ è una tripla di bordo per A^* .

◇

Nota 9.13

Il grafico (inteso come sottoinsieme di un prodotto tensoriale) di un estensione autoaggiunta dell'operatore A è un caso particolare di una relazione autoaggiunta. Ogni estensione autoaggiunta dell'operatore A definisce (in modo non unico) una relazione autoaggiunta.

Si può dimostrare che ogni relazione autoaggiunta in $\mathcal{K} \oplus \mathcal{K}$ è del tipo $\mathcal{G}(\Theta) \oplus \mathcal{K}_0^\perp$, dove $\mathcal{K}_0 \subseteq \mathcal{K}$ è un sottospazio chiuso, Θ è un operatore autoaggiunto in \mathcal{K}_0 e $\mathcal{G}(\Theta)$ è il suo grafico.

Nel caso $\mathcal{K}_0 = \mathcal{K}$ indicheremo con A_Θ l'estensione autoaggiunta che corrisponde alla relazione autoaggiunta data dal grafico di Θ .

La definizione di tripla di bordo è ben posta, ed ha una relazione precisa con i sottospazi di difetto. Infatti, indicato con P_\pm il proiettore sullo spazio di difetto \mathcal{K}_\pm , con U un'arbitraria isometria di \mathcal{K}_+ in \mathcal{K}_- , e ponendo $\beta_1 \equiv iP_+ - iUP_-$, $\beta_2 \equiv P_2 + UP_1$ e $\mathcal{K} = \mathcal{K}_+$, risulta che $\{\mathcal{K}, \beta_1, \beta_2\}$ è una tripla di bordo.

Questo permette di trasportare nella teoria delle triple di bordo i risultati ottenuti mediante la teoria di Krein sulle relazioni tra le risolventi di estensioni autoaggiunte diverse.

♣

Non diamo qui la dimostrazione del Teorema 9.3.

Notiamo che nell'esempio del Laplaciano definito su un dominio Ω aperto a frontiera regolare, \mathcal{K}_0^\perp può essere lo spazio delle funzioni nulle su un insieme $\Sigma \subset \partial\Omega$ e Θ un operatore da $H^{\frac{3}{2}}$ a $H^{\frac{1}{2}}$ con nucleo integrale

$$\Theta(x, y), \quad x, y \in \partial\Omega \setminus \Sigma.$$

La relazione tra la teoria delle triple di bordo e il metodo di Krein è chiarita dall'introduzione in entrambi i casi della *funzione di Weyl*.

Indichiamo con A_0 l'estensione di A caratterizzata dalla relazione autoaggiunta $\mathcal{G} = \{0\} \times \mathcal{K}$ (nel caso del Laplaciano definito in un dominio regolare Ω questa estensione corrisponde a condizioni al bordo di Dirichlet).

Definizione 9.4

Data la tripla di bordo $\{\mathcal{K}, \beta_1, \beta_2\}$ per l'operatore A^* , la *funzione di Weyl* di A è l'applicazione

$$\Gamma : \rho(A_0) \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{K}),$$

definita univocamente da (per $z \in \rho(A_0)$)

$$\Gamma(z)\beta_2\phi = \beta_1\phi, \quad \forall \phi \in \ker(A^* - z) \equiv \mathcal{K}_z. \quad 9.68$$

◇

Per ogni $z \in \rho(A_0)$ le applicazioni β_1 e β_2 sono biiezioni di \mathcal{K}_z su \mathcal{K} , e quindi resta definita l'applicazione G_z mediante

$$\Gamma(z) = \beta_1 G_z.$$

Dalle definizioni segue

$$\Gamma(z) - \Gamma(\bar{w}) = (z - \bar{w})G_w^* G_z.$$

Il simbolo G è stato scelto perché spesso G è una funzione di Green. Nelle notazioni di Krein, Γ è la funzione \mathcal{Q} .

La funzione di Weyl nel metodo delle terne di bordo, come in quello di Krein, può essere utilizzata per descrivere le proprietà spettrali delle varie estensioni autoaggiunte. Vale infatti il seguente risultato.

Teorema 9.4 ([DM91])

Si ha

$$\begin{aligned} z \in \rho(A_\Theta) \cap \rho(A_0) &\Leftrightarrow 0 \in \rho(\Theta + \Gamma(z)), \\ \lambda \in \sigma_i(A_\Theta) \cap \rho(A_0) &\Leftrightarrow 0 \in \sigma_i(\Theta + \Gamma(z)), \end{aligned}$$

dove $i = p, c$, in cui i simboli p e c corrispondono rispettivamente allo spettro puntuale e continuo.

Vale inoltre la formula *tipo Krein*

$$(-A_\Theta + z)^{-1} - (-A_0 + z)^{-1} = G_z(\Theta + \Gamma(z))^{-1} G_z^*, \quad 9.69$$

che permette di dedurre la forma della risolvente di un'estensione autoaggiunta dalla conoscenza della risolvente di A_0 .

◇

Il metodo delle triple di bordo è utile per costruire tutte le estensioni autoggettive della restrizione simmetrica S di un operatore autoaggiunto A ad un opportuno sottoinsieme del suo dominio.

Definiamo un operatore limitato $\tau : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{K}$ dove A è l'operatore autoaggiunto considerato, e \mathcal{H}_A è lo spazio di Hilbert $D(A)$ con la topologia Hilbertiana data dal grafico di A .

Ad esempio A potrebbe essere l'operatore autoaggiunto che estende con condizioni al bordo di Dirichlet un operatore simmetrico S definito su $R^N \setminus \Sigma$, dove Σ è un sottoinsieme di misura zero di R^N (tipicamente insieme di punti o superfici di codimensione 1).

In questo caso \mathcal{K} è uno spazio di Hilbert costruito sulle funzioni definite su Σ ed è definito in modo naturale un operatore limitato τ che a una funzione nel dominio di A associa il suo valore al bordo.

Poiché l'operatore risolvente $R_z \equiv (-A + z)^{-1}$, per z nell'insieme risolvente $\rho(A)$, è limitato da \mathcal{H} a \mathcal{H}_A , si può definire un operatore limitato

$$G_z \equiv R_z \tau^* : \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{H}. \quad 9.70$$

Se τ è suriettivo, l'operatore G_z è iniettivo, e se la chiusura del nucleo di τ è tutto \mathcal{H} allora si ha

$$(\text{Ran}(G_z)) \cap D(A) = \{0\}. \quad 9.71$$

Notare che, se τ agisce sulle funzioni continue in R^N come restrizione su un insieme Σ di codimensione uno, allora il nucleo di τ è costituito dalle funzioni che sia annullano su Σ e quindi esso è denso in $L^2(R^N)$. In questo caso l'operatore τ è una *traccia al bordo* Σ delle funzioni nel dominio di A . Non è difficile verificare che

$$(z - w)R_w G_z = G_w - G_z, \quad \forall z, w \in \rho(A), \quad 9.72$$

da cui segue $\text{Ran}(G_w - G_z) \subset D(A)$. Sia $\Gamma_z : \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}$ una famiglia di operatori limitati tale che

$$\Gamma_z - \Gamma_w = (z - w)G_w^* G_z, \quad \Gamma_z^* = \Gamma_{\bar{z}}. \quad 9.73$$

Notiamo che per ogni z l'operatore Γ_z differisce per un operatore limitato da

$$\tau \left(\frac{G_\omega - G_\omega^*}{2} - G_z \right), \quad \omega \in \rho(A).$$

Sia Π una proiezione ortogonale in \mathcal{K} e poniamo $\mathcal{K}_0 \equiv \text{Ran}(\Pi)$. Sia

$$\Theta : D(\Theta) \subseteq \mathcal{K}_0 \rightarrow \mathcal{K}_0 \quad 9.74$$

un operatore autoaggiunto in \mathcal{K}_0 .

Definiamo, per z nell'insieme aperto

$$Z_{\Pi, \Theta} \equiv \{z \in \rho(A), 0 \in \rho(\Gamma_{\Pi, \Theta}(z))\},$$

l'operatore chiuso

$$\Gamma_z^{\Pi, \Theta} \equiv \Theta + \Pi \Gamma_z \Pi : D(\Theta) \subseteq \mathcal{K}_0 \rightarrow \mathcal{K}_0. \quad 9.75$$

Allora si ha [Pos01, Pos08] che

$$R_z^{\Pi, \Theta} \equiv R_z + G_z \Pi (\Gamma_z^{\Pi, \Theta})^{-1} \Pi G_z^* \quad 9.76$$

è la risolvente dell'estensione autoaggiunta $A_{\Pi, \Theta}$ di A definita da

$$D(A_{\Pi, \Theta}) \equiv \{\phi = \phi_z + G_z \Pi (\Gamma_z^{\Pi, \Theta})^{-1} \Pi \tau \phi_z, \quad \phi_z \in D(A)\}, \quad 9.77$$

$$(-A_{\Pi, \Theta} + z)\phi \equiv (-A + z)\phi_z. \quad 9.78$$

Inoltre tutte le estensioni autoaggiunte della restrizione simmetrica S di A al nucleo di τ si ottengono in questo modo.

Esemplifichiamo il metodo delle terne di bordo nel caso di interazione puntuale con N centri in R^3 nell'ambito della teoria delle terne di bordo. Notiamo che in questo caso lo spazio di Hilbert \mathcal{K} di bordo è lo spazio C^m e l'operatore τ (*traccia al bordo*) è l'operatore

$$\tau : H^2(R^3) \rightarrow C^N, \quad \tau \psi \equiv \{\psi(x_1), \dots, \psi(x_N)\}. \quad 9.79$$

La risolvente dell'operatore autoaggiunto Δ è data da

$$(-\Delta + z)^{-1}(x, y) = e^{-\frac{\sqrt{z}|x-y|}{4\pi|x-y|}}, \quad \Re \sqrt{z} > 0, \quad 9.80$$

e quindi la funzione G_z è

$$G_z : C^N \rightarrow L^2(R^3), \quad [G_z \rho](x) = \sum_{k=1}^N \frac{e^{-\sqrt{z}|x-x_k|}}{4\pi|x-x_k|} \rho_k, \quad \rho = \{\rho_1, \dots, \rho_N\}. \quad 9.81$$

Segue da 9.80 che la componente k^{ma} del vettore $(z-w)G_w^* G_z \rho$ è

$$\lim_{x \rightarrow x_k} \frac{e^{-\sqrt{w}|x-x_k|} - e^{-\sqrt{z}|x-x_k|}}{4\pi|x-x_k|} \rho_k + \sum_{j \neq k} \left(\frac{e^{-\sqrt{w}|x_j-x_k|}}{4\pi|x_j-x_k|} - \frac{e^{-\sqrt{z}|x_j-x_k|}}{4\pi|x_j-x_k|} \right) \rho_j.$$

Definiamo

$$(\Gamma_z)_{k,k}(z) = \frac{\sqrt{z}}{4\pi}, \quad (\Gamma_z)_{k,j} = -\frac{e^{-\sqrt{z}|x_j-x_k|}}{4\pi|x_j-x_k|}, \quad k \neq j, \quad 9.82$$

$$(\hat{\tau}_0 \phi)_k = \lim_{x \rightarrow x_k} \left(\phi(x) - \frac{\rho_{\phi;k}}{4\pi|x-x_k|} \right), \quad k = 1, \dots, N \quad 9.83$$

ed introduciamo una proiezione ortogonale Π nello spazio $\mathcal{K} \equiv C^N$ e un operatore simmetrico Θ in \mathcal{K} . Allora le estensioni autoaggiunte di S sono parametrizzate da Π, Θ secondo

$$(-\Delta_{\Pi, \Theta} + z)^{-1} = (-\Delta + z)^{-1} + G_z \Pi (\Theta + \Pi \Gamma_z \Pi)^{-1} \Pi G_z^* \quad 9.84$$

e il loro dominio è caratterizzato dalle condizioni al bordo

$$\Pi \hat{\tau}_0 \phi = \Theta \rho_\phi.$$

Nota 9.14

Con lo stesso formalismo si può trattare il caso in cui l'insieme dei punti rimossi è una curva o un segmento di curva γ in R^3 .

Anche in questo caso lo spazio di difetto ha dimensione infinita (numerabile) e le funzioni nel dominio di *alcune* estensioni autoaggiunte possono essere scritte (almeno nel caso in cui γ sia una curva contenuta in una regione finita) come somma di una funzione in $H^2(R^3 \setminus \gamma)$ e di un integrale con peso (in generale complesso) delle funzioni di Green dei punti di γ .

Anche in questo caso tali estensioni autoaggiunte sono classificate dalla relazione tra il *peso* su γ e il valore che assume su γ la funzione.

La teoria generale delle estensioni autoaggiunte è più difficile in questo caso perché le singolarità al bordo sono di tipo logaritmico.



Abbiamo finora analizzato il caso di un operatore di Schrödinger che descrive una particella in R^d , $d = 1, 2, 3$, con interazione localizzata su un insieme di codimensione $d - k$, $k < d$.

Mediante l'uso di coordinate relative e baricentrali, lo stesso procedimento descrive l'interazione tra due particelle quantistiche, con interazione invariante per traslazione e localizzata corrispondentemente.

Il caso di N , con $N \geq 3$, particelle interagenti mediante un'interazione *puntuale* attrattiva è notevolmente più complesso; in quest'ambito presenta un notevole interesse in Fisica un modello, che per $N = 3$ simula l'atomo di tritio completamente ionizzato.

Questo modello descrive tre particelle quantistiche di coordinate $x_k \in R^3$, $k = 1, 2, 3$. Ciascuna particella interagisce con le altre mediante un'interazione *puntuale* (modello di L.H.Thomas [Tho35]).

La Hamiltoniana deve essere un'estensione autoaggiunta dell'operatore $-\sum_k \Delta_k$ definito su funzioni due volte differenziabili nulle in un intorno dell'insieme di punti in cui due delle coordinate coincidono.

Se l'estensione è cercata scegliendo per le funzioni nel dominio relazioni tra la parte regolare e la parte singolare negli iperpiani $x_i = x_j$, $i \neq j$, che non dipendono dalle coordinate della terza particella, si ottiene *un operatore simmetrico ma non autoaggiunto* [MF62].

Aggiungendo, con un processo di limite, condizioni sulla funzione d'onda nel punto di coincidenza tripla, si ottiene una famiglia di estensioni autoaggiunte (dipendente dalla particolare condizione scelta), ma in tre dimensioni *nessuna di queste è limitata dal basso*, almeno se le masse delle tre particelle differiscono poco tra loro ([MM91]).

La dimostrazione di questo risultato viene semplificata dall'utilizzo delle forma quadratiche, che tratteremo brevemente nel cap. 19. Mediante la teoria della forma quadratiche è anche possibile dimostrare che vi sono anche altre estensioni autoaggiunte (che corrispondono a relazioni tra tutte le parti regolari e singolari) che sono limitate dal basso, e addirittura che ce n'è una che è positiva e per la quale è possibile costruire l'autofunzione che corrisponde all'estremo inferiore dello spettro.

Questo risultato sorprendente persiste se si considerano N particelle.

Notiamo che se anche in questo caso si compie un'analisi perturbativa al secondo ordine, l'operatore risulta limitato dal basso; sono i termini di ordine maggiore di tre che rendono lo spettro illimitato dal basso. Questo rende particolarmente interessante il fatto che per modelli di interazione puntuale siano disponibili espressioni *esatte* (cioè non perturbative) della risolvente della Hamiltoniana. Un'analisi più accurata del modello di Thomas non è stata fatta finora.

Nota 9.15

E' interessante notare che se si impongono alla funzione d'onda opportune condizioni di simmetria, l'operatore risulta limitato dal basso anche per un numero di particelle maggiore di due. Ad esempio se si considera l'interazione *puntuale* di una particella di massa uno con N fermioni identici di massa μ si può dimostrare [Min10] che la Hamiltoniana del sistema è limitata dal basso se $N \leq N_0(\mu)$ con una stima esplicita di $N_0(\mu)$. Anche questo risultato può essere ottenuto [DFT94] più facilmente utilizzando le forma quadratiche. Il motivo è che nel dominio dell'operatore vi sono adesso meno funzioni e quindi, per il criterio di min-max l'estremo inferiore dello spettro diventa minore in valore assoluto.

Analogo fenomeno si presenta nella trattazione di particelle fermioniche con spin $\frac{1}{2}$. In questo caso la parte spaziale della funzione d'onda di due particelle è simmetrica, e quindi può agire l'interazione *puntuale* solo quando la componente di spin è antisimmetrica (spin totale zero). Questo favorisce dal punto di vista energetico stati in cui i fermioni sono accoppiati due a due in stati di spin zero e rende la stima dell'estremo inferiore dello spettro più difficile.



Un'analoga conclusione si ottiene nello studio di un altro modello molto studiato in Fisica, il gas di Rayleigh ([LL67]).

In questo modello, una particella quantistica non relativistica di massa m interagisce – con un'interazione puntuale – con ciascun elemento di un insieme di oscillatori armonici quantistici centrati nei punti di un reticolo e con costante di richiamo ω comune.

Formalmente la Hamiltoniana del sistema (come descritta ad esempio in [LL67])

è

$$H_{\alpha,\omega} = -\frac{1}{2}\Delta_x + \sum_j (-\Delta_{y_j} + \omega |y_i - y_i^0|^2 + \alpha\delta(x - y_j)), \quad 9.87$$

dove le y_i^0 , $i = 1, \dots, N$, sono le coordinate dei punti di un reticolo (finito se $N < \infty$).

In dimensione uno si può dare significato matematico alla (9.87) mediante la teoria delle forme quadratiche ([CDF08]). In dimensione due e tre è necessario utilizzare la teoria della estensioni autoaggiunte sviluppata in questo capitolo a partire dall'operatore

$$H_0 = -\frac{1}{2}\Delta_x + \sum_j (-\Delta_{y_j} + \omega |y_j - y_j^0|^2),$$

definito su funzioni di classe C^2 definite al di fuori di un intorno dell'insieme $\{x = y_j, j = 1, 2, \dots\}$. Anche in questo caso l'analisi risulta semplificata se si utilizza la teoria della forma quadratiche.

Se si utilizza l'estensione data dal richiedere che le funzioni nel dominio dell'operatore esteso siano caratterizzate dal fatto che la parte singolare sulle superfici $x = y_i$ sia proporzionale in ciascun punto alla parte regolare secondo il fattore costante α , l'operatore risultante risulta illimitato dal basso per $2 < N < \infty$.

Notare che quando $\omega = \infty$ il sistema rappresenta formalmente l'interazione di una particella quantistica con N centri fissi, e tutte le estensioni autoaggiunte sono limitate dal basso.

Anche per il gas di Rayleigh non è stata ancora fatta un'analisi più approfondita.

APPENDICE 9A: IL CRITERIO DI WEYL

Diamo in questa Appendice il *criterio di Weyl* per verificare se un operatore di Schrödinger sulla semiretta reale R^+ è essenzialmente autoaggiunto su C_0^∞ o ammette estensioni autoaggiunte (l'operatore è reale e quindi i suoi indici di difetto sono eguali). Per uno studio approfondito di questo problema rimandiamo a [23, vol 2, cap. X]. L'utilizzazione del criterio di Weyl è spesso legata allo studio di operatori di Schrödinger in R^3 con simmetria radiale.

Sia $V(x)$ un funzione continua a valori reali su $(0, \infty)$. Dal criterio di Weyl deduciamo che gli indici di difetto dell'operatore (simmetrico) $-\frac{d^2}{dx^2} - V(x)$ sono le dimensioni dello spazio delle soluzioni in $L^2(0, \infty)$ dell'equazione

$$-\frac{d^2\phi}{dx^2} - V(x)\phi = \lambda\phi, \quad \Im\lambda > 0. \quad 9A.1$$

Nella teoria delle equazioni differenziali del secondo ordine a coefficienti regolari si dimostra che per ogni λ , $\Im\lambda > 0$, esiste sempre almeno una soluzione di

9A.1 che è a quadrato integrabile in un intorno dell'origine e almeno una che è a quadrato integrabile in un intorno di $+\infty$.

Inoltre, se entrambe le soluzioni sono a quadrato integrabile in un intorno di zero per $\lambda = \lambda_0$, $\Im \lambda_0 > 0$, allora questo è vero per ogni valore di λ , $\Im \lambda > 0$. Questo vale anche in un intorno di $+\infty$.

Definizione 9A.1

Si dice che il potenziale $V(x)$ è di tipo *cerchio limite* all'infinito (rispettivamente in zero) se *tutte* le soluzioni di (9A.1) sono a quadrato integrabile in un intorno di $+\infty$ (rispettivamente dell'origine). In caso contrario, il potenziale è di tipo *punto limite*.

◇

Questa notazione ha la seguente origine. Si noti che due soluzioni esistono sempre in un intorno di qualunque punto interno a in $(0, \infty)$ e in particolare esistono due soluzioni ϕ e ψ che soddisfano

$$\phi(a) = \psi'(a) = 0, \quad -\phi'(a) = \psi(a) = 1. \quad 9A.2$$

Con $b \in (0, \infty)$, detto $\gamma_{\alpha(b)}$ il luogo dei punti z che soddisfano

$$\cos \alpha \eta(b) + \sin \alpha \eta'(b) = 0, \quad \eta(b) = \phi(b) + z\psi(b)$$

si può verificare che se $b = a$ questa curva è un cerchio per $\alpha = 0$ e per ogni per $0 < b < \infty$ esiste $\alpha(b)$ tale che $\gamma_{\alpha(b)}$ è un cerchio di raggio $r(b)$.

Il potenziale $V(x)$ è detto essere di tipo *cerchio limite* all'origine (rispettivamente all'infinito) se $\lim_{b \rightarrow 0} r(b) \neq 0$ (rispettivamente $\lim_{b \rightarrow \infty} r(b) \neq 0$). Il potenziale è detto essere di tipo *punto limite* se al limite considerato $r(b)$ si annulla.

È facile vedere che questo corrisponde al fatto che tutte due le soluzioni dell'equazione o una sola rimangono limitate. Con queste notazioni vale il seguente *criterio di Weyl*

Teorema 9A.1 (criterio di Weyl)

Sia $V(x)$ una funzione continua su $(0, \infty)$ a valori reali. L'operatore

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad 9A.3$$

è essenzialmente autoaggiunto su $C_0^\infty(\mathbb{R}^+)$ se e solo se il potenziale $V(x)$ è di tipo punto limite sia all'origine che all' ∞ .

◇

Dimostrazione del Teorema 9A.1

Dimostriamo prima che la condizione è necessaria. Notiamo che H^* è per definizione l'operatore differenziale

$$H^* = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad 9A.4$$

su $L^2(R^+)$ inteso in senso debole (nel senso delle distribuzioni su R^+).

Dobbiamo dunque dimostrare che nell'ipotesi del criterio di Weyl, non ci sono soluzioni in $L^2(R^+)$ nel senso delle distribuzioni dell'equazione

$$\left(-\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = i\psi(x). \quad 9A.5$$

La (9A.5) è un'equazione differenziale lineare ordinaria ellittica a coefficienti regolari. Quindi ogni soluzione debole è anche una soluzione classica; dobbiamo dimostrare che non vi sono funzioni di classe C^2 su R^+ e a quadrato integrabile che soddisfino (9A.5).

Dalla teoria generale delle equazioni differenziali è noto che quando $V(x)$ è una funzione continua, esiste sempre una soluzione $u_0(x)$ di (9A.5) che è regolare all'origine (e quindi a quadrato integrabile) e una soluzione $v_0(x)$ che è a quadrato integrabile all'infinito.

Se il potenziale fosse di tipo cerchio limite all'origine (risp. all'infinito) esisterebbe una seconda soluzione w_0 diversa da u_0 e a quadrato integrabile all'origine (risp. all'infinito). Essendo l'equazione lineare e del secondo ordine, ne segue che tutte le soluzioni sono a quadrato integrabile all'origine e quindi ne esiste almeno una che è in $L^2(0, \infty)$.

Dunque per il criterio di Weyl l'operatore non è essenzialmente autoaggiunto.

Per dimostrare che la condizione espressa nell'enunciato è anche sufficiente con i metodi dell'equazioni differenziali dovremmo dimostrare che nel caso di punto limite la soluzione che è a quadrato integrabile all'origine *non è raccordabile come funzione di classe C^2* alla soluzione che è a quadrato integrabile all'infinito.

Diamo una dimostrazione alternativa. Sia H^* l'aggiunto di H , con $f, g \in D(H^*)$. Notiamo che se $f \in D(H^*)$, allora $f' \in D((-\Delta)^{1/2})$, quindi $f(x)$ e $g(x)$ sono funzioni continue e hanno derivata prima continua in $(0, \infty)$.

Definiamo

$$W_x(f, g) \equiv f'(x)g(x) - f(x)g'(x) \quad x \in (0, \infty). \quad 9A.6$$

La funzione W_x prende il nome di *Wronskiano* nel punto x della coppia f, g . Si ha, per $a, b \in (0, \infty)$

$$W_b(f, g) - W_a(f, g) = \int_a^b [(\overline{H^*f(x)})g(x) - \overline{f(x)}((Hg)(x))] dx. \quad 9A.7$$

Prendendo il limite $a \rightarrow 0$ e $b \rightarrow \infty$ (tale limite esiste sotto le ipotesi che abbiamo fatto) si ha

$$W_\infty(f, g) - W_0(f, g) = (H^*f, g) - (f, H^*g). \quad 9A.8$$

Dunque per terminare la dimostrazione del teorema (9A.1) dobbiamo dimostrare che per ogni coppia di funzioni $f, g \in D(H^*)$ si ha

$$W_\infty(f, g) = W_0(f, g)$$

(cioè che l'operatore H^* è simmetrico). Sia γ un numero reale positivo, e definiamo

$$A \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad D(A) = \{\phi : \phi \in C^\infty(0, \gamma), \phi(0) = \phi(\gamma) = 0\}. \quad 9A.9$$

L'operatore A è autoaggiunto in $L^2([0, \gamma])$ essendo una perturbazione regolare dell'operatore $-\frac{d^2}{dx^2}$ con condizioni di Dirichlet al bordo.

Per costruzione, H^* estende A . D'altra parte A può essere esteso ad un operatore su tutto R^+ definendolo uguale a zero sulle funzioni con supporto in $(\gamma, +\infty)$. L'operatore così esteso (che denotiamo ancora con il simbolo A) è una restrizione di H^* . Ne segue

$$H \subset A^* = A \subset H^*$$

Siano $f, g \in D(A)$. Scegliamo una funzione $f_1(\gamma) \in C_0^\infty(0, \infty)$ con le proprietà

$$f_1 \in D(H^*), \quad f_1(\gamma) = f(\gamma), \quad f_1'(0) = 0.$$

Poniamo inoltre $f_2(x) = f(x) - f_1(x)$. Ne segue

$$f_2(\gamma) = 0, \quad f_2'(0) = f'(0). \quad 9A.10$$

Scegliamo analogamente

$$g_1 \in D(H^*), \quad g_1(0) = g(0), \quad g_1'(\gamma) = 0$$

e poniamo $g_2(x) = g(x) - g_1(x)$. Ne segue

$$g_2(0) = 0, \quad g_2'(\gamma) = g'(\gamma). \quad 9A.11$$

Allora

$$W_0(f_2, g_2) = W_0(f, g), \quad W_\gamma(f_2, g_2) = 0. \quad 9A.12$$

Ma abbiamo visto che $H \subset A$; dunque $f, g \in D(A)$.

Poiché A è autoaggiunto, si ha

$$0 = (Af_2, g_2) - (f_2, Ag_2) = W_\gamma(f_2, g_2) - W_0(f_2, g_2), \quad 9A.13$$

da cui, facendo uso di (9A.12)

$$W_0(f, g) = W_0(f_2, g_2) = 0.$$

Per dimostrare che $W_\infty(f, g) = 0$ si procede in modo analogo, considerando ora l'estensione autoaggiunta di $H|_{C_0^\infty(\gamma, \infty)}$ definita dalle condizioni di Dirichlet in $x = \gamma$.

Questo conclude la dimostrazione del Teorema 9A.1.



Diamo due esempi di applicazione del criterio di Weyl.

Lemma 9A.2

Se $V(x) \geq \frac{3}{4} \frac{1}{x^2}$ in un intorno dell'origine allora

$$\left(-\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)\right)u(x) = iu(x) \quad 9A.14$$

ha una sola soluzione a quadrato sommabile all'origine. Dunque se ha una sola soluzione a quadrato sommabile all'infinito (come accade ad esempio se $V(x) = 0$ per $x > R$), l'operatore considerato è autoaggiunto ed essenzialmente autoaggiunto su $C_0^\infty(R^+)$.



Nota 9A.2

Se

$$0 \leq V(x) \leq \left(\frac{3}{4} - \epsilon\right) \frac{1}{x^2}, \quad \epsilon > 0$$

allora vi sono due soluzioni a quadrato sommabile all'origine, e l'operatore non è essenzialmente autoaggiunto su $C_0^\infty(R^+)$.



Dimostrazione del Lemma 9A.2

Consideriamo innanzitutto il caso $V = \frac{c}{x^2}$, $C > 0$.

L'equazione

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{c}{x^2}\right)u(x) = 0$$

ha soluzione

$$x^{\alpha_\pm}, \quad \alpha_\pm = \frac{1 \pm \sqrt{\frac{1+4c}{2}}}{2}$$

da cui segue subito l'asserto.

Si noti ora che, se $V(x) > V_1(x)$ per $0 < x < \delta$ e se

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x)\right)u(x) = 0 \quad 9A.15$$

ha una sola soluzione a quadrato integrabile all'origine, anche

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)u(x) \quad 9A.16$$

ha questa proprietà. Infatti se $u(x)$ risolve (9A.15) e $v(x)$ risolve (9A.14), e se $v(\delta) = u(\delta)$, $u'(\delta) = v'(\delta)$ allora $u(x) \geq v(x)$, $0 < x < \delta$ e dunque

$$\int_\epsilon^\delta |u(x)|^2 dx \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \int_\epsilon^\delta |v(x)|^2 dx \rightarrow 0$$

Questo termina la dimostrazione del Lemma 9A.2. ♡

Come esempio di applicazione del criterio di Weyl analizziamo l'operatore

$$H \equiv -\Delta + V(|x|), \quad x \in R^d \quad 9A.17$$

con $V(r)$ singolare all'origine e di classe C^∞ altrove. Passando in coordinate polari

$$L^2(R^d, dx) \simeq L^2(R^+, r^{d-1} dr) \otimes L^2(S^d, d\Omega)$$

(dove S^d è la sfera di raggio unitario in R^d centrata all'origine) l'operatore da studiare ha la forma

$$H = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{d-1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{J^2}{r^2} + V(r) \quad 9A.18$$

dove J è l'operatore di Laplace-Beltrami su S^d L'operatore J commuta con H . Indichiamo con λ_l i suoi autovalori. I corrispondenti autospazi hanno dimensione finita.

Definendo l'operatore isometrico invertibile

$$U : L^2(R^+, r^{d-1} dr) \rightarrow L^2(R^+, dr); \quad U\phi(r) \rightarrow r^{\frac{d-1}{2}} \phi(r)$$

si ha, sul sottospazio corrispondente all'autovalore λ_l di J ,

$$UH_lU^{-1} = -\frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \left[\frac{(d-1)(d-3)}{4} + \lambda_l \right] \frac{1}{r^2}$$

Dal Lemma precedente si deduce che H_k è essenzialmente autoaggiunto se

$$V(r) + \left(\frac{(d-1)(d-3)}{4} + \lambda_l \right) \frac{1}{r^2} \geq \frac{3}{4} \frac{1}{r^2} \quad 9A.19$$

mentre ha una famiglia ad un parametro di estensioni autoaggiunte se

$$V(r) + \left(\frac{(d-1)(d-3)}{4} + \lambda_l \right) \frac{1}{r^2} \leq \frac{C}{r^2} \quad C < 3/4 \quad 9A.20$$

Notare che se $d \geq 4$, si ha $\frac{(d-1)(d-3)}{4} \geq 3/4$, e poiché $\lambda_l \geq 0$, si deduce che per $d \geq 4$ se $V(r)$ è meno singolare di $\frac{1}{r^2}$ l'operatore $-\Delta + V(r)$ è essenzialmente autoaggiunto su $C_0^\infty(R^d)$.

Se $d = 3$ gli autovalori λ_l di J^2 hanno la forma $l(l+1)$ con $l = 0, 1, 2, \dots$. In questo caso $\frac{(d-1)(d-3)}{4} + \lambda_l = \lambda_l$ e la condizione di autoaggiuntezza è soddisfatta per $l \geq 1$ (se $V(r)$ è meno singolare di $\frac{1}{r^2}$) mentre per $l = 0$ si deve richiedere che il potenziale sia $\geq \frac{3}{4r^2}$ all'origine.

Per $d = 2$ si ha $\lambda_l = 0, 1, 2, \dots$ e $\frac{(d-1)(d-3)}{4} + \lambda_l = -1/4 + \lambda_l$; anche qui la condizione $-1/4 + \lambda_l \geq 3/4$ non è soddisfatta solamente per $\lambda_l = 0$.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [AGH-KH88] S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Högh-Krohn, H. Holden, *Solvable models in quantum mechanics* - Springer-Verlag, New York (1988).
- [AK00] S. Albeverio, P. Kurasov, *Singular perturbations of differential operators* Cambridge University Press (2000).
- [CDF08] M. Correggi, G.F. Dell'Antonio, D. Finco, *J. Funct. Anal.* 255 (2008), 502-531.
- [DFT94] G.F. Dell'Antonio, R. Figari, A. Teta, *Ann. Inst. H. Poincaré* 60 (1994), 253-290.
- [DM91] V.A. Derkad e M.M. Malamud, *J. Funct. Anal.* 95 (1991), 1-95.
- [Fer36] E. Fermi, *Ricerca Scientifica* 7 (1936), 13-52.
- [GG91] V.I. Gorbachuk, M.L. Gorbachuk, *Boundary value problems for operator differential equations*, Dordrecht, Kluwer (1991).
- [Gru68] G. Grubb, *Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa*, 22 (1968), 425-513.
- [KS99] V. Kostrikin, R. Schrader, *Journal of Physics A*, 32 (1999) 595-630.
- [Kre44] M.G. Krein, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 43 (1944), 339-342.
- [Kre46] M.G. Krein, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 52 (1946), 657-660.
- [LL67] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Non relativistic Quantum Mechanics*, Mir, Moscow, (1967).
- [LM72] J.L. Lions, E. Magenes, *Non homogeneous boundary value problems*, Springer (1972).
- [Min10] R. Minlos, *On the point-like interaction between N identical fermions and another particle* to appear on *Moscow Math. Jour.*
- [MM91] A. Melnikov, R.A. Minlos, *Advances in Soviet Mathematics* 5 (1991) 99-112.
- [MF62] R.A. Minlos, L.D. Faddeev, *Soviet Physics JETP*, 14 (1962), 342-352.
- [Nov99] S. Novikov, *Schrödinger operators on graphs and symplectic geometry*, Proceedings of the Fields Institute Conference, E. Bierstone ed., (1999).
- [Pos08] A. Posilicano, *Operators and Matrices*, 2 (2008), 483-506.
- [Pos01] A. Posilicano, *J. Funct. Anal.* 183 (2001), 109-147.

[RN90] F.Riesz, F.Nagy, *Functional Analysis*, Dover (1990).

[Tho35] L.H.Thomas, Phys. Rev. 47 (1935), 146-156.

CAPITOLO 10
ELEMENTI DI TEORIA DEGLI OPERATORI DI SCHRÖDINGER

Iniziamo con alcuni risultati di natura generale che sono essenzialmente teoremi di confronto; servono infatti a dedurre che un operatore è autoaggiunto dal fatto che sia autoaggiunto un operatore di riferimento.

Sia A un operatore autoaggiunto sullo spazio di Hilbert \mathcal{H} (che assumeremo separabile). Utilizzeremo la notazione $|\phi|$ per indicare la norma di $\phi \in \mathcal{H}$. Con $\phi \in \mathcal{H} = L^p(\mathbb{R}^d)$, indicheremo la sua norma con $|\phi|_p$. L'operatore B è detto A -limitato se esistono costanti reali $0 \leq a \leq 1$, $b \in \mathbb{R}^+$ tali che

$$|B\phi| \leq a|A\phi| + b|\phi| \quad \forall \phi \in D(A). \quad 10.1$$

Se B è chiuso, questo implica che $D(A) \subset D(B)$.

Chiameremo *limitazione (bound)* di B rispetto ad A , e indicheremo con $a_{A,B}$, l'estremo inferiore delle costanti a per le quali (10.1) vale per qualche b .

Definizione 10.1

Se $0 < a_{A,B} < 1$ diciamo che B è *piccolo nel senso di Kato* rispetto a A e denotiamo questa relazione con il simbolo $B \prec A$. Se $a_{A,B} = 0$ diciamo che B è *infinitesimo rispetto ad A* e indichiamo questo con il simbolo $B \prec\prec A$.

◇

Con queste notazioni vale il seguente importante teorema

Teorema 10.1 (Kato-Rellich)

Se A è autoaggiunto e B è simmetrico e piccolo rispetto ad A allora $A + B$ definito inizialmente su $D(A) \cap D(B)$ è autoaggiunto con dominio $D(A)$, ed essenzialmente autoaggiunto su ogni *core* (domino di essenziale autoaggiuntezza) di A . Inoltre, se $A \geq mI$ si ha

$$A + B \geq m - \min_{a,b} \left(\frac{b}{1-a}, a|m| + b \right)$$

dove il minimo viene preso su tutte le coppie a, b che soddisfano (10.1).

◇

Dimostrazione

Basterà dimostrare che per μ sufficientemente grande si ha

$$\text{Ran}(A + B + i\mu) \equiv \mathcal{H}.$$

Notiamo che in $D(A)$ vale l'identità

$$(1 + B(A + i\mu)^{-1})(A + i\mu) = A + B + i\mu; \quad 10.2$$

essendo A autoaggiunto, $A + i\mu$ è invertibile. Dobbiamo dimostrare che anche $(1 + B(A + i\mu)^{-1})$ è invertibile e per questo è sufficiente dimostrare che $|B(A + i\mu)^{-1}| < 1$.

Si ha

$$\begin{aligned} |B(A + i\mu)^{-1}\phi| &\leq a|A(A + i\mu)^{-1}\phi| + b|(A + i\mu)^{-1}\phi| \\ &\leq a|A(A + i\mu)^{-1}| + \frac{b}{\mu}|\phi|. \end{aligned} \quad 10.3$$

Pur di prendere μ sufficientemente grande, il termine a destra può essere reso più piccolo di $(1 - \delta)|\phi|$ per ogni δ con $0 < |\delta| < 1$.

La stima dell'estremo inferiore dello spettro di $A + B$ si ottiene ripetendo i calcoli precedenti, considerando $A + \mu I - MI$ e determinando il più piccolo valore di μ per il quale l'operatore $A + b + \mu$ è invertibile.

♡

Come applicazione del teorema 10.1 al caso degli operatori di Schrödinger, dimostriamo il seguente corollario

Corollario

Assumiamo che il potenziale V soddisfi

$$V \in L^\infty(\mathbb{R}^3) + L^2(\mathbb{R}^3). \quad 10.4$$

Intendiamo con questo che

$$V = V_1 + V_2, \quad V_1 \in L^\infty(\mathbb{R}^3), \quad V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3).$$

Allora l'operatore $-\Delta + V$ è autoaggiunto su $D(\Delta)$ ed è essenzialmente autoaggiunto su ogni *core* di Δ (ad esempio su $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$).

◇

Dimostrazione

Verifichiamo che V è infinitesimo rispetto a $-\Delta$.

Dimostriamo innanzitutto che per ogni $a > 0$ esiste $b > 0$ tale che

$$|\phi|_\infty \leq a|\Delta\phi|_2 + b|\phi|_2 \quad 10.5$$

Questa relazione (tecnicamente un'inclusione di Sobolev) si dimostra facilmente considerandone la trasformata di Fourier. Si ha infatti

$$|\phi|_\infty \leq \int |\hat{\phi}(k)| d^3k.$$

Consideriamo separatamente il contributo della regione d'integrazione $|k| \geq \delta$, e della regione complementare. Dalla disuguaglianza di Schwarz

$$\int_{|k| \geq \delta} |\hat{\phi}(k)| d^3k \leq \left[\int_{|k| \geq \delta} |k^2 \hat{\phi}(k)|^2 d^3k \right]^{1/2} \left[\int_{|k| \geq \delta} |k|^{-4} d^3k \right]^{1/2} \leq C(\delta) |\Delta\phi|_2$$

dove $C(\delta) \rightarrow 0$ per $\delta \rightarrow +\infty$. D'altra parte

$$\int_{|k| < \delta} |\hat{\phi}(k)| d^3k \leq \left[\int_{|k| < \delta} |\hat{\phi}(k)|^2 d^3k \right]^{1/2} \left(\frac{4\pi}{3} \delta^3 \right)^{1/2}.$$

Scegliendo δ opportunamente questo dimostra (10.4). Sia ora $\phi \in L^\infty(R^3)$ e

$$V = V_1 + V_2, \quad V_1 \in L^2(R^3), \quad V_2 \in L^\infty(R^3)$$

e sia $\phi(x)$ tale che $V\phi \in L^2(R^3)$. Allora

$$\begin{aligned} |V\phi|_2 &\leq |V_1\phi|_\infty + |V_2\phi|_2 \leq |\phi|_\infty |V_1|_2 + |\phi|_2 |V_2|_\infty \\ &\leq a |\Delta\phi|_2 + [|V|_2 + b + |V|_\infty] |\phi|_2. \end{aligned}$$

♡

Nota 10.1

Le condizioni poste su V sono soddisfatte, ad esempio, se $V \in L^2_{loc}(R^3)$ e se esistono C e γ tali che $|V(x)| \leq C$ se $|x| > \gamma$. Questo accade ad esempio se $V(x) = c|x|^{-\alpha}$, $0 < \alpha < 3/2$. Lo stesso vale se si considera l'operatore

$$-\sum_i \Delta_i + \sum_{i \neq j} V_{i,j}(x_i - x_j)$$

con le stesse ipotesi su ciascun termine $V_{i,j}$.

♣

Il teorema di Kato-Rellich può essere generalizzato e applicato all'analisi di una dinamica di N corpi, ad esempio al sistema rappresentato dalla hamiltoniana

$$H = -\sum_{j=1}^N \Delta_{x_j} + \sum_{j < k}^N |x_j - x_k|^{-1} - \sum_{j=1}^N Z|x_j|^{-1}, \quad x_I \in R^3 \quad 10.6$$

Questo sistema viene utilizzato per descrivere l'interazione di N elettroni con un atomo di carica Z fermo all'origine delle coordinate.

La hamiltoniana H non soddisfa le condizioni del teorema di Kato-Rellich, ma è facile generalizzare il teorema stesso così da includere anche questo caso. Questo è il contenuto del seguente teorema

Teorema 10.2 (Kato)

Siano

$$V_{j,k}, W_j \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3), \quad j, k = 1, \dots, N$$

e sia

$$H = \sum_{j=1}^N (-\Delta_{x_j} + W(x_j)) + \sum_{j < k} V_{j,k}(x_j - x_k) \quad 10.7$$

su $L^2(\mathbb{R}^{3N})$.

Allora H è autoaggiunto e $D(H) \equiv H^2(\mathbb{R}^{3N})$.

◇

Dimostrazione

Abbiamo già visto che, sotto le ipotesi fatte sul potenziale, si ha che per ogni $\epsilon > 0$ e per ogni $\phi \in H^2(\mathbb{R}^{3N})$ esiste $b_\epsilon > 0$ tale che

$$|W_j \phi|_2 \leq \epsilon |\Delta_{x_j} \phi|_2 + b_\epsilon |\phi|_2, \quad |V_{j,k} \phi|_2 \leq \epsilon |\Delta_{x_j - x_k} \phi|_2 + b_\epsilon |\phi|_2.$$

D'altra parte si verifica facilmente (ad esempio utilizzando la trasformazione di Fourier) che per ogni j, k

$$|\Delta_{x_j - x_k} \phi|_2 \leq 2(|\Delta_{x_j} \phi|_2 + |\Delta_{x_k} \phi|_2).$$

Quindi si ha

$$\begin{aligned} |(\sum_j W_j + \sum_{j < k} V_{j,k}) \phi|_2 &\leq (N\epsilon + N(N-1)\epsilon) |\sum_j \Delta_{x_j} \phi|_2 + \frac{N(N-1)}{2} b_\epsilon |\phi|_2 \\ &\leq N^2 \epsilon |\sum_j \Delta_j \phi|_2 + C |\phi|_2. \end{aligned}$$

Scegliendo ϵ in modo che sia $N^2 \epsilon < I$, il risultato voluto segue dal teorema di Kato-Rellich.

♡

Il teorema di Kato-Rellich ha una parziale generalizzazione al caso $a = 1$.

Teorema 10.3

Se A è autoaggiunto e B simmetrico con $a = 1$,

$$|B\phi| \leq |A\phi| + b|\phi|, \quad \forall \phi \in D(A), \quad b > 0 \quad 10.8$$

allora $A + B$ (definito inizialmente su $D(A) \cap D(B)$) è essenzialmente autoaggiunto sul dominio di A .

◇

Dimostrazione

Sia $\xi \in \mathcal{H}$, $(A + B + i)^* \xi = 0$. Vogliamo dimostrare che $\xi = 0$.

Per ogni $t \in [0, 1)$ l'operatore tB è piccolo rispetto ad A . Dunque $A + tB$ è autoaggiunto con dominio $D(A)$, e dato $\xi \in \mathcal{H}$, esiste unico $\phi_t \in D(A)$, $|\phi_t| \leq |\xi|$ tale che

$$(A + tB + i)\phi_t = \xi.$$

Definiamo

$$\psi_t = \xi - (t - 1)B\phi_t. \quad 10.9$$

Si ha

$$|A\phi_t| \leq |(A + tB)\phi_t| + t|A\phi_t| + tb|\phi_t|,$$

quindi

$$|A\phi_t| \leq \frac{1}{1-t}|(A + tB)\phi_t| + \frac{tb}{1-t}|\phi_t|.$$

Dunque $(1-t)|A\phi_t|$ resta limitato per $t \rightarrow 1$. Sia

$$\eta \in D(A), \quad \lim_{t \rightarrow 1} (\psi_t - \xi, \eta) = \lim_{t \rightarrow 1} (1-t)(B\phi_t, \eta) = 0.$$

Essendo $D(A)$ denso, si deduce

$$\xi = w - \lim_{t \rightarrow 1} \psi_t, \quad (\xi, \xi) = \lim_{t \rightarrow 1} (\xi, \psi_t);$$

d'altra parte

$$(\xi, \xi) = ((A + tB + i)\phi_t, \xi) = (t - 1)(B\phi_t, \xi) = (\psi_t - \xi, \xi).$$

Il termine a sinistra è indipendente da t , quello a destra converge a zero in quel limite. Quindi $(\xi, \xi) = 0$ e $\xi = 0$.

♡

Come applicazione del teorema di Wurst dimostriamo che la hamiltoniana dell'oscillatore anarmonico

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + ax^4, \quad a > 0 \quad 10.10$$

è un operatore essenzialmente autoaggiunto su $C_0^\infty(R)$. La stessa dimostrazione può essere ripetuta per il caso in cui il termine x^4 venga sostituito con un polinomio il cui termine di ordine più elevato è pari e ha coefficiente positivo. Poniamo

$$N \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + x^2, \quad Y = x^4, \quad Z = cN^2 \quad 10.11$$

dove la costante c è scelta in seguito in modo opportuno (notiamo che N ha autovalori i numeri interi). Vogliamo dimostrare che

1) $N + Z$ è un operatore autoaggiunto

2) Y è piccolo rispetto a $N + Z$ pur di prendere c sufficientemente grande.

3) $|Z\phi| \leq |(N + Y + Z)\phi| + b|\phi|$ per un' opportuna scelta di b .

Dai punti 1),2),3) segue allora dal teorema di Wurst che $X+Y \equiv (X+Y+Z) - Z$ è essenzialmente autoaggiunto su $D(N + Y + Z)$. Si noti che l'introduzione dell'operatore Z serve a rendere Y piccolo rispetto a $X + Z$, un operatore del quale conosciamo i vettori analitici (notare che Y non è piccolo rispetto a X).
Conviene utilizzare le notazioni

$$\sqrt{2} a = x + \frac{d}{dx}, \quad \sqrt{2} a^* = x - \frac{d}{dx}, \quad -\frac{d^2}{dx^2} = 2a^*a + 1$$

Allora

$$Y \equiv \frac{1}{4}(a + a^*)^4 \quad 10.12$$

e si vede facilmente che, scegliendo sufficientemente grande la costante c nella definizione di Z , valgono le seguenti relazioni

$$|aN^{-1/2}| \leq 1, \\ |Y\phi| \leq 4|(N + 1)^2\phi| \leq \frac{1}{2}|(N + Z)\phi|.$$

Questo dimostra il punto 2).

Il punto 1) si dimostra facilmente perché $N + cN^2$ è una funzione continua dell'operatore autoaggiunto N .

Per dimostrare il punto 3) notiamo che si ha, svolgendo i facili calcoli

$$(N + Y + Z)^2 = (N + Y)^2 + Z^2 + 2cN^3 + 2cNYZ + 2c[N, [N, Y]] \\ \geq Z^2 + 2cN^3 + 2c[N, [N, Y]];$$

d'altra parte

$$[N, Y] = [N, (a + a^*)^4] = 4N(a - a^*)^3$$

quindi

$$[N[N, Y]] = 12(a + a^*)^2.$$

Dunque

$$(N + Y + Z)^2 \geq Z^2 + 2cN^3 - 3c(N + 1/2I)^2 \geq Z^2 - pI \quad 10.13$$

per p sufficientemente grande. Questo dimostra 3) e termina la dimostrazione dell'essenziale autoaggiuntezza di $-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + x^4$ su $D(N) \cap D(N^2)$.

♡

Il teorema di Kato-Rellich permette di verificare che alcuni operatori di Schrödinger con un potenziale vettoriale sono essenzialmente autoaggiunti su C_0^∞ . Si

ha ad esempio (utilizziamo la notazione $f \in X + Y$ per indicare che la funzione f può essere scritta come $f = f_1 + f_2$, $f_1 \in X, f_2 \in Y$).

Teorema 10.4

Se per $i, k = 1, 2, 3$ si ha

$$A_i \in L^4(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3), \quad \partial_i A_k \in L^4(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3), \quad V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3) \quad 10.14$$

allora

$$H \equiv (\nabla + A)^2 + V$$

è essenzialmente autoaggiunto su $C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \otimes C^3$.

◇

Dimostrazione

Dalle disuguaglianze dimostrate precedentemente segue che

$$V \prec\prec \Delta, \quad \nabla \cdot A \prec\prec \Delta, \quad A^2 \prec\prec \Delta.$$

Dobbiamo quindi dimostrare che

$$A \cdot \nabla \prec\prec \Delta. \quad 10.15$$

Dalla disuguaglianza di Schwarz si ha

$$\begin{aligned} |A_k \frac{\partial}{\partial x_k} \phi|_2 &\leq |A_k|_4 \left| \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \right|_4^{4/3} \leq |A_k|_4 |p_k \hat{\phi}|_{4/3} \\ &\leq |A_k|_4 |(1 + |p|)^{-\alpha}|_4 |(1 + |p|)^\alpha p_k \hat{\phi}|_2 \end{aligned}$$

per ogni valore del parametro α . Il secondo fattore è finito se $\alpha \geq 3/4$. D'altra parte si ha per ogni $a > 0$, se $\alpha < 1$ mentre b è scelto sufficientemente grande

$$|(1 + |p|^\alpha) p_i|^2 \leq a(|p|^2 + b)^2.$$

Dunque

$$|(I + |p|)^\alpha p \hat{\phi}(p)|_2 \leq |(-\Delta + b)\phi|_2$$

dove a può essere reso arbitrariamente piccolo pur di scegliere b sufficientemente grande.

♡

Una classe importante di potenziali che sono piccoli rispetto al laplaciano sono i *potenziali di classe Rollnik*.

Definizione 10.2

Un funzione $V(x)$, $x \in \mathbb{R}^3$, è detto *potenziale di tipo Rollnik* ($V \in \mathcal{R}$) se

$$|V|_{\mathcal{R}}^2 \equiv \int \frac{|V(x)||V(y)|}{|x - y|^2} d^3x d^3y < \infty. \quad (R)$$

◇

I potenziali di classe Rollnik formano uno spazio di Banach \mathcal{R} (ma non uno spazio di Hilbert). Infatti la condizione

$$\int \frac{|V(x) + aW(x)||V(y) + aW(y)|}{|x - y|^2} d^3x d^3y < \infty$$

implica che

$$\int \frac{V(x)W(y) + V(x)W(y)}{|x - y|^2} d^3x d^3y < |V|_R |W|_R,$$

e quindi

$$|V + W|_R^2 \leq (|V|_R + |W|_R)^2.$$

Nota 10.2

Una norma hilbertiana sarebbe associata al prodotto scalare

$$\langle V, W \rangle \equiv \int \frac{V(x)W(y)}{|x - y|^2} d^3x d^3y \quad 10.16$$

e sarebbe quindi data da (per funzioni reali)

$$|V|_0^2 = \int \frac{V(x)V(y)}{|x - y|^2} d^3x d^3y.$$

Si può notare che $|V|_0 \leq |V|_R$, e le due espressioni coincidono solo se $V(x)$ ha segno costante.

♣

Vi sono delle inclusioni naturali che sono di uso frequente. Ad esempio, in R^3

$$L^2 \cap L^1 \subseteq \mathcal{R}, \quad |V|_R \leq \sqrt{3}(2\pi)^{1/3} |V|_2^{2/3} |V|_1^{1/3}. \quad 10.17$$

Per dimostrare (10.17) si può notare che

$$\int_{|x-y|>r} \frac{|V(x)||V(y)|}{|x-y|^2} d^3x d^3y \leq \frac{1}{r^2} \left(\int_{|x-y|>r} |V(x)| d^3x \right)^2 \leq \frac{|V|_1^2}{r^2}$$

$$\int_{|x-y|\leq r} \frac{|V(x)||V(y)|}{|x-y|^2} d^3x d^3y \leq \int_{|x-y|\leq r} \frac{|V(x)|^2}{|x-y|^2} d^3x d^3y = 4\pi r |V|_2^2;$$

dunque per ogni $r > 0$ si ha

$$|V|_R \leq \frac{|V|_1^2}{r^2} + 4\pi r |V|_2^2$$

da cui, minimizzando rispetto ad r si ottiene (10.17).

In generale, se X è uno spazio di misura ed $f \in L^p(X)$, poniamo

$$f_>(x) = f(x)(1 - \eta_f(x)), \quad f_<(x) = f(x)\eta_f(x)$$

dove $\eta_f(x)$ è la funzione indicatrice dell'insieme $\{x : f(x) < 1\}$. È facile verificare che (omettiamo di indicare lo spazio di misura X e la misura μ)

$$f \in L^p \Rightarrow f_> \in L^q \quad \forall q \geq p, \quad f \in L^p \Rightarrow f_< \in L^q \quad \forall q \leq p. \quad 10.18$$

Poiché la classe dei potenziali di tipo Rollnik gioca un ruolo importante nell'analisi della regolarità delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger ed anche, come vedremo più avanti, nel loro comportamento asintotico per tempi grandi, è utile avere dei criteri che garantiscono che un potenziale sia di tipo Rollnik. Un tale criterio è dato ad esempio dalle stime

$$|V|_R \leq C_1|V|_{3/2}, \quad |V|_R^2 \leq C_2|V|_p|V|_q, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} + \frac{2}{3} = 2$$

dove C_1 e C_2 sono opportune costanti. In generale vogliamo dimostrare che per un'opportuna costante C (che dipende da p, q, n),

$$\int \frac{|f(x)||h(y)|}{|x-y|^\lambda} d^n x d^n y \leq C_3|f|_p|h|_q, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} + \frac{\lambda}{n} = 2, \quad \lambda < n. \quad 10.19$$

Per dimostrare (10.19) occorre utilizzare una disuguaglianza di Hölder *generalizzata*. Per utilizzare la disuguaglianza di Hölder usuale sarebbe necessario che $\frac{1}{|x|^\lambda} \in L^{1/s}(R)$, ma questo non è vero.

Tuttavia è vero che $\frac{1}{|x|^\lambda} \in L_w^{1/s}$ (cioè $L^{1/s}$ debole) definito come segue

$$f \in L_w^p \Rightarrow \mu(|f(x)| \geq s) < \frac{C}{s^p}$$

dove μ è la misura di Lebesgue su R e C è un'opportuna costante. Le seguenti disuguaglianze tipo Hölder si estendono al caso in cui *uno dei due fattori* è di tipo debole.

$$f \in L^p, \quad g \in L^q \Rightarrow f * g \in L^\infty, \quad |f * g|_\infty \leq |f|_p|g|_q \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1.$$

(abbiamo indicato con $*$ la convoluzione)

$$L^p * L^q \subset L^s, \quad |f * g|_s \leq |f|_p|g|_q \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 + \frac{1}{s}. \quad 10.20$$

Si noti ora che, se $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} + \frac{1}{r} = 2$, e se $r > 1$ si ha $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} > 1$. Ne segue che $f * g \in L^{r^*}$ se $1 < q < q^* < \infty$ (q^* è definito da $\frac{1}{q} + \frac{1}{q^*} = 2$).

Utilizzando ora il fatto che $|x-y|^{-\lambda} \in L_w^{1/\lambda}$ si ottiene la (10.9). Da (12.8) segue allora

$$L^p \cap L^q \subset \mathcal{R}, \quad p \leq 3/2 \leq q.$$

Notiamo ancora che, se $V \in L^1 \cap L^2$ si ha

$$\hat{V} \in L^\infty, \quad V(x)V(y) \in L^2(\mathbb{R}^6)$$

e quindi si può utilizzare la trasformata di Fourier, ottenendo

$$\int \frac{V(x)V(y)}{a^2 + |x-y|^2} d^3x d^3y = \frac{1}{4\pi} \int \frac{|\hat{V}(p)|^2 e^{-ap}}{|p|} d^3p \quad 10.21$$

Dunque, se $V \in L^1 \cap \mathcal{R}$ la funzione V appartiene ad uno spazio di Hilbert \mathcal{K} con prodotto scalare

$$\langle V, W \rangle \equiv \frac{1}{4\pi} \int \frac{(\hat{V})^*(p)\hat{W}(p)}{|p|} d^3p. \quad 10.22$$

Notare che $\|V\| \equiv \langle V, V \rangle^{1/2}$ è una norma equivalente (ma non uguale) a $|V|_{\mathcal{R}}$ sugli insiemi limitati di \mathcal{K} .

L'interesse dei potenziali di tipo Rollnik proviene tra l'altro dal fatto che, se $\alpha < 2$, si ha $|x|^{-\alpha} \in \mathcal{R} + L^\infty$.

Teorema 10.5

Se $V \in \mathcal{R} + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, allora $V \prec \prec \Delta$. Inoltre l'operatore

$$(-\Delta + V + E)^{-1} - (-\Delta + E)^{-1}$$

è compatto per E sufficientemente grande. ◇

Dimostrazione

Dimostriamo innanzitutto che

$$\lim_{E \rightarrow \infty} ||V|^{1/2}(-\Delta + E I)^{-1}|V|^{1/2}| = 0. \quad 10.23$$

Infatti il nucleo di questo operatore è

$$\frac{|V(x)|^{1/2} e^{-\sqrt{E}|x-y|} |V(y)|^{1/2}}{|x-y|}, \quad 10.24$$

e dunque, se $V \in \mathcal{R}$, l'operatore è di Hilbert-Schmidt. Il suo nucleo integrale tende a zero puntualmente per $x \neq y$ quando $E \rightarrow \infty$, e quindi tende a zero la sua norma Hilbert-Schmidt.

Utilizzando il teorema della convergenza dominata si ottiene (10.23). Da questo si deduce poi

$$\begin{aligned} \lim_{E \rightarrow \infty} |V|^{1/2}(-\Delta + E I)^{-1/2} &= 0 \\ \lim_{E \rightarrow \infty} |(-\Delta + E I)^{-1/2} V|(-\Delta + E I)^{-1/2} &= 0 \end{aligned} \quad 10.25$$

e dunque, uniformemente in ϕ

$$(\phi, |V|\phi) \leq a(E)(\phi, (-\Delta + E I)\phi), \quad \lim_{E \rightarrow \infty} a(E) = 0,$$

da cui l'asserto del primo punto del teorema. Si ha inoltre, almeno formalmente,

$$(H + E)^{-1} = (-\Delta + E)^{-1/2} [1 + (-\Delta + E)^{-1/2} V (-\Delta + E)^{-1/2}]^{-1} (-\Delta + E)^{-1/2} \quad 10.26$$

Se E è sufficientemente grande si ha

$$|(-\Delta + E)^{-1/2} V (-\Delta + E)^{-1/2}| < 1$$

e quindi si può iterare in (10.26) ottenendo la *serie di Born*

$$\begin{aligned} (H + E)^{-1} &= (-\Delta + E)^{-1/2} \\ &\cdot \left\{ 1 + \sum_n (-1)^n [(-\Delta + E)^{-1/2} V (-\Delta + E)^{-1/2}]^n \right\} (-\Delta + E)^{-1/2} \end{aligned}$$

che converge in norma per E sufficientemente grande. Inoltre da (10.24) si deduce che l'operatore

$$(H + E)^{-1} - (-\Delta + E)^{-1}$$

è compatto per E sufficientemente grande (è limite in norma di operatori di Hilbert-Schmidt). D'altra parte si vede che gli autovalori negativi $E_n < 0$ di H coincidono con gli autovalori zero dell'operatore

$$I - (-\Delta + E_n)^{-\frac{1}{2}} V (-\Delta + E_n)^{-\frac{1}{2}} \equiv I - K_{E_n} \quad 10.27$$

dove K_{E_n} è un operatore compatto per ogni E_n e tende a zero per $E_n \rightarrow \infty$. Le eventuali soluzioni del problema $K_E = 0$ sono quindi ristrette ad un intervallo finito (compatto) dell'asse reale e d'altra parte la funzione $E \rightarrow K_E$ è differenziabile con derivate non nulle. Quindi in un intervallo compatto esiste un numero finito (eventualmente zero) di soluzioni. Questo termina la dimostrazione del teorema 10.5.

♡

Seguendo la stessa traccia di dimostrazione, si dimostra

Corollario

Se $V \in \mathcal{R} + L_\epsilon^\infty$, allora $V \prec\prec \Delta$ e valgono le conclusioni del teorema 10.5. ♣

Nello stesso modo si dimostra

Teorema 10.6

Se $V \in \mathcal{R}$, allora $|V|^{1/2} \prec\prec (-\Delta + 1)^{1/2}$. ◇

Sempre nell'ambito delle condizioni che garantiscono $V \prec\prec -\Delta$ conviene anche ricordare la proposizione seguente

Proposizione 10.7

Se $d \geq 4$, $V \in L^p$, $p > d/2$, allora $V \prec\prec -\Delta$. ◇

Dimostrazione

La funzione $(1 + k^2)^{-1}$ appartiene a $L^p(\mathbb{R}^d)$ se $p > d/2$; se $u \in D(\Delta)$ ne concludiamo

$$|\hat{u}|_q \leq |(1 + k^2)\hat{u}(k)|_2 |(1 + k^2)^{-1}|_p, \quad \frac{1}{q} + \frac{1}{p} = \frac{1}{2}.$$

Ne segue che se $V \in L^p$ e $u \in D(\Delta)$ allora $Vu \in L^2$. Inoltre per ogni $t > 0$

$$|Vu|_2 \leq |V|_p |(1 + tk^2)^{-1}|_p |(1 + tk^2)\hat{u}|_2 \quad 10.28$$

Prendendo t sufficientemente grande si deduce

$$V \prec\prec -\Delta$$

e si può ottenere una stima esplicita della norma $|Vu|_2$ rispetto a $|\Delta u|_2$. ♥

Il teorema di Kato-Rellich è sufficiente per molte applicazioni, ma non è ottimale perché non sfrutta appieno le proprietà *locali* del potenziale. Per questo conviene introdurre una classe di potenziali che tengono conto di queste proprietà: la *classe di Stummel*.

Definizione 10.3

Una funzione $V(x)$ su \mathbb{R}^d misurabile secondo Lebesgue è detta essere della classe di Stummel S_d se le seguenti condizioni locali sono soddisfatte

1) se $d = 1, 2, 3$

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int_{|x-y| \leq 1} |V(y)|^2 dy < \infty \quad \forall x;$$

2) se $d = 4$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \sup_{x \in \mathbb{R}^4} \int_{|x-y| \leq \alpha} \log(|x-y|)^{-1} |V(y)|^2 dy < \infty;$$

3) se $d \geq 5$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int_{|x-y| \leq \alpha} \frac{|V(y)|^2}{|x-y|^{d-4}} dy < \infty$$

◇

Nota 10.3

Condizioni *sufficienti* affinché il potenziale V appartenga a S_d sono:

- se $d \leq 3$, $V \in L^2_{unif}$
- se $d \geq 4$, $V \in L^p_{unif}$, $p > d/2$.

(qui $V \in L^p_{unif}$ indica che $V \in L^p_{loc}$ e inoltre $\sup_{|x-y| \leq 1} |V(x)|^p dy < \infty$).

♣

Per analizzare i potenziali di tipo Rollnik utilizzeremo il seguente risultato che ha un interesse indipendente

Lemma 10.8

Sia Ω uno spazio di misura e sia K una funzione su $\Omega \times \Omega$ tale che $K(x, y) = K_1(x, y) K_2(x, y)$, con $x, y \in \Omega$ e sia

$$\sup_{x \in \Omega} \int_{\Omega} |K_1(x, y)|^2 dy \equiv C_1^2 < \infty; \quad \sup_{y \in \Omega} \int_{\Omega} |K_2(x, y)|^2 dx \equiv C_2^2 < \infty. \quad 10.29$$

Allora l'operatore K_{op} il cui nucleo è $K(x, y)$ è limitato in $L^2(\Omega)$ e la sua norma soddisfa $\|K_{op}\| \leq C_1 C_2$.

◇

Dimostrazione

Per ogni $\phi, \psi \in L^2(\Omega)$ utilizzando ripetutamente la disuguaglianza di Schwartz si ha

$$\begin{aligned} |(\phi, K\psi)| &\leq \int |K(x, y)| |\phi(x)| |\psi(y)| dx dy \\ &\leq \left(\int |K_1(x, y)|^2 |\phi(x)|^2 dx dy \right)^{1/2} \left(\int |K_2(x, y)|^2 |\psi(y)|^2 dx dy \right)^{1/2} \\ &\leq \left[\left(\int |\phi(x)|^2 dx \right) \sup_x \int |K_1(x, y)|^2 dy \right]^{1/2} \\ &\quad \cdot \left[\left(\int |\psi(y)|^2 dy \right) \sup_y \int |K_2(x, y)|^2 dx \right]^{1/2} \\ &= C_1 C_2 |\phi|_2 |\psi|_2. \end{aligned}$$

♡

Con queste notazioni si ha il teorema

Teorema 10.9

Se $V \in S_d$ allora $V \prec\prec \Delta$ e quindi $H \equiv -\Delta + V$ è essenzialmente autoaggiunto su C_0^∞ . Inoltre $D(H) = D(-\Delta + V) = H^2(R^d)$.

◇

Dimostrazione

Per dimostrare il teorema 10.9 utilizzeremo la rappresentazione

$$(e^{t\Delta}\phi)(x) = (4\pi t)^{-d/2} \int_{R^d} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} \phi(y) dy, \quad t > 0. \quad 10.30$$

Indichiamo con $R_0(z, x)$ il nucleo integrale della risolvente

$$(H_0 - z)^{-1} = \int_0^\infty e^{-(H_0 - z)t} dt, \quad \Re z < 0$$

Per $d = 1, 2, 3$ si deducono da (10.30) le formule esplicite, se $z \in C^+$

- $d = 1$ $R_0(z, x) = i \frac{e^{i|x|z}}{2\sqrt{z}}, \quad x \in R$
- $d = 2$ $R_0(z, x) = \frac{e^{i|x|\sqrt{z}}}{2\pi|x|} \log |x| \quad x \in R^2$
- $d = 3$ $R_0(z, x) = \frac{e^{i|x|\sqrt{z}}}{4\pi|x|}, \quad x \in R^3$

Se $d \geq 3$ si ha $|R_0(z, x)| < C|x|^{-d-2}$. Inoltre per ogni d

$$|x| \geq \delta, \quad \Re z < -\delta \quad \Rightarrow \quad |R_0(z, x)| < C e^{(-1+\epsilon)\sqrt{|\Re z||x|}}. \quad 10.31$$

Queste stime seguono da calcoli espliciti e dalla disuguaglianza quadratica

$$\frac{|x|^2}{4t} + Et \geq |x| \sqrt{E},$$

che implica, per ogni $\epsilon > 0$

$$|R_0(z, x)| \leq e^{-(1-\epsilon)|x|\sqrt{E}} \int_0^\infty (4\pi t)^{-\frac{d}{2}} e^{-\epsilon(\frac{|x|^2}{4t} + Et)} dt = C e^{-(1-\epsilon)E|x|}. \quad 10.32$$

Si noti che $R_0(z, \cdot)$ definisce per convoluzione un operatore limitato e quindi è sufficiente dimostrare le identità per l'insieme denso $C_0^\infty(R^d)$.

Per quanto riguarda l'operatore $(-\Delta - z)^2$, $\Re z < 0$, il suo nucleo integrale è dato da

$$Q_0(z, x) \equiv (2\pi)^{-\frac{d}{2}} \int_0^\infty t^{-\frac{d-2}{2}} e^{-\frac{|x|^2}{4t}} e^{zt} dt$$

e si ha

- $d \leq 3$ $|Q_0(z, x)| < C$
- $d = 4$ $|Q_0(z, x)| < C \log(|x|^{-1} + 1)$
- $d \geq 5$ $|Q_0(z, x)| \leq C |x|^{-d+4}$

e inoltre, per ogni valore di d

$$|x| \geq \delta, \quad \Re z < -\delta \quad \Rightarrow \quad |Q_0(z, x)| \leq C e^{-(1-\epsilon)|x|\sqrt{\Re z}}. \quad 10.33$$

Notiamo che

$$V(-\Delta + E)^{-2}V = [V(-\Delta + E)]^{-1}[(-\Delta + E)V]^{-1}$$

ha nucleo integrale

$$V(x)Q_0(-E, x-y)V(y) \equiv K_1^E(x, y)K_2^E(x, y)$$

dove K_1^E e K_2^E sono rispettivamente i nuclei integrali di $V(-\Delta + E)^{-1}$ e di $(-\Delta + E)^{-1}V$.

Per stimare la quantità $\sup_{x \in \mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |K_1(x, y)|^2 dy$ dividiamo il dominio di integrazione in due parti: $|x-y| > \alpha$ e $|x-y| \leq \alpha$. Poiché $V \in S_d$, quindi $V \in L_{loc}^2$ il contributo della prima regione d'integrazione è limitato da

$$\frac{C'}{\alpha} \int_{|x-y| > \alpha} e^{-2\sqrt{E}|x-y|} dy \leq \frac{C'}{\alpha \sqrt{E}}.$$

Per stimare il contributo della seconda regione d'integrazione è possibile utilizzare le stime che abbiamo descritto per le risolventi; nel caso di potenziali di classe Rollnik, in particolare, da (10.33), se α è sufficientemente piccolo, questo contributo è limitato da un termine $\epsilon(\alpha)$ uniformemente in x ed $E > \delta$ con $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \epsilon(\alpha) = 0$. Pertanto, prendendo $\alpha(E)$ tale che $\lim_{E \rightarrow \infty} \alpha(E) = 0$ e pure $\lim_{E \rightarrow 0} \alpha(E)\sqrt{E} = \infty$,

$$\lim_{E \rightarrow \infty} \sup_x \int |K_1^E(x, y)|^2 dy = 0.$$

Con ragionamento analogo si ottiene

$$\lim_{E \rightarrow \infty} \sup_y \int |K_2^E(x, y)|^2 dx = 0. \quad 10.34$$

D'altra parte per tutti i vettori $\phi \in L^2$ si ha

$$|V\phi|_2 \leq |V(-\Delta + E)^{-1}|\Delta\phi|_2 + E|V(-\Delta + E)^{-1}|\phi|_2. \quad 10.35$$

e questo conclude la dimostrazione del teorema 10.9.

♡

In tutti gli esempi visti finora risulta $D(H) = D(\Delta)$. Vi sono casi interessanti nei quali $D(H) \neq D(\Delta)$ ma tuttavia H è essenzialmente autoaggiunto su $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$. Nella maggior parte di questi casi si sfruttano altre proprietà dei nuclei integrali, come ad esempio *il preservare la positività*.

Faremo uso nel seguito della disuguaglianza seguente dovuta ancora a Kato.

Lemma 10.10 (Kato)

Sia $u \in L_{loc}^1(\mathbb{R}^d)$, $\Delta u \in L_{loc}^1$. Definiamo come d'abitudine la funzione $\text{sign } u$ nel modo seguente: se $u(x_0) \neq 0$ allora $(\text{sign } u)(x_0) = \frac{u(x_0)}{|u(x_0)|}$. Se $u(x_0) = 0$ allora $(\text{sign } u)(x_0) = 0$. Definiamo anche $\epsilon(u) \equiv u \text{sign } u$ nel senso delle distribuzioni. Allora

$$\Delta|u| \geq [(\text{sign } u) \Delta u] \quad 10.36$$

nel senso delle distribuzioni.

◇

Dimostrazione

Supponiamo $u \in C^\infty$ e definiamo

$$u_\epsilon(x) \equiv \sqrt{|u(x)| + \epsilon^2}. \quad 10.37$$

Allora $u_\epsilon \in C^\infty$ e si ha

$$2\bar{u}_\epsilon \cdot \nabla u_\epsilon = \nabla|u_\epsilon|^2 = \nabla|u|^2 = 2\Re(\bar{u} \nabla u)$$

e quindi

$$|\nabla u_\epsilon| \leq |\nabla u|. \quad 10.38$$

Differenziando rispetto ad x l'identità (10.37) ed utilizzando la (10.38) si ottiene

$$\Delta u_\epsilon \geq \Re\left(\frac{\bar{u}}{u_\epsilon} \Delta u\right).$$

Poiché u_ϵ converge ad $|u|$ in L_{loc}^1 quando $\epsilon \rightarrow 0$, si ha che $\Delta u_\epsilon \rightarrow \Delta|u|$ nel senso delle distribuzioni. Inoltre $\frac{\bar{u}}{u_\epsilon} \Delta u \rightarrow (\text{sign } u) \Delta u$ in L_{loc}^1 . Quando $\epsilon \rightarrow 0$ si ottiene (10.36).

Nel caso generale, consideriamo una regolarizzata di u definita da

$$U^\delta = (u * j_\delta)(x), \quad j_\delta(x) = \delta^{-d} j\left(\frac{x}{\delta}\right), \quad \delta > 0, \quad j_\delta \in C_0^\infty, \quad \int j_\delta(x) dx = 1.$$

Poiché $u * j_\delta$ è regolare, per questa funzione vale (10.36).

Passando al limite $\epsilon \rightarrow 0$ e poi $\delta \rightarrow 0$ si ottiene (10.36) per ogni $u \in L_{loc}^1$ tale che $\Delta u \in L_{loc}^1$.

♡

Con questa preparazione possiamo ora dimostrare

Teorema 10.11

Sia

$$V(x) = V_+(x) - V_-(x), \quad \text{con } V_{\pm} > 0, \quad V_+ \in L^2_{loc}(\mathbb{R}^d), \quad V_- \prec -\Delta.$$

Allora $-\Delta + V$ è essenzialmente autoaggiunto su C_0^∞ .

◇

Dimostrazione

Dobbiamo dimostrare che, per almeno un valore del parametro positivo μ , si ha

$$u \in L^2, \quad (-\Delta + V + \mu)u = 0 \quad \Rightarrow \quad u = 0. \quad 10.39$$

Se vale (10.39) nelle ipotesi del teorema si ha

$$\Delta u = (V + \mu)u \in L^1_{loc}.$$

Dal Lemma 10.10 sappiamo che

$$\Delta|u| \geq \Re \operatorname{sign}(\bar{u})(V + \mu)u = (V + \mu)|u|_\infty \geq (-V_- + \mu)|u|_\infty \geq 0$$

Ne segue

$$(-\Delta - V_- + \mu)|u| \leq 0$$

e quindi anche, tenendo presente che il nucleo di $(-\Delta + \mu)$ preserva la positività,

$$(-\Delta + \mu)^{-1}(-\Delta - V_- + \mu)|u| \leq 0.$$

Da questo si deduce $|u| \leq (-\Delta + \mu)^{-1}V_-|u|$. D'altra parte, scegliendo μ sufficientemente grande

$$|(-\Delta + \mu)^{-1}V_-|u|_2 \leq \left(a + \frac{b}{\mu}\right)|u|_2 < |u|_2$$

e pertanto

$$|u|_2 \leq |(-\Delta + \mu)^{-1}V_-|u|_2 \leq \left(a + \frac{b}{\mu}\right)|u|_2 < |u|_2$$

e quindi $|u|_2 = 0$, $u = 0$. In queste ultime formule abbiamo distinto la norma in L^2 di u , indicata con $|u|_2$ dall'estremo superiore del valore assoluto della funzione $u(x)$ indicato con $|u|$.

♡

Nota 10.4

Data la condizione di positività di V_1 , la condizione su V_2 segue anche dalla seguente considerazione. Se V è positivo, dal teorema segue che $-\Delta_V$ è autoaggiunto su C_0^∞ . D'altra parte, essendo V positivo, da $W \prec -\Delta$ segue

$W \ll -\Delta + V$ e quindi si può concludere dal teorema di Kato-Rellich che $-\Delta + V + W$ è essenzialmente autoaggiunto su C_0^∞ .



Nota 10.5

Notiamo esplicitamente che nel teorema 10.11 ha giocato un ruolo essenziale il fatto che la parte del potenziale che non è piccola nel senso di Kato rispetto al laplaciano sia una funzione positiva, insieme al fatto che l'operatore $(-\Delta + \mu)^{-1}$ lascia invariante il cono delle funzioni positive.

Dal punto di vista astratto, per la validità del teorema 10.11 è sufficiente che esista in H un *cono convesso* (nel caso particolare che abbiamo trattato, il cono delle funzioni positive) che è lasciato invariante da e^{-tH_0} e da V_1 con $V - V_1 \ll H_0$.

I criteri di positività che discuteremo nel seguito (cap. 19) possono essere messi in questa forma astratta. Noi non lo faremo qui perché vogliamo utilizzare anche altre proprietà della struttura concreta del cono delle funzioni positive.

È tuttavia importante tenere presente questo ruolo centrale dei coni convessi invarianti per l'azione di H_0 e V_1 ; estensioni al caso non commutativo (algebre C^*) di operatori ellittici in particolare delle *forme di Dirichlet* potranno essere fatte tenendo presente che anche in un'algebra C^* esiste sempre un cono positivo convesso, quello degli elementi positivi.

Anche in quel contesto più generale sarà quindi rilevante lo studio di quelle applicazioni che lasciano invariante il cono degli elementi positivi.

Nel capitolo dedicato ai semigruppì abbiamo già visto proprietà dei semigruppì positivi o completamente positivi. Ma in quel contesto non ci siamo posti il problema di un'applicazione alla teoria dell'operatore di Schrödinger che vedremo invece nel cap. 19.



Esempi

Esempi di potenziali che soddisfano le ipotesi del Teorema 10.11 sono dati da $V = P(x)$, dove $P(x)$ è un polinomio limitato dal basso, ed ancora $V(x) = \frac{C}{|x|^2}$ $x \in R^5$, $C > 0$.

Notiamo esplicitamente che nel teorema si può sostituire la decomposizione in parte positiva e parte negativa del potenziale con una decomposizione $V = V_> + V_<$ dove $V_>$ è limitato dal basso e soddisfa le ipotesi precedentemente fatte su V_+ mentre $V_<$ è limitato dall'alto e soddisfa le ipotesi precedentemente fatte su V_- .

In effetti si può sostituire nel teorema al posto di $\Delta + V$ l'operatore $-\Delta + V - M$ con M un numero reale arbitrario; questo si vede facilmente se si considera che tutte le stime vengono fatte su $(-\Delta + V + \lambda)^{-1}$ con λ reale positivo e arbitrariamente grande.

Come abbiamo notato la positività di V viene utilizzata unitamente al fatto che $e^{t\Delta}$ ha un nucleo che preserva la positività. Per questo è interessante notare il seguente teorema, che si riferisce ad un generico operatore H_0 .

Teorema 10.12 (Davies, Faris)

Sia H_0 un operatore positivo su $L^2(X, d\mu)$ e tale che e^{-tH_0} preservi la positività per ogni $t \geq 0$. Sia $V \geq 0$, e supponiamo che $H = H_0 + V$ sia essenzialmente autoaggiunto su $D(H_0) \cap D(V)$. Sia W un operatore piccolo rispetto a H_0 . Allora W è piccolo anche rispetto a H .

◇

Dimostrazione

Sia $\|W(H_0 + b)^{-1}\| \leq a$. Dobbiamo dimostrare che $\|W(H + b)^{-1}\| \leq a$. Notiamo innanzitutto che se A è limitato e preserva la positività, allora $|A\phi|(x) \leq A|\phi|(x)$. Infatti

$$A|\phi| = A\phi_+ + A\phi_-, \quad A\phi = A\phi_+ - A\phi_-$$

da cui localmente

$$|A\phi| = \sup\{A\phi_+, A\phi_-\} \leq A|\phi|.$$

Poiché per $t \geq 0$ l'operatore e^{-tH_0} preserva per ipotesi la positività, anche $(H_0 + b)^{-1}$ la preserva (poiché $(H_0 + b)^{-1} = \int e^{-tH_0 - tb} dt$). Dunque basta dimostrare

$$|W(H_0 + b)^{-1}\phi|_2 \leq a|\phi|_2 :$$

e questo segue se dimostriamo che localmente, per $\phi(x) \geq 0$,

$$0 \leq ((H + b)^{-1}\phi)(x) \leq ((H_0 + b)^{-1}\phi)(x). \quad 10.40$$

Per dimostrare (10.40) notiamo che

$$\phi(x) \geq 0 \quad \Rightarrow \quad (e^{-sH_0}(1 - e^{-sV})\phi)(x) \geq 0. \quad 10.41$$

Dunque

$$0 \leq (e^{-sH_0}e^{-sV}\phi)(x) \leq (e^{sH_0}\phi)(x),$$

e quindi

$$0 \leq ((e^{-tH_0/n}e^{-sV/n})^n\phi)(x) \leq (e^{-tH_0}\phi)(x),$$

da cui passando al limite per $n \rightarrow \infty$

$$0 \leq (e^{-tH}\phi)(x) \leq (e^{-tH_0}\phi)(x). \quad 10.42$$

La (10.40) si ottiene ora dalla (10.42) mediante la trasformata di Laplace.

♡

Corollario (Davies, Faris, Kato-Rellich)

Sia $V_+ \in L^2_{loc}$ e $V_- \in L^p + L^\infty$, con rispettivamente $p = 2$ se $d \leq 3$, $p > 2$ se $d = 4$, $p = d/2$ se $d \geq 5$.

Allora $-\Delta + V$ è essenzialmente autoaggiunto su C_0^∞ .

◇

10.1 SPETTRO ESSENZIALE

Definizione 10.4

Lo *spettro essenziale* di un operatore autoaggiunto A , indicato con $\sigma_{ess}(A)$, è la chiusura dell'insieme $\sigma(A) - I(A)$ dove $I(A)$ è la collezione degli autovalori di A che hanno molteplicità finita.

◇

Il ruolo dello spettro essenziale è particolarmente importante nella teoria dello scattering: come vedremo nel cap. 17 si ha completezza asintotica se e solo se lo spettro essenziale è assolutamente continuo.

Nel seguito indicheremo con H_0 un operatore di riferimento (nella maggior parte delle applicazioni sarà l'operatore $-\Delta$) e con V un operatore di perturbazione (ad esempio l'operatore di moltiplicazione per una funzione misurabile).

Abbiamo visto che se V è piccolo nel senso di Kato rispetto a H_0 , allora $H \equiv H_0 + V$ è essenzialmente autoaggiunto su $D(H_0)$. Vogliamo ora dimostrare un importante teorema di confronto dello spettro di H con quello di H_0 : esso risulterà utile nel caso in cui si confronti lo spettro dell'operatore di Schrödinger $-\Delta + V$ con quello di Δ . Noi siamo interessati in particolare a criteri che ci assicurino che gli spettri essenziali coincidano.

Iniziamo il confronto tra gli spettri di due operatori A e B dimostrando

Proposizione 10.13

Se due operatori limitati A e B non hanno spettro puntuale, e $A - B$ è un operatore compatto, allora $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$.

◇

Dimostrazione

Sia $K \equiv A - B$ un operatore compatto. Definiamo

$$F(z) \equiv K(A - z)^{-1}, \quad z \in C \setminus \sigma(A). \quad 10.43$$

La funzione $F(z)$ è analitica a valori operatori compatti e $\lim_{|z| \rightarrow \infty} |F(z)| = 0$. In particolare $(I - F(z))^{-1}$ esiste per $|z|$ sufficientemente grande. Per il teorema analitico di Fredholm, $(I - F(z))^{-1}$ esiste per $z \in C \setminus (\sigma(A) \cup D)$ dove D è un insieme discreto. Inoltre $(I - F(z))^{-1}$ è meromorfa in $C \setminus \sigma(A)$ con residui di rango finito in D . Se $I - F(z)$ è invertibile, si ha

$$(B - z)^{-1} = (A - z)^{-1}(I - F(z))^{-1}.$$

Ne segue

$$\sigma(B) \subset \sigma(A) \cup D. \quad 10.44$$

Osserviamo ora che $(B - z)^{-1}$ ha residui di rango finito nei punti di D : perciò $D \in \sigma_{disc}$. Per l'ipotesi fatta, $D = \emptyset$ e quindi $\sigma_{ess}(A) \subset \sigma_{ess}(B)$. Scambiando i ruoli di A e di B , la proposizione è dimostrata.



Nota 10.6

Nello studio dell'equazione di Schrödinger si vorrebbe utilizzare questa Proposizione ponendo $A = (H - z)^{-1}$, $B = (H_0 - z)^{-1}$; nel caso di operatori limitati dal basso, si può scegliere z in un intervallo dell'asse reale. È quindi necessario estendere la Proposizione al caso in cui lo spettro discreto di A e B sia non vuoto.



Teorema 10.14 (prima forma del teorema di confronto di Weyl)

Siano A, B due operatori autoaggiunti e limitati dal basso.

Se esiste un $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$ tale che l'operatore $\frac{1}{A-z} - \frac{1}{B-z}$ sia compatto, allora $\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B)$.



Dimostrazione

Notiamo che dall'identità di risolvente segue che, se l'ipotesi è verificata per un valore di $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$, allora essa è verificata per *ogni* $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$. Sia z_0 reale, $z_0 \in \rho(A) \cap \rho(B)$. Tale z_0 esiste per l'ipotesi di semilimitatezza dal basso fatta su A e B . Inoltre, dalla rappresentazione spettrale, risulta che

$$\sigma_{ess}(A) = \sigma_{ess}(B) \quad \Leftrightarrow \quad \sigma_{ess}((A - z_0)^{-1}) = \sigma_{ess}((B - z_0)^{-1}). \quad 10.45$$

Poniamo

$$E \equiv (A - z_0)^{-1}, \quad F \equiv (B - z_0)^{-1}. \quad 10.46$$

Per ipotesi $E = F + K$ con K compatto. Quindi la funzione $K(E - z)^{-1}$ è analitica e a valori operatori compatti e meromorfa in $C \setminus \sigma_{ess}(A)$ con residui che sono operatori di rango finito.

Per $z \notin \sigma(E)$ la funzione $(F - z)^{-1}$ è definita se e solo se $[1 - K(E - z)^{-1}]^{-1}$ esiste. D'altra parte $(F - z)^{-1}$ è analitica per $Im z \neq 0$ e anche per $z = z_0$. Dalla teoria di Fredholm meromorfa segue allora che $[1 - K(E - z)^{-1}]^{-1}$ è definito su $C \setminus \sigma_{ess}(E)$ ad eccezione al più di per un insieme finito di punti, nei quali ha come residuo operatori di rango finito. Dunque $(F - z)^{-1}$ esiste su $C \setminus \sigma_{ess}(E)$ ad eccezione al più di un numero finito di punti, nei quali ha residuo operatori di rango finito. Ne segue che $\sigma_{ess}(F) \subset \sigma_{ess}(E)$.

Scambiando il ruolo di E ed F si conclude la dimostrazione del teorema.



Seguendo la traccia della dimostrazione del Teorema 10.14 si può dimostrare il seguente Teorema

Teorema 10.15 (seconda forma del teorema di confronto di Weyl)

Sia A autoaggiunto e B chiuso e simmetrico, e supponiamo che per un valore $z_0 \in \rho(B) \cap \rho(A)$ (e quindi per ogni $z \in \rho(B) \cap \rho(A)$) l'operatore $(A - z_0)^{-1} - (B - z_0)^{-1}$ sia compatto. Assumiamo inoltre

$$\text{a) } \sigma(A) \neq R, \quad \rho(B) \neq \emptyset$$

b) $\rho(B)$ interseca sia il semipiano $\Im m z < 0$ che il semipiano $\Im m z > 0$.

$$\text{Allora } \sigma_{ess}(B) = \sigma_{ess}(A).$$

◇

Non daremo la dimostrazione di questo teorema (vedere ad esempio il volume IV di [23]). Notiamo che nei Teoremi 10.14 e 10.15 la condizione che A sia autoaggiunto è necessaria, come si vede dall'esempio seguente.

Esempio

Sia $\mathcal{H} \equiv l^2(-\infty, \infty)$, con ϕ_n una base ortonormale, e definiamo $A\phi_n = \phi_{n+1}$. Sia C definito da

$$C\phi_n = \delta_{n,0}\phi_1.$$

Dunque C è una perturbazione di rango uno. Poniamo $B \equiv A - C$. Dimostriamo che

$$\text{i) } \sigma(A) = \sigma_{ess} = \{z \mid |z| = 1\}$$

$$\text{ii) } \sigma(B) = \sigma_{ess}(B) = \{z \mid |z| \leq 1\}$$

Per dimostrare i) consideriamo l'applicazione U (inversa della trasformazione di Fourier discreta) definita da

$$\{\phi_n\} \rightarrow (\sqrt{2\pi})^{-1} \sum_n \phi_n e^{inx}, \quad l^2(-\infty, \infty) \rightarrow L^2(0, 2\pi). \quad 10.47$$

Allora $UAU^* = e^{-ix}$, e dunque

$$\sigma(A) = \{e^{-ix} \mid x \in R\} = \{z, |z| = 1\}; \quad 10.48$$

inoltre $\sigma(A)$ è assolutamente continuo.

Per determinare $\sigma(B)$ (cioè provare ii)) notiamo che $(B - z)^{-1}$ esiste se e solo se $(1 - C(A - z)^{-1})^{-1}$ esiste. Questo richiede che $C(A - z)^{-1}$ non abbia l'autovalore 1. Dunque z non deve essere autovalore di B .

Sia $(B - z)\phi = 0$, o equivalentemente

$$\phi_{n+1} - \delta_{n,0}\phi - z\phi_n = 0. \quad 10.49$$

Sia $z \neq 0$. Per $n = 0$ si ha $\phi_0 = 0$, e da (10.30) segue che $\phi_n = 0$, $n < 0$.

Inoltre $\phi_n = z^{n-1}$, per $n \geq 1$. Dunque, se $|z| > 1$ l'equazione $(B - z)\phi = 0$ non ha soluzione in l^2 mentre ha soluzione se $|z| < 1$. Ne segue che

$$\rho(B) \equiv \{z, |z| \geq 1\}, \quad \sigma(B) = \sigma_{ess}(B) = \{z, |z| < 1\}. \quad 10.50$$

♡

Dalla prima forma del teorema di confronto di Weyl si deduce infine il seguente importante risultato.

Corollario al Teorema 10.14

Sia A un operatore simmetrico con indici di difetto (m, m) con $m < \infty$. Siano A_1 e A_2 estensioni autoaggiunte di A . Allora $\sigma_{ess}(A_1) = \sigma_{ess}(A_2)$.

◇

Dimostrazione

Se $\psi \in \text{Ran}(A^* - i)$ si ha $\psi = (A^* + i)\phi$, $\phi \in D(A)$ e quindi

$$((A_1 + i)^{-1} - (A_2 + i)^{-1})\phi = 0.$$

Dunque $(A_1 + i)^{-1} - (A_2 + i)^{-1}$ ha rango finito.

♡

Definizione 10.5

Diciamo che l'operatore K è relativamente compatto rispetto all'operatore A se $(A - z_0)^{-1}K$ è compatto per un valore di $z_0 \in \rho(A)$ (e quindi per ogni $z \in \rho(A)$).

◇

Nota 10.7

Sia K relativamente compatto rispetto ad A , e poniamo $B \equiv A + K$. Non è difficile dimostrare che B è chiuso su $D(A)$ e, se K è simmetrico, che B è autoaggiunto su $D(A)$. Dal teorema 10.15 segue allora che $\sigma_{ess}(B) = \sigma_{ess}(A)$.

♣

Nota 10.8

Il teorema *non afferma* che lo spettro puntuale di A coincida con lo spettro puntuale di B . È possibile dimostrare che, per ogni scelta della costante ϵ , è possibile trovare operatori A, B con $\|A\| = \|B\| = 1$ tali che A abbia spettro continuo (e anche assolutamente continuo), B abbia spettro puramente puntuale, $C \equiv A - B$ sia di classe traccia, con traccia minore di ϵ .

Conviene anche notare che in dimensioni 1 e 2 l'operatore $-\Delta + \epsilon V_\omega(x)$ ha spettro totalmente discreto per qualunque valore diverso da zero del parametro ϵ , e per quasi tutte le realizzazioni ω di un campo gaussiano casuale (ad esempio $\sum_i \xi_i V(x - x_i)$, dove x_i sono i punti di un reticolo regolare e ξ_i sono variabili gaussiane indipendenti ed egualmente distribuite).

♣

Teorema 10.16

Sia H_0 autoaggiunto, V simmetrico, $V \prec H_0$. Supponiamo che $V(H_0 - z)^{-1}$ sia compatto per almeno un valore di $z \in \rho(H_0)$. Allora lo spettro essenziale di $H = H_0 + V$ coincide con lo spettro essenziale di H_0 .

◇

Dimostrazione

Per la dimostrazione faremo uso del seguente Lemma di Weierstrass (si veda ad esempio in [34]); la sua dimostrazione utilizza sia il fatto che un operatore compatto è limite in norma di una successione di operatori di rango finito, quanto la versione per matrici finite del lemma stesso.

A sua volta il lemma di Weierstrass per le matrici si dimostra notando che la funzione a valori matrici $(I - F(z))$ è invertibile se $\det(I - F(z)) \neq 0$, ed utilizzando il Lemma di Weierstrass sugli zeri di una funzione analitica.

Lemma 10.17 (Weierstrass)

Sia Ω un aperto del piano complesso, e per ogni z appartenente ad Ω sia $F(z)$ un operatore compatto. Supponiamo che la funzione $F(z)$ sia analitica in Ω nella topologia uniforme.

Allora si ha la seguente alternativa: o la funzione $I - F(z)$ non è invertibile per alcun valore di $z \in \Omega$, oppure essa è invertibile nell'insieme $\Omega - J$ dove J è un insieme discreto numerabile senza punti di accumulazione in Ω .

◇

Utilizzando questo lemma, dimostriamo il Teorema 10.16 Dimostriamo innanzitutto che

$$\sigma_{ess}(H_0 + V) \subset \sigma_{ess}(H_0). \quad 10.51$$

Se $\sigma(H_0) = R$, l'inclusione è ovvia. Quindi possiamo assumere che $C \setminus \sigma_{ess}(H_0)$ sia aperto. Sia I un intervallo finito tale che $I \cap \sigma_{ess}(H_0) = \emptyset$. Dobbiamo dimostrare che $I \cap \sigma_{ess}(H_0 + V) = \emptyset$. Applicheremo il lemma di Weierstrass alla funzione $V(H_0 - z)^{-1}$ su $\Omega \equiv C \setminus \sigma(H_0)$. Dobbiamo verificare che

- a) $V(H_0 - z)^{-1}$ è compatto per ogni $z \in \Omega$
- b) $I + V(H_0 - z)^{-1}$ è invertibile per ogni $z \in \Omega$.

Per dimostrare a), notiamo che sussiste l'identità

$$V(H_0 - z)^{-1} = V(H_0 - \zeta)^{-1} (H_0 - \zeta) (H_0 - z)^{-1} \quad \forall z, \zeta \in \Omega. \quad 10.52$$

Per ipotesi, esiste un valore di z per il quale $V(H_0 - z)^{-1}$ è compatto. Ma per ogni scelta di $z, \zeta \in \Omega$ l'operatore $(H_0 - \zeta)(H_0 - z)^{-1}$ è limitato. Questo dimostra il punto a).

Per quanto riguarda il punto b), basta dimostrare che, posto $\zeta = i\xi$, con $\xi \in R^+$, si ha

$$|V(H_0 - i\xi)^{-1}| < 1 \quad 10.53$$

per ξ sufficientemente grande. Da $|V\phi| \leq a |H_0\phi| + b|\phi|$, con $a < 1$, ponendo $\phi = (H_0 - i\xi)^{-1}\psi$ si ottiene

$$|V(H_0 - i\xi)^{-1}\psi| \leq a |H_0(H_0 - i\xi)^{-1}\psi| + b|(H_0 - i\xi)^{-1}\psi|.$$

La (10.53) segue allora, per ξ sufficientemente grande, perché $H_0(H_0 - i\xi)^{-1}$ e $\xi(H_0 - i\xi)^{-1}$ sono contrazioni.

Dalla condizione $D(V) \subset D(H_0)$ segue allora che su $D(H_0)$

$$(H_0 + V - z)^{-1} = (I + V(H_0 - z)^{-1})(H_0 - z). \quad 10.54$$

Applicando il lemma di Weierstrass alla funzione $V(H_0 - z)^{-1}$ si deduce che $H + V - z$ è invertibile per $z \in C \setminus (\sigma(H_0) \cup J')$, dove J' è numerabile e non ha punti di accumulazione in $C \setminus \sigma(H_0)$.

Sia ora I un intervallo dell'asse reale, con $I \cap \sigma_{ess}(H_0) = \emptyset$. Allora $I_2 \equiv I \cap \sigma(H_0)$ è un insieme finito e così è anche $J_1 \equiv I \cap J'$. Dunque $H_0 + V - \lambda$ è invertibile per $\lambda \notin J_1 \cup J_2$, un insieme costituito da un numero finito di punti.

Sia $\lambda \in J_1 \cup J_2$. Dobbiamo verificare che, se λ è un autovalore di $H_0 + V$, la sua molteplicità è finita. Infatti questo implica che $\lambda \notin \sigma_{ess}(H_0 + V)$ e quindi $\sigma_{ess}(H_0 + V) \cap I = \emptyset$.

Sia dunque λ un autovalore isolato di $H_0 + V$. Il proiettore sul sottospazio associato è dato da

$$\Pi_\lambda \equiv (2\pi)^{-1} \int_\gamma (H_0 + V - z)^{-1} d\gamma \quad 10.55$$

dove γ è un circuito chiuso che contiene al suo interno il solo punto λ dello spettro di $H_0 + V$. Pertanto, pur di prendere γ sufficientemente piccolo,

$$\Pi_\lambda = (2\pi)^{-1} \int_\gamma (H_0 - z)^{-1} (1 - F(z))^{-1} d\gamma, \quad F(z) \equiv -V(H_0 - z)^{-1}. \quad 10.56$$

Per ipotesi, $(F(z) - 1)^{-1}$ ha uno sviluppo in serie di Mac Laurin nella variabile $z - \lambda$, e siccome anche $(H_0 - z)^{-1}$ ha un tale sviluppo ne concludiamo che anche $(H_0 - z)^{-1} (1 - F(z))^{-1}$ ha uno sviluppo in serie di Mac Laurin con coefficienti dati da operatori di rango finito.

Dunque Π_λ è un proiettore su un sottospazio di dimensione finita, e questo conclude la dimostrazione della prima parte del teorema.

Per dimostrare il reciproco, si potrebbe pensare di invertire i ruoli di $H_0 + V$ e di H_0 . Ma questo non è possibile, poiché $V \prec H_0$ non implica $V \prec H_0 + V$ (si usi come esempio $V = -\frac{2}{3}H_0$).

Dimostriamo invece che, se $V \prec H_0$, e $V(H_0 - \lambda)^{-1}$ è compatto per $\lambda \notin \sigma(H_0)$, allora

- a) Per ogni $\lambda \notin \sigma(H_0 + V)$, l'operatore $V(H_0 + V - \lambda)^{-1}$ è compatto.
- b) Per almeno un valore di λ in ogni componente connessa di $C \setminus \sigma(H_0 + V)$ l'operatore $1 - V(H_0 + V - \lambda)^{-1}$ è invertibile.

Per dimostrare il punto a), notare che è sufficiente dimostrare l'asserto per un solo valore di $\lambda \notin \sigma(H_0 + V)$. Si ha

$$V(H_0 + V - \lambda)^{-1} = V(H_0 - \lambda)^{-1}[1 + V(H_0 - \lambda)^{-1}] \quad 10.57$$

e l'asserto segue poiché $V(H_0 - \lambda)^{-1}$ è compatto e il fattore $I + V(H_0 - \lambda)^{-1}$ è limitato.

Per dimostrare il punto b), basta notare che se $\lambda \notin \sigma(H_0) \cup \sigma(H_0 + V)$ si ha

$$1 + V(H_0 - \lambda)^{-1} = (H_0 + V - \lambda)(H_0 - \lambda)^{-1}. \quad 10.58$$

Da (10.57) e (10.58) si deduce che $I - V(H_0 + V - \lambda)^{-1}$ è invertibile se $H_0 + V - \lambda(H_0 - \lambda)^{-1}$ è limitato. Se $V \prec H_0$ questo è certamente vero pur di prendere λ sufficientemente grande.

Questo conclude la dimostrazione del Teorema 10.16.

♡

Come applicazione di questo teorema di confronto, dimostriamo la seguente Proposizione.

Notazione

Scriviamo $f \in L_\epsilon^\infty$ se esiste una costante positiva C tale che $|f(x)| < \epsilon$ se $|x| > \frac{C}{\epsilon}$.

Proposizione 10.18

Sia $V(x) \in L^2(\mathbb{R}^3) + L_\epsilon^\infty(\mathbb{R}^3)$. Allora

$$\sigma_{ess}(-\Delta + V) = \sigma_{ess}(-\Delta) \quad (\equiv \mathbb{R}^+). \quad 10.59$$

Inoltre $\sigma(-\Delta + V) \setminus \sigma_{ess}(-\Delta)$ è un insieme finito o al più numerabile, e in questo secondo caso ha l'origine come unico punto di accumulazione.

In particolare tutti gli autovalori negativi hanno molteplicità finita.

◇

Dimostrazione

Dimostriamo innanzitutto che $V(-\Delta + \lambda)^{-1}$ è compatto se $\lambda \notin \mathbb{R}^+$.

Sia $\{C_n\}$ una successione decrescente di numeri positivi che tende a 0. Per ipotesi, esistono due successioni V_1^n, V_2^n tali che

$$V_1^n \in L^2, \quad |V_2^n| \in L^\infty, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} |V_2^n|_\infty = 0, \quad V_1^n + V_2^n = V.$$

Essendo $(-\Delta + \lambda)^{-1}$ limitato per $\lambda > 0$, ne segue per $n \rightarrow \infty$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (V_1^n - V_1)(-\Delta + \lambda)^{-1} = 0 \quad \forall \lambda > 0. \quad 10.60$$

Basterà quindi dimostrare che se $W \in L^2(\mathbb{R}^3)$, allora $W(-\Delta + \lambda)^{-1}$ è compatto per $\lambda > 0$. Utilizzando la forma esplicita del nucleo di $(-\Delta + \lambda)^{-1}$ si vede facilmente che quest'operatore è di Hilbert-Schmidt.

Posto $H_0 \equiv -\Delta$, dimostriamo ora che $I + V(-\Delta - \lambda)^{-1}$ è invertibile per un'opportuna scelta di λ . Se $\Im \lambda \neq 0$ questo è certamente vero, e l'operatore inverso è $I - V(H - \lambda)^{-1}$. Questo operatore è limitato se $\rho V(H - \lambda)^{-1}$ è limitato per ogni $\rho \in \mathbb{R}$. Dunque l'operatore $1 + V(H_0 + \lambda)^{-1}$ è invertibile se lo è l'operatore $1 + \rho V(-\Delta + \lambda)^{-1}$ per qualche valore di ρ .

Consideriamo l'operatore $zV(H_0 - \lambda)^{-1}$, $\lambda \notin \sigma(H_0)$. Per ogni λ , questo operatore è compatto, e se $V \prec H_0$ la funzione $F(z) \equiv zV(H_0 - \lambda)^{-1}$ è analitica in z per $|z| < 1$. Inoltre $1 + F(0)$ è un operatore invertibile. Per il teorema di alternativa di Fredholm, la funzione $F(z)$ è invertibile per tutti i valori di z , con $|z| < 1$ fatta eccezione al più per un insieme numerabile di valori. Dunque esiste almeno un valore ρ_0 tale che $I + V(H_0\lambda)^{-1}$ è invertibile.

Poiché $W \in L^2 \Rightarrow W \prec\prec H_0$, per ogni $a < 1$ se $\Re \lambda = 0$,

$$|\rho_0 V(H - \lambda)^{-1} \phi| \leq \rho_0 a |H(H - \lambda)^{-1} \phi| + |V(H - \lambda)^{-1} \phi + \rho \lambda^{-1} \phi| \quad 10.61$$

e ne consegue

$$\rho_0(1 - a) |V(H_0 - \lambda)^{-1} \phi| \leq \rho_0(a + b\lambda^{-1}) |\phi|. \quad 10.62$$

Dunque per ogni intervallo finito J vale

$$J \cap \sigma_{ess}(H_0 + V) = J \cap \sigma_{ess} H_0.$$

D'altra parte $-\infty$ non è un punto d'accumulazione di $\sigma(H_0 + V)$ perché $V \prec H_0$ implica che $H_0 + V$ è limitato dal basso.

Questo conclude la dimostrazione della Proposizione 10.18.

♡

Nota 10.9

Notiamo che $V(x) = c/|x| \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty_\epsilon(\mathbb{R}^3)$. Quindi tutti gli autovalori negativi dell'atomo di idrogeno hanno molteplicità finita e zero come punto di accumulazione.

♣

Una generalizzazione del Teorema 10.16 è la seguente:

Teorema 10.19

Sia $V = R + W$, $W \in L^\infty_\epsilon$ con R di classe Rollnik. Allora $\sigma_{ess}(-\Delta + V) = [0, \infty)$.

◇

Dimostrazione

In generale, sotto le ipotesi del teorema, l'operatore $V(-\Delta + 1)^{-1}$ non è compatto. Tuttavia è compatto se $W = 0$. Sia W_n un troncamento di W a valori $|x| \leq n$. Poniamo $V_n = R + W_n$. Allora V_n è di classe Rollnik per ogni n .

D'altra parte, posto $H_n \equiv -\Delta + V_n$

$$(H_n + \lambda)^{-1} = (H_0 + \lambda)^{-1} + \sum_{k=1}^{\infty} (H_0 + \lambda)^{-1} |V_n|^{1/2} [-V_n^{1/2} (H_0 + \lambda)^{-1} |V_n|^{1/2}]^k V_n^{1/2} (H_0 + \lambda)^{-1},$$

10.63

con $V_n^{1/2} \equiv V_n/|V_n|^{1/2}$.

Per λ sufficientemente grande, per ciascun valore di n la serie di operatori converge in norma, le somme parziali convergono quando $n \rightarrow \infty$ e i termini della somma sono equilimitati.

Posto $A_n \equiv (-\Delta + V_n)|V_n|^{1/2}$, è facile vedere che i nuclei degli operatori $A_n^* A_n$ sono positivi ed equilimitati in $L^2(R^3 \times R^3)$. Per il teorema di convergenza dominata segue che la successione $(H_n + 1)^{-1}$ converge in norma, ed essendo ciascun termine un operatore compatto, deduciamo che $(-\Delta + V + 1)^{-1}$ è compatto. \heartsuit

Terminiamo questo capitolo con un'interessante e utile caratterizzazione dello spettro degli operatori di Schrödinger $H = -\Delta + V$, data dal Teorema di Sch'nol. Definiamo *autovalore generalizzato* E un elemento di R tale che l'equazione $(-\Delta + V)u_E = Eu_E$ abbia una soluzione a crescita subesponenziale all'infinito (con questo intendiamo $\lim_{x \rightarrow \infty} |u_E(x)|e^{-\gamma|x|} = 0 \quad \forall \gamma > 0$).

Il Teorema di Sch'nol, conseguenza del primo criterio di Weyl, prova essenzialmente che lo spettro $\sigma(H)$ è (sotto ipotesi molto generali su $V(x)$) la chiusura dell'insieme degli autovalori generalizzati,

Daremo la dimostrazione del Teorema di Sch'nol nel caso in cui V sia di classe Rollnik. La dimostrazione può essere estesa a casi più generali utilizzando opportune disuguaglianze.

Per la dimostrazione utilizziamo varie disuguaglianze che rappresentano stime locali del gradiente della soluzione e che sono valide per una classe abbastanza vasta di potenziali, ad esempio quelli di classe Rollnik.

Il lettore troverà utile verificare queste disuguaglianze nel caso $V = 0$ utilizzando la forma esplicita delle soluzioni di $-\Delta u = E u$: e quindi verificare in questo modo che lo spettro di $-\Delta$ è il semiasse reale positivo. La dimostrazione nel caso generale utilizza proprietà di regolarità delle soluzioni di $(-\Delta + V)u = E u$ che dipendono dalle proprietà di regolarità locale di $V(x)$.

Le disuguaglianze seguenti confrontano varie norme della funzione e/o del suo gradiente in regioni incluse una nell'altra. Queste disuguaglianze servono quindi a stimare il grado di regolarità locale della funzione o il suo comportamento all'infinito.

Iniziamo con un semplice Lemma, la cui dimostrazione (che non esplicitiamo) è ottenuta attraverso integrazione per parti, inizialmente per funzioni lisce e poi per continuità per funzioni più singolari.

Lemma 10.20

Se $u \in L^2_{loc}(R^d)$ e $\Delta u \in L^1_{loc}(R^d)$, allora $\nabla u \in L^2_{loc}(R^d)$, e per ogni $\phi \in C^\infty_0(R^d)$ vale

$$\int \phi |\nabla u|^2 dx = \frac{1}{2} \int \Delta \phi |u|^2 dx - \int \phi |\bar{u} \Delta u| dx. \quad 10.64$$

Inoltre, se $H u = 0$ e $\phi \in C^\infty_0(R^d)$, $\phi \geq 0$

$$\int \phi |\nabla u|^2 dx \leq \frac{1}{2} \int \Delta \phi |u|^2 dx + \int V_- \phi |u|^2 dx. \quad 10.65$$

◇

Da questo si deduce

Lemma 10.21 (Poincarè)

Se V è di classe Rollnik, per ogni aperto $\Omega \subset R^d$ e ogni compatto $K \subset \Omega$ esiste una costante C (che dipende da K , Ω , e dal comportamento locale di V) tale che

$$\int_K |\nabla u|^2 dx \leq C \left[\int_\Omega |u(x)| dx \right]^2. \quad 10.66$$

◇

Dimostrazione

Se V è di classe Rollnik, da $(\Delta + E)u = V u$ segue che $u \in L^\infty_{loc}$. Questo implica $\Delta u \in L^1_{loc}$ poiché per ipotesi $V \in L^1_{loc}$. Scegliendo $\phi \in C^\infty_0$ tale che $\phi(x) \equiv 1$ in K e con supporto S strettamente contenuto in Ω , da (10.65) si deduce che esiste una costante c_1 tale che

$$\int_K |\nabla u|^2 dx \leq c_1 \sup_{x \in S} |u(x)|^2. \quad 10.67$$

D'altra parte, essendo u una soluzione di

$$(-\Delta \phi, u) + ((V - E)\phi, u) = 0, \quad \Delta u \in L^1_{loc}, \quad V u \in L^1_{loc}$$

si può dimostrare (questo generalizza al caso di un V nella classe Rollnik un'analoga stima per funzioni subarmoniche, che corrisponde al caso $V = 0$) che vale

$$|u(x)| < c_3 \int_{|x-y|<r} |u(y)| dy \quad 10.68$$

per un'opportuna costante c_3 ed r scelto in modo che la palla di raggio r centrata in x sia tutta contenuta in Ω . Questo, insieme a (10.67), implica (10.66).

♡

Utilizzeremo anche la seguente stima, che dà un controllo della norma L^2 del gradiente di u a partire dalla norma L^2 della soluzione u in una regione più grande.

Lemma 10.22

Sia V di classe Rollnik e sia C_r l'ipercubo definito da

$$C_r = \{x \in R^d, \max_i |x_i| \leq r\}. \quad 10.69$$

Allora si ha, per ogni soluzione di $(\Delta + V)u = 0$ e per ogni scelta di r

$$\int_{C_{r+1}/C_r} |\nabla u|^2 dx < \int_{C_{r+2}/C_{r-1}} |u|^2 dx \quad 10.70$$

dove c è indipendente da n (dipende solamente da V).

◇

Dimostrazione

Sia K un cubo di spigolo di lunghezza unitaria, K' un cubo di spigolo di lunghezza tre, centrato su K . Da (10.70) e dalla disuguaglianza di Schwarz si deduce che esistono costanti b e c tali che

$$\int_K |\nabla u|^2 dx \leq b \left[\int_K |u| dx \right]^2 \leq c \int_{K'} |u|^2 dx. \quad 10.71$$

Sommando queste stime su una partizione di C_{r+1}/C_r in cubi unitari si completa la dimostrazione.

♡

Dopo questi preparativi, enunciamo e dimostriamo il teorema di Sch'nol.

Teorema 10.23 (Sch'nol)

Sia V di classe Rollnik, E un numero reale, $u_E(x)$ una soluzione di $Hu_E = Eu_E$ con $H = -\Delta + V$, dove u_E è una funzione a crescita *subesponenziale* all'infinito.

Allora $E \in \sigma(H)$.

◇

Senza perdita di generalità consideriamo il caso $E = 0$.

Se $Hu = 0$ con $u \in L^2$ si ha $0 \in \sigma(H)$ poiché $u(x)$ è un'autofunzione. Quindi possiamo assumere $u \notin L^2$. Definiamo come nel Lemma 10.22 gli ipercubi C_r e scegliamo $\eta_r \in C_0^\infty(R)$ con supporto in C_{r+1} , identicamente eguale ad uno in C_r e tale che per un'opportuna costante si abbia $|\Delta \eta_r|_\infty \leq M$, $|\nabla \eta_r|_\infty \leq M$. Sia $w_r \equiv \frac{\eta_r u}{|\eta_r u|_2}$, in modo da avere $|w_r|_2 = 1 \forall r$.

Dimostriamo che per un'opportuna successione di numeri naturali $\{r_n\} \in N$, con $r_n \rightarrow \infty$, si ha

$$|H w_{r_n}| \rightarrow 0. \quad 10.72$$

Quindi si ha una successione che soddisfa il primo criterio di Weyl, e $0 \in \sigma(H)$. Per dimostrare (10.72) notiamo che

$$\Delta(\eta_r u) = (\Delta \eta_r) u + 2(\nabla \eta_r, \nabla u) + \eta_r \Delta u. \quad 10.73$$

Da $Hu = 0$ segue allora

$$H(\eta_r u) = -(\Delta \eta_r) u - 2(\nabla \eta_r, \nabla u);$$

poiché $|\Delta \eta_r|_\infty$ e $|\nabla \eta_r|_\infty$ sono limitati uniformemente, utilizzando il Lemma 10.22 si ottiene, per opportune costanti c_1 e c_2 ,

$$|H(\eta_r u)|^2 \leq c_1 \int_{C_{r+1}/C_r} (|u|^2 + |\nabla u|^2) dx \leq c_2 \int_{C_{r+2}/C_{r+1}} |u|^2 dx. \quad 10.74$$

Definiamo $N(r) \equiv \int_{C_r} |u|^2 dx$. Allora da (10.74) segue

$$|H w_r|^2 \leq c \frac{N(r+2) - N(r-1)}{|\eta_r u|^2} \leq \frac{N(r+2) - N(r-1)}{N(r-1)}. \quad 10.75$$

Per concludere la dimostrazione del teorema, dobbiamo dimostrare che esiste una successione $\{r_k\}$ tale che

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{N(r_k+2) - N(r_k-1)}{N(r_k-1)} \rightarrow 0.$$

Procediamo per assurdo. Assumiamo che tale successione non esista.

Allora esistono $R \in \mathcal{N}$ e una costante $\alpha > 0$ tali che

$$r > R \quad \Rightarrow \quad \frac{N(r+2) - N(r-1)}{N(r-1)} \geq \alpha > 0: \quad 10.76$$

questo implica $N(r+3) \geq (1+\alpha)N(r)$ per $r > R+1$ e per induzione $N(R+3s) \geq (1+\alpha)^s N(R)$ per ogni s . Ma questo implica ancora che $N(r)$ ha crescita esponenziale, e questo contraddice l'ipotesi che $u(x)$ abbia per $|x| \rightarrow \infty$ crescita subesponenziale.

♡

Nota 10.10

Dal teorema di Sch'nol segue che se $H\phi = E\phi$ con $\phi \ni L^2$, allora $E \in \sigma_{ess}$.

♣

Nota 10.11

Per potenziali periodici in R^d l'analogo del Teorema di Sch'nol (con la stessa dimostrazione) è conosciuto come teorema di Bloch: E appartiene allo spettro di $H = -\Delta + V$ con V periodico e di classe opportuna se e solo se esiste una soluzione limitata di $Hu = Eu$.

◇

Temi nel secondo volume:

11. LIMITE SEMICLASSICO II. FUNZIONE DI WIGNER.
OPERATORI PSEUDODIFFERENZIALI.
RAPPRESENTAZIONE DI HEISENBERG.
12. OPERATORI COMPATTI. CRITERI DI COMPATTEZZA. DISEGUAGLIANZE.
13. POTENZIALI PERIODICI. CELLA DI WIGNER-SEITZ.
FUNZIONI DI BLOCH E DI WANNIER. CAMPI MAGNETICI.
14. FORMULA DI LIE-TROTTER E DI FEYNMAN-KAC.
PROCESSI STOCASTICI.
PROCESSI DI WIENER E DI ORNSTEIN-UHLENBECK.
TEOREMA DEL LIMITE CENTRALE. MOTO BROWNIANO.
15. FORME QUADRATICHE. ESTENSIONE DI FRIEDRICHS.
OPERATORE E GRUPPO MODULARE.
16. ATOMI DI IDROGENO E IDROGENOIDI.
STIME DEL NUMERO DI STATI LEGATI.
METODO DI FESHBACH
17. TEORIA DELLO SCATTERING.
METODO DIPENDENTE DAL TEMPO E METODO STAZIONARIO.
IL METODO DI ENSS. SCATTERING INVERSO.
FLUSSO ATTRAVERSO SUPERFICI
18. TEORIA DELLO SCATTERING II. STIME DI PROPAGAZIONE.
REGOLARITÀ SECONDO KATO. METODO DI MOURRE.
SISTEMI AD N -CORPI.
19. APPLICAZIONI POSITIVE E SEMIGRUPPI MARKOVIANI.
IPERCONTRATTIVITÀ.
RELAZIONE TRA FORME DI DIRICHLET E SEMIGRUPPI MARKOVIANI.
DISUGUAGLIANZE DI SOBOLEV LOGARITMICHE.