

GIANFAUSTO DELL'ANTONIO

ASPETTI MATEMATICI DELLA
MECCANICA QUANTISTICA

PARTE II: ARGOMENTI SCELTI

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

Il ne faut pas toujours tellement épuiser un sujet qu'on ne laisse rien à faire à l'lecteur
il ne s'agit pas de faire lire, mais de faire penser.

Charles de Secondat, Baron de Montesquieu

0.4pt0pt

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 esprimere un sincero ringraziamento agli ex studenti miei che hanno visionato versioni preliminari di questo libro e contribuito al loro miglioramento con osservazioni, commenti costruttivi e talora suggerimenti di correzioni. Questo ha portato ad un sensibile miglioramento della presentazione. Un ringraziamento particolare agli amici Raffaele Carlone e Rodolfo Figari non solo per i commenti ma anche per avere dedicato molto del loro tempo alla preziosa opera di assemblaggio che ha reso possibile la presentazione della versione finale. Infine, un ringraziamento particolare all'amico e collega Giuseppe (Beppe) Marmo; senza il suo attivo coinvolgimento presso gli editori questo testo di Meccanica Quantistica in due volumi sarebbe rimasto solo un progetto.

PRESENTAZIONE

La prima parte 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 anche argomenti di ricerca.

Ciascuno dei capitoli della seconda parte (Capitoli 11 fino 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.

Nel seguito verrà data una panoramica degli argomenti trattati nei due volumi di cui si compone questo libro.

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 strutture delle dimensioni atomiche.

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 il modello Meccanica Quantistica come è esposto in questo libro non coglie completamente la complessità dei fenomeni su scala atomica.

Questo è in parte dovuto al fatto che per descrivere l'organizzazione degli esperimenti, comunicare i risultati di un'esperimento e sottolineare la sua importanza utilizziamo il linguaggio (nel senso linguistico del termine) della fisica classica (macroscopica), l'unica a cui accediamo direttamente con i nostri sensi.

In particolare la formalizzazione in 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 Schroedinger. Questo formalismo evita i problemi connessi alla misurazione, ma ne introduce altri di natura statistica. dipende dal tempo

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 esemplificato mediante 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 alla strutture che più frequentemente vengono utilizzate nella trattazione 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 in particolare i primi rudimenti e applicazioni della teoria delle algebre di von Neumann, della teoria dei semigrupp, in particolare semigrupp di Markov, della teoria degli operatori su spazi di Hilbert .

Il Capitolo 9 tratta della teoria delle estensioni di questi operatori, quando necessario e possibile, per provvedere 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 nel filone di De Broglie-Schrödinger che in quello 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.

In un'appendice vengono dati alcuni elementi dell'algebra di Weyl magnetica, uno strumento utile nella descrizione dell'interazione della materia con campi elettromagnetici esterni.

Il Capitolo 8 tratta in modo relativamente elementare il problema del limite semiclassico, cioè in che modo la dinamica quantistica rifletta la dinamica classica quando viene applicata in circostanze in cui, per i fenomeni considerati, le quantità che hanno la dimensione di un'azione risultano avere valori molto maggiori della costante di Planck.

In parte di questo capitolo utilizziamo anche i metodi di fase stazionaria, in analogia a quanto avviene nella trattazione dell'ottica geometrica e in 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 riguarda l'utilizzazione degli strumenti matematici descritti nei capitoli 4,5, 6, 7, 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.

Vengono infine esplicitate classi di potenziali per i quali è possibile la costruzione di una dinamica quantistica.

Il Volume 2 inizia con il Capitolo 11 nel quale vengono descritte le 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 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 ricco di problemi aperti.

Il Capitolo 14 introduce la formula di Feymann-Kac, uno degli argomenti più discussi quando viene utilizzato nella trattazione di sistemi con infiniti gradi di libertà (teoria dei campi quantizzati).

Nella maggior parte dei testi di Fisica 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.

In un'appendice vengono date alcune nozioni di teoria delle probabilità e di processi stocastici utili per comprendere l'esposizione degli argomenti trattati.

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 introdotta e discussa l'estensione di Friedrichs

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.

Questo Capitolo termina 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 contiene elementi di teoria dello scattering in Meccanica Quantistica.

Viene prima discussa 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.

In questo contesto vengono introdotti gli Operatori d'onda e la matrice di scattering.

In seguito viene trattata la *teoria stazionaria dello scattering* in cui lo stesso comportamento asintotico viene analizzato attraverso lo studio dell'operatore risolvente e delle sue proprietà.

Il capitolo contiene infine 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 e le sue generalizzazioni vengono utilizzato negli articoli di ricerca più recenti 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 sue generalizzazioni successive, come il metodo degli operatori coniugati, è oggi il metodo più comunemente utilizzato nello studio degli aspetti matematici della teoria dello scattering da forze di natura potenziale.

Il metodo stesso è poi generalizzato per permettere una trattazione matematica del sistema composto da N corpi quantistici interagenti mutuamente mediante forze di natura potenziale.

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 particolare vien analizzata la teoria delle forme di Dirichlet e i teoremi di Beurling-Denis

In questo contesto si analizzano i semigruppri 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.

0.4pt0pt

BIBLIOGRAFIA GENERALE, vol. 1 e 2

- Amrein V., Jauch J, Sinha K.
Scattering theory in Quantum Mechanics
V.Benjamin , Reading Mass, 1977.
- Baez J., Segal I.E. , Zhou Z.
Introduction to Algebraic and Constructive Field Theory
Princeton University Press 1992
- Bratteli O.
Derivations, Dissipations and Group Actions on C-algebras*
1229 Lecture Notes in Mathematics, Springer 1986
- Bratteli O., Robinson D.W.
Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics I,II
Springer Velag New York 1979/87
- Brezis J.
Analisi Funzionale e Applicazioni
Liguori (Napoli) 1986
- Cassinelli G., De Vito E., Levrero A., Lahti P.J.
The Theory of Symmetry Actions in Quantum Mechanics
Springer Verlag 2004
- 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
- Davies E.B.
Quantum Theory of open systems
Academic Press 1976
- Dixmier J.
Les Algebres d'operateurs dan l'espace hilbertien
Gauthier-Villars Paris 1969
- Doob J.
Stochastic processes

Wiley New York 1953

Folland G.B.

Harmonic analysis in Phase Space

Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1989

Gustafson S., Segal I.M.

Mathematical Concepts of Quantum Mechanics

Springer 2006

Hille E., Phillips R.S.

Functional Analysis and Semigroups

American Math.Society 1957

Hislop P.D., Sigal I.M.

Introduction to Spectral Theory, with application to Schrödinger Operators

Springer New York 1996

Kadison R.V., Ringrose J.R.

Fundamentals of the Theory of Operator Algebras vol. I - IV

Academic Press 1983/ 86

Kato T.

Perturbation Theory for Linear Operators

Springer (Berlin) 1980

Kuchment P.

Floquet Theory for Partial Differential Equations

Birkhauser Basel, 1993

Jammer M.

The conceptual development of Quantum Mechanics

Mc Graw-Hill New York 1966

Mackey G.W.

Mathematical Foundations of Quantum Mechanics

Benjamin N.Y. 1963b

Nelson E.

Topics in Dynamics, I: Flows

Notes Princeton University Press 1969

Pedersen G.K.

C-algebras and their Automorphism Groups*

Academic Press London 1979

Reed M , Simon B.

Methods of Modern Mathematical Physics vol. I - IV

Academic Press , N.Y. and London 1977, 1978

Sakai S.

-
- C*-algebras and W*-algebras*
Springer Verlag Berlin 1971
- Segal I.E.
Mathematical Problems of Relativistic Physics
American Math. Soc. Providence R.I. 1963
- Simon B.
Quantum Mechanics for Hamiltonians defined as Quadratic Forms
Princeton Series in Physics, Princeton University press 1971
- Simon B.
Functional Integration and Quantum Physics
Academic Press 1979
- Sinai Y.G.
Probability Theory
Springer Textbooks, Springer Berlin 1992
- Takesaki M.
Tomita's Theory of Modular Hilbert Algebras
Lect. Notes in Mathematics vol 128, Springer Verlag Heidelberg 1970
- Takesaki M.
Theory of Operator Algebras
Vol 1, Springer, New York, 1979
- Teufel S.
Adiabatic Perturbation Theory in Quantum Dynamics
Lecture Notes in Mathematics vol. 1821 Springer Verlag 2003
- von Neumann J.
Mathematische Grundlage der Quantenmechanik (Mathematical Foundation of Quantum Mechanics)
Springer Verlag Berlin 1932 (Princeton University Press 1935)
- Van der Werden B.L. (ed.)
Sources of Quantum Mechanics
New York Dover 1968
- Yoshida K.
Functional Analysis
Springer Verlag Berlin 1971

VOLUME II

ARGOMENTI SCELTI

INDICE

11 LIMITE SEMICLASSICO II. FUNZIONE DI WIGNER. OPERATORI PSEUDODIFFERENZIALI.	7
11.1 Relazione tra funzioni di Wigner e quantizzazione di Weyl Operatori pseudodifferenziali	20
11.2 Quantizzazione di Berezin-Wick	38
11.3 Quantizzazione di Kohn-Nirenberg [KN]	41
11.4 Quantizzazione di Shubin	42
Appendice 11A: Analisi in rappresentazione di Heisenberg	44
Riferimenti bibliografici	50
12 OPERATORI COMPATTI E DI CLASSE SHATTEN. CRITERI DI COMPATTEZZA. UNA COLLEZIONE DI DISEGUAGLIANZE.	51
Appendice 12A: Bouquet di disuguaglianze	70
Riferimenti bibliografici	87
13 POTENZIALI PERIODICI. CELLE DI WIGNER-SEITZ E DI BRILLOUIN . FUNZIONI DI BLOCH E DI WANNIER. CAMPI ELETTROMAGNETICI DEBOLI.	89
13.1 La teoria di Bloch-Floquet	93
Appendice 13A: Ostruzioni topologiche per campi magnetici costanti	129
Riferimenti bibliografici	132
14 FORMULA DI LIE-TROTTER E FEYNMAN-KAC. PROCESSO DI WIENER.	135
14.1 Formula di Lie-Trotter	135
14.2 Misura di Wiener	146
14.3 Variabili casuali gaussiane, processi stocastici	148
14.4 La formula di Feynman-Kac	158
14.4.1 Potenziali continui e limitati	158
14.4.2 Ipotesi meno restrittive sul potenziale	159
14.5 Formula di Feynman-Kac per processi più generali	161

Appendice 14A: Elementi di teoria della probabilità	170
Appendice 14B: Costruzioni alternative del moto browniano	186
Riferimenti bibliografici	193
15 FORME QUADRATICHE. ESTENSIONE DI FRIEDRICH'S.	195
Appendice 15A: Operatore e gruppo modulare. Derivata di Radon-Nykodim non-commutativa.	215
Riferimenti bibliografici	239
16 ATOMI DI IDROGENO E IDROGENOIDI. STIME DEL NUMERO DI STATI LEGATI.	241
16.1 Atomi idrogenoidi	250
16.1.1 Particelle identiche, statistica di Fermi-Dirac	250
16.2 Stime del numero di autovalori dell'operatore di Schrödinger	260
Appendice 16A: Il metodo di Feshbach	273
Appendice 16B: Stime semiclassiche	278
Riferimenti bibliografici	281
17 TEORIA DELLO SCATTERING IN MECCANICA QUANTISTICA . FORMULAZIONI DIPEDENTE DAL TEMPO E STAZIONARIA TEOREMA R.A.G.E. IL METODO DI ENSS.	283
17.1 Teoria dello scattering: formulazione dipendente dal tempo	284
17.2 Teoria dello scattering: formulazione indipendente dal tempo	305
17.3 Teoria geometrica dello scattering	314
Appendice 17A: Scattering inverso	329
Appendice 17B: Teorema del flusso attraverso superfici	333
Appendice 17C: Teoria algebrica dello scattering	337
Riferimenti bibliografici	338
18 TEORIA QUANTISTICA DELLO SCATTERING. STIME DI PROPAGAZIONE REGOLARITA' SECONDO KATO. METODO DI MOURRE. SISTEMA DI N CORPI.	341
18.1 Il sistema a N corpi quantistico	352
18.2 Struttura dello spettro continuo	362
Riferimenti bibliografici	376
19 APPLICAZIONI POSITIVE, SEMIGRUPPI MARKOVIANI, IPERCONTRATTIVITÀ. FORME DI DIRICHLET CONTRATTIVE, DISEGUAGLIANZE DI SOBOLEV LOGARITMICHE.	377
19.1 Proprietà di regolarizzazione, ipercontrattività	399
19.1.1 Relazione con l'entropia	404
19.1.2 Relazione tra s.l. e densità spettrale	404

19.1.3 Relazione tra ipercontrattività e disegualianze di sobolev logaritmiche	411
Appendice 19A: Il semigruppò dell'oscillatore armonico è ipercontrattivo.	416
Appendice 19B: Esempi.	417
Riferimenti bibliografici	420

0.4pt0pt

CAPITOLO 11
 LIMITE SEMICLASSICO II. FUNZIONE DI WIGNER.
 OPERATORI PSEUDODIFFERENZIALI.

In Meccanica Classica uno stato puro del sistema è descritto da una misura di Dirac portata da un punto nello spazio delle fasi. Per gli stati che corrispondono a miscele statistiche l'identificazione è data da una funzione positiva integrabile $\rho(p, q)$.

In Meccanica Quantistica uno stato puro è descritto da una funzione a valori complessi sullo spazio delle configurazioni, il cui modulo è a quadrato integrabile rispetto alla misura di Lebesgue. Ad uno stesso stato corrispondono le funzioni che differiscono tra loro solamente per un fattore moltiplicativo costante.

Alternativamente, si può descrivere uno stato mediante una funzione a valori complessi sullo spazio dei momenti, trasformata di Fourier della precedente.

È ovvio che, per trattare il limite semiclassico, sarebbe conveniente rappresentare lo stato mediante una funzione a valori reali sullo spazio delle fasi classico, e che la corrispondenza tra funzione e stato fosse uno-a-uno.

A questi requisiti soddisfa la funzione di Wigner associata ad uno stato quantistico.

A differenza della funzione ρ la funzione di Wigner non è positiva ovunque (fa eccezione come vedremo per la funzione associata ad uno stato coerente generalizzato di dispersione totale maggiore o uguale a \hbar), e pertanto non può essere interpretata come densità di probabilità.

Ha tuttavia delle proprietà di regolarità notevoli, ed è connessa in modo naturale, come vedremo, al sistema di Weyl.

Inoltre il suo integrale sullo spazio degli impulsi è una funzione positiva che coincide con la distribuzione di probabilità del vettore di stato nella rappresentazione delle coordinate, e analogamente il suo integrale sullo spazio delle coordinate è una funzione positiva che coincide con la distribuzione di probabilità nello spazio dei momenti.

Ad uno stato puro, rappresentato nello spazio delle coordinate dalla funzione a valori complessi $\psi \in L^2(\mathbb{R}^N)$, associamo la *funzione di Wigner*

$$W_\psi(x, \xi) = (2\pi)^{-N} \int_{\mathbb{R}^N} e^{-i(\xi, y)} \psi\left(x + \frac{y}{2}\right) \bar{\psi}\left(x - \frac{y}{2}\right) dy \quad 11.1$$

È facile vedere che la funzione così ottenuta è a valori reali.

L'applicazione $\psi \rightarrow W$ è quadratica, e pertanto W non viene alterata se si moltiplica ψ per un fattore di fase costante.

Le funzioni W_ψ sono quindi associate a *stati puri* del sistema.

La corrispondenza tra W_ψ ed il nucleo integrale del proiettore π_ψ su ψ

$$\pi_\psi(x, y) \equiv \psi(x)\bar{\psi}(y) \tag{11.2}$$

è lineare.

Se $\psi(x, t)$ risolve l'equazione di Schrödinger libera

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta \psi \tag{11.3}$$

la funzione W_ψ è soluzione dell'equazione di trasporto (o di Liouville)

$$\frac{\partial W}{\partial t} + (\xi, \nabla_x W) = 0 \tag{11.4}$$

Se si tien conto della costante di Planck (anzichè utilizzare unità di misura in cui essa ha valore uno) l'equazione di Schrödinger libera diventa

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta \psi \tag{11.5}$$

e la funzione di Wigner assume la forma

$$W_\psi^\hbar(x, \xi, t) = \left(\frac{1}{\hbar}\right)^N W_\psi\left(x, \frac{\xi}{\hbar}, t\right) \tag{11.6}$$

Con questa definizione l'equazione di Liouville (11.4) resta soddisfatta.

In presenza di un potenziale $V(x)$ l'equazione di Schrödinger diventa

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta \psi + V \psi$$

Ponendo

$$f^\hbar(x, \xi, t) = W_\psi^\hbar(x, \xi, t) = (2\pi)^{-N} \int_{R^N} e^{-i(\xi, y)} \psi\left(t; x + \frac{\hbar y}{2}\right) \bar{\psi}\left(t, x - \frac{\hbar y}{2}\right) dy \tag{11.7}$$

questa funzione soddisfa

$$\frac{\partial f^\hbar}{\partial t} + (\xi, \nabla_x f^\hbar) + K *_{\xi} f^\hbar = 0 \tag{11.8}$$

dove K è definito da

$$K(x, \xi) \equiv i (2\pi)^{-N} \int e^{-i(\xi, y)} \left(V \left(x + \frac{y}{2} \right) - V \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) dy \quad 11.9$$

e abbiamo usato la notazione

$$(K *_{\xi} W)(x, y) \equiv \int K(x, y - \xi) W(x, \xi) d\xi. \quad 11.10$$

Se il potenziale V è sufficientemente regolare ci aspettiamo che l'equazione (11.8) abbia soluzione in uno spazio opportuno.

Notiamo che, sempre sotto opportune ipotesi su V , dalle considerazioni che abbiamo fatto sul limite semi-classico, ci aspettiamo che se il dato iniziale in (11.8) f_0^{\hbar} converge quando $\hbar \rightarrow 0$ a f_0 in una topologia opportuna (che preciseremo) allora il limite

$$f(t) \equiv \lim_{\hbar \rightarrow 0} f^{\hbar}(t)$$

esista in senso debole, sia una misura positiva e soddisfi l'equazione (di Liouville)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi, \nabla_x f) - (\nabla V(x), \nabla_{\xi} f) = 0 \quad 11.11$$

Dimostreremo infatti (Teorema 11.3) che se il potenziale V soddisfa opportune proprietà di regolarità, allora $f^{\hbar}(t)$ converge per sottosuccessioni uniformemente in $|t| < T$ per ogni $T > 0$ in senso *-debole in una topologia opportuna verso una funzione $f(t) \in C_b(R^N)$ che soddisfa (11.11) nel senso delle distribuzioni. Sotto ulteriori proprietà di regolarità del potenziale $f(t)$ è l'unica soluzione di (11.11) e rappresenta il trasporto di f_0 lungo il flusso di equazione

$$\dot{x} = \xi, \quad \dot{\xi} = -\nabla V.$$

Il Teorema 11.3 afferma che se il limite formale indicato esiste, esso *soddisfa l'equazione di Liouville* associata al sistema newtoniano

$$\dot{x} = \xi \quad \dot{\xi} = -\nabla V \quad 11.12$$

La corrispondenza $\psi \rightarrow W_{\psi}^{\hbar}$ rappresenta allora uno strumento efficace per lo studio del limite semiclassico.

Daremo una enunciazione precisa di questo Teorema dopo aver analizzato le proprietà di regolarità della funzione di Wigner.

Notiamo che la (11.1) permette per linearità di definire funzioni di Wigner associate a operatori di classe traccia, di Hilbert-Schmidt e più in generale ad operatori descritti da un nucleo integrale.

Se ρ è un operatore di classe traccia, con nucleo integrale $\rho(x, y)$ consideriamo l'operatore $\tilde{\rho}$ che ha come nucleo integrale

$$\tilde{\rho}(x, y) = \rho\left(x + \frac{y}{2}, x - \frac{y}{2}\right)$$

La *trasformata di Wigner* di ρ è la trasformata di Fourier di $\tilde{\rho}$ rispetto ad y

$$W_\rho(x, \xi) = (2\pi)^{-N} \int e^{-i(\xi, y)} \rho\left(x + \frac{1}{2}y, x - \frac{1}{2}y\right) dy \quad 11.13$$

Si può verificare che questa definizione coincide con la precedente se ρ è un proiettore.

Notiamo che $\text{Tr} \tilde{\rho} = \int |\tilde{\rho}(x, 0)|^2 dx$ e che il nucleo di $\tilde{\rho}$ soddisfa

$$\tilde{\rho} \in L^2(R^N \times R^N) \cap C_0(R_y^N, L^1(R_x^N)) \cap C_0(R_x^N, L^1(R_y^N)).$$

Poiché ρ è hermitiano la funzione $\tilde{\rho}(x, y)$ è la complessa coniugata della funzione $\tilde{\rho}(x, -y)$.

La (11.13) permette poi di estendere la definizione della funzione di Wigner al caso in cui ρ è di classe Hilbert-Schmidt; in questo caso si ha

$$\|W_\rho\|^2 = (2\pi)^{-N} \|\rho\|_2^2 \quad 11.14$$

Come abbiamo notato, la funzione $W_\phi(x, \xi)$ non è in generale una funzione positiva (e quindi non può rappresentare una distribuzione di probabilità).

Tuttavia le sue marginali riproducono le distribuzioni di probabilità in posizione e in impulso dello stato rappresentato dalla funzione ϕ .

Si verifica facilmente

Lemma 11.1

$$\int (W_\phi)(x, \xi) dx = |\widehat{f}(\xi)|^2, \quad \int (W_\phi)(x, \xi) d\xi = |f(x)|^2 \quad 11.15$$

◇

Nota 11.1

A stretto rigore la (11.15) vale se $\phi \in L^1 \cap L^2$, $\widehat{\phi} \in L^1 \cap L^2$. Negli altri casi il termine a sinistra deve essere interpretato con procedimenti di limite.

♣

Conviene anche notare esplicitamente le relazioni

$$W_{e^{i(a x - i b \frac{\partial}{\partial x})} \phi} = W_\phi(x - b, \xi - a)$$

$$W_f = W_g \Leftrightarrow f(x) = e^{ic} g(x) \quad c \in R$$

Una relazione importante è anche la seguente: per ogni insieme misurabile E in R^{2N} si ha

$$\int_E W_f(x, \xi) dx d\xi \leq \|f\|_2^2 \mu(E) \quad 11.16$$

dove con $\mu(E)$ si è indicata la misura di Lebesgue di E .

Ricordando che l'integrale su tutto lo spazio vale $\|f\|_2^2$, la (11.16) mostra che la funzione di Wigner W_f non può essere concentrata in una regione di misura di Lebesgue minore di uno (in unità di misura in cui $\hbar = 1$).

Questo rappresenta una conseguenza molto interessante del principio di indeterminazione di Heisenberg, e viene utilizzata nello studio della distribuzione degli autovalori dell'operatore di Schrödinger nel limite semiclassico.

Una classe importante di stati in Meccanica Quantistica (e soprattutto in ottica quantistica) sono gli stati coerenti che abbiamo introdotto e discusso nel Capitolo 5 in relazione al limite semiclassico.

Ricordiamo che gli stati coerenti sono rappresentati nello spazio delle configurazioni da funzioni parametrizzate dai punti di coordinate q, p dello spazio delle fasi e dalla dispersione $\frac{\Delta}{\sqrt{2}}$ nello spazio delle configurazioni

$$\phi_{q,p;\Delta}(x) = C e^{-\frac{(x-q)^2}{2\Delta^2}} e^{\frac{i(x,p)}{\hbar}}$$

dove C è un fattore moltiplicativo che rende soddisfatta la relazione $\|\phi_{q,p;\Delta}\|_2 = 1$.

Questi stati hanno dispersione $\frac{\hbar}{\sqrt{2}\Delta}$ nello spazio dei momenti, quindi il prodotto delle dispersioni è $\frac{\hbar}{2}$, il minimo possibile (disuguaglianza di Heisenberg, conseguenza delle proprietà della trasformazione di Fourier).

La loro funzione di Wigner è

$$W_{\phi_{q,p;\Delta}}(x, \xi) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\frac{(x-q)^2}{\Delta^2} - \frac{(\xi-p)^2}{\Delta'^2}}, \quad \Delta' = \frac{\hbar}{\Delta}. \quad 11.17$$

Abbiamo notato che le funzioni di Wigner non sono in generale positive; da (11.17) si deduce che le funzioni di Wigner associate a stati coerenti sono positive.

La proprietà di positività del nucleo integrale di ρ_ψ si traduce in

$$\int_{R^N \times R^N} (W_\psi) * W_{\phi_{q,p;\Delta}}(x, \xi) dx d\xi \geq 0, \quad \forall \psi \in L^2(R^N) \quad \forall q, p, \Delta \quad 11.18$$

dove il simbolo $*$ indica convoluzione *nelle coordinate dello spazio delle configurazioni*.

Infatti è facile vedere che l'integrale in (11.18) è, a meno di un fattore numerico positivo, uguale a $|\langle \psi, \phi_{q,p;\Delta} \rangle|^2$.

Non solo l'integrale è positivo, ma anche l'integrando è positivo.

Questo è reso esplicito dalla seguente proposizione la cui dimostrazione si ottiene eseguendo le integrazioni richieste.

Proposizione 11.2 (Hardy)

Sia

$$\psi_{a,b}(x, \xi) = e^{\{-\frac{\xi^2}{a} - \frac{x^2}{b}\}}$$

e sia $f \in L^2(R^N)$.

i) Se $ab = 1$, $(W_f) * \psi_{a,b} \geq 0$.

ii) se $ab > 1$, $(W_f) * \psi_{a,b} > 0$.

iii) se $ab < 1$, esistono valori di x e ξ per i quali $(W_f) * \psi_{a,b}(x, \xi) < 0$.

◇

Per una generica matrice densità ρ l'operatore che ha nucleo integrale (positivo)

$$\tilde{H}_\rho^{q,p;\Delta}(x, y) \equiv W_\rho * W_{\phi_{q,p;\Delta}}(x, y)$$

viene indicato come *nucleo di Husimi* di ρ attraverso $\phi_{q,p;\Delta}$.

Poiché gli stati coerenti formano un sistema completo denso in $L^2(R^N)$ si può notare che, fissato Δ , per quasi tutti gli $\psi \in L^2(R^N)$ la conoscenza della funzione $(\psi, \tilde{H}_\rho^{q,p;\Delta}\psi)$ determina ρ .

Questo pone una corrispondenza tra un insieme denso nello spazio di Hilbert e funzioni positive nello spazio delle fasi che può essere posta alla base di una quantizzazione.

Ritorniamo nel seguito di questo Capitolo per descrivere brevemente questa quantizzazione (di Wick).

Le funzioni di Husimi sono poco utilizzate in Meccanica Quantistica, dove si preferisce utilizzare la quantizzazione di Weyl.

Esse sono molto utilizzate in ottica quantistica, dove hanno un ruolo importante gli stati coerenti e in teoria dei Campi Quantizzati, dove hanno un ruolo importante le misure gaussiane, gli operatori di creazione e distruzione e la quantizzazione di Wick.

La definizione di trasformata di Husimi può essere estesa a una vasta classe di operatori descritti da nuclei integrali. Dalle definizioni segue facilmente che per ciascun valore di Δ la condizione sul nucleo $\rho(x, y)$ per rappresentare un operatore di classe traccia è

$$\tilde{H}_\rho^{q,p;\Delta} \in L^1(R^{2N}) \quad \forall q, p, \Delta$$

Indicando con \mathcal{S} e rispettivamente \mathcal{S}' le classi di Schwartz delle funzioni e delle distribuzioni, dal fatto che ciascuna di queste due classi è trasformata in sé dalla trasformazione di Fourier si deducono le seguenti proprietà di regolarità

$$\rho(x, y) \in \mathcal{S}(R_x^N \times R_\xi^N) \Leftrightarrow W_\rho(x, \xi) \in \mathcal{S}(R_x^N \times R_\xi^N)$$

$$\rho \in \mathcal{S}'(R_x^N \times R_\xi^N) \Leftrightarrow W_\rho \in \mathcal{S}'(R_x^N \times R_\xi^N)$$

Più in generale si può considerare per ogni coppia di funzioni f, g la forma quadratica

$$W_{f,g}(x, \xi) = (2\pi)^{-N} \int e^{-i(\xi, y)} f\left(x + \frac{1}{2}y\right) \bar{g}\left(x - \frac{1}{2}y\right) dy \quad 11.18$$

(in questa notazione si ha $W_\psi \equiv W_{\psi, \psi}$).

Dalle proprietà della trasformazione di Fourier segue il Lemma

Lemma 11.3

Se $f, g \in \mathcal{S}(R^N) \times \mathcal{S}(R^N)$ allora $W_{f,g} \in \mathcal{S}(R^{2N})$.

Se $f, g \in \mathcal{S}'(R^N) \times \mathcal{S}'(R^N)$ allora $W_{f,g} \in \mathcal{S}'(R^{2N})$.

Se $f, g \in L^2(R^N) \times L^2(R^N)$ allora $W_{f,g} \in L^2(R^{2N}) \cap C_0(R^{2N})$ ed inoltre soddisfa

$$(W_{f_1, g_1}, W_{f_2, g_2}) = (f_1, f_2)(g_2, g_1) \quad \|W_{f,g}\|_\infty \leq \|f\|_2 \|g\|_2 \quad 11.19$$

◇

Consideriamo ora l'equazione a cui soddisfa la funzione di Wigner W_ϕ se ϕ soddisfa l'equazione di Schrödinger

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t} = H\phi \quad H = -\frac{1}{2}\Delta\phi + V\phi \quad \phi_{t=0} = \phi_0$$

Abbiamo dimostrato nel Capitolo 10 che sotto le condizioni

$$V \in L_{loc}^2(R^N), \quad V^- \in K^N(R^N), \quad \int_{|x|<R} |V(x)|^2 dx \leq c(1+R)^m \quad 11.20$$

(K^N indica la classe di Kummer), l'operatore H è autoaggiunto con dominio

$$D(H) \equiv \{\phi \in L^2(R^N), |V|\phi \in L_{loc}^1(R^N), \Delta\phi - V\phi \in L^2(R^N)\}$$

Sia ρ_0 una matrice densità. Poniamo $\rho(t) \equiv e^{-iHt} \rho_0 e^{iHt}$ ed indichiamo con $W_{\rho(t)}(x, \xi; t)$ la trasformata di Wigner di $\rho(t)$.

Sotto queste condizioni, vale il seguente Teorema (la semplice dimostrazione è lasciata al lettore)

Teorema 11.4

Supponiamo che V verifichi (11.20).

Allora $W_{\rho(t)}$ appartiene a

$$C(R_t, L^2(R_x^N \times R_\xi^N)) \cap C_b(R_t \times R_x^N, \mathcal{FL}^1(R_\xi^N)) \cap C_b(R_t \times R_\xi^N, \mathcal{FL}^1(R_x^N))$$

(abbiamo indicato con \mathcal{FL}^1 lo spazio di funzioni la cui trasformata di Fourier è in L^1) e soddisfa l'equazione di (11.8) per $\hbar = 1$. ◇

Per meglio comprendere l'utilità della funzioni di Wigner nello studio del limite semiclassico e in particolare la relazione con l'analisi fatta nel Capitolo 8, consideriamo una famiglia di funzioni u_ϵ che converge debolmente in $L^2(R^N)$ quando $\epsilon \rightarrow 0$.

Specializzeremo in seguito al caso $\epsilon = \sqrt{\hbar}$ e considereremo in particolare successioni di stati coerenti generalizzati che si concentrano in un punto dello spazio delle fasi e stati W.K.B. .

Introduciamo, mediante un cambiamento di scala, la successione di funzioni u_ϵ (parametrizzate dal parametro ϵ) e le loro trasformate di Wigner

$$\begin{aligned} W_{u_\epsilon}^\epsilon(x, \xi) &= \left(\frac{1}{2\pi\epsilon}\right)^N \int_{R^N} e^{-\frac{i}{\epsilon}(\xi, y)} u_\epsilon\left(x + \frac{y}{2}\right) \bar{u}_\epsilon\left(x - \frac{y}{2}\right) dy \\ &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^N \int_{R^N} e^{-i(\xi, z)} u_\epsilon\left(x + \frac{\epsilon z}{2}\right) \bar{u}_\epsilon\left(x - \frac{\epsilon z}{2}\right) dz \end{aligned} \quad 11.21$$

Introduciamo anche la corrispondente successione di funzioni (di Husimi) ottenute dalla funzione di Wigner di u_ϵ attraverso convoluzione con uno stato coerente

$$\widetilde{W}_{u_\epsilon}^\epsilon(x, \xi) = 2^{-N} (\pi\epsilon)^{-3N/2} \left| \int u_\epsilon(z) e^{-\frac{|x-z|^2}{4\epsilon}} e^{-\frac{i}{2\epsilon}(\xi, z)} dz \right|^2 \quad 11.22$$

Se la successione u_ϵ è limitata in $L^2(R^N)$, la successione $\widetilde{W}_{u_\epsilon}^\epsilon$ è una successione di funzioni non-negative in $L^1(R^N)$ che definiscono, se considerate come densità rispetto alla misura di Lebesgue, una successione di misure μ_{u_ϵ} .

Considereremo il limite $\epsilon \rightarrow 0$ di queste misure nel senso della topologia *-debole della misure di Borel.

Nello studio che faremo conviene introdurre uno spazio in cui le $W_{u_\epsilon}^\epsilon$ sono uniformemente limitate, per poter utilizzare risultati di compattezza.

Definiamo pertanto la seguente algebra di Banach

$$\mathcal{A} \equiv \{u \in C_0(R_x^N \times R_\xi^N), (\mathcal{F}_\xi u)(x, z) \in L^1(R_z^N, C_0(R_x^N))\} \quad 11.23$$

con la norma

$$\|\mathcal{F}_z(u_x)\|_{\mathcal{A}} = \int_{R^N} \sup_x |\mathcal{F}_\xi u|(x, z) dz$$

Notiamo che \mathcal{A} è un'algebra separabile che contiene densamente $S(R_x^N \times R_\xi^N)$, $C_0^\infty(R_x^N \times R_\xi^N)$ e tutte le combinazioni lineari di $u_1(x)u_2(\xi)$, con $u_k \in C_0^\infty(R^N)$ oppure $\widehat{u} \in C_0^\infty(R^N)$

In (11.23) abbiamo utilizzato la notazione $\mathcal{F}_\xi u$ per indicare la trasformata di Fourier di u rispetto alla variabile ξ . Con queste notazioni vale la Proposizione seguente

Proposizione 11.6

La successione $W_{u_\epsilon}^\epsilon$ è limitata in \mathcal{A} .

◇

Dimostrazione

Per calcolo esplicito

$$\int_{R^{2N}} (W_{u_\epsilon}^\epsilon \phi)(x, \xi) dx d\xi = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^N \int_{R^{3N}} (\mathcal{F}_\xi \phi)(x, y) u_\epsilon \left(x + \frac{\epsilon z}{2}\right) \bar{u}_\epsilon \left(x - \frac{\epsilon z}{2}\right) dx dy dz \quad 11.24$$

da cui

$$\begin{aligned} \left| \int_{R^{2N}} (W_{u_\epsilon}^\epsilon \phi)(x, \xi) dx d\xi \right| &\leq \left(\frac{1}{2\pi}\right)^N \left(\int_{R^N} \sup_x |(\mathcal{F}_\xi \phi)(x, y)| dy \right) \\ &\cdot \left(\sup_z \left| \int_{R^N} u_\epsilon \left(x + \frac{\epsilon z}{2}\right) \bar{u}_\epsilon \left(x - \frac{\epsilon z}{2}\right) dx \right| \right) \leq \left(\frac{1}{2\pi}\right)^N \|\phi\|_{\mathcal{A}} \|u_\epsilon\|^2 \quad 11.25 \end{aligned}$$

♡

Indichiamo con \mathcal{A}' il duale topologico di \mathcal{A} .

Dalla Proposizione 11.6 si deduce per compattezza che esiste una sottosuccessione $\{u_{\epsilon_n}\}$ che converge debolmente ad una funzione $u \in \mathcal{A}''$ e al tempo stesso $W_{u_{\epsilon_n}}^{\epsilon_n}$ converge nella topologia *-debole ad un elemento di \mathcal{A}'' che indicheremo con il simbolo μ .

Conviene notare che se u_{ϵ_n} converge debolmente ad u , non è detto che $W_{u_{\epsilon_n}}^{\epsilon_n}$ converga debolmente; occorre in generale scegliere un'ulteriore sottosuccessione convergente.

Allo stesso modo possiamo costruire successioni di funzioni di Husimi che, interpretate come densità, individuano successioni di misure $\widetilde{W}_{u_{\epsilon_n}}^{\epsilon_n}$ che convergono in \mathcal{A}'' (passando eventualmente a sottosuccessioni).

Indichiamo con $\widetilde{\mu}$ il limite di questa (sotto)-successione.

Vale il teorema seguente

Teorema 11.7

- 1) Si ha sempre $\mu = \widetilde{\mu}$
- 2) $\mu \geq |u(x)|^2 \delta_0(\xi)$
- 3) $\int_{R^N} |u(x)|^2 dx \leq \int_{R^{2N}} d\mu \leq \liminf_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{R^N} |u_\epsilon|^2 dx$

◇

Dimostrazione

Diamo la dimostrazione nel caso $N = 1$. Notiamo che

$$\widetilde{W}_{u_\epsilon}^\epsilon = W_{u_\epsilon}^\epsilon * G_\epsilon, \quad G_\epsilon = (\pi\epsilon)^{-1} e^{-\frac{(|x|^2 + |\xi|^2)}{\epsilon}} \quad 11.26$$

dove il simbolo $*$ sta per convoluzione nelle variabili spaziali.

Dobbiamo dunque dimostrare che, se $\phi \in \mathcal{A}$ (o in un insieme denso) allora $\phi * G_\epsilon$ converge a ϕ nella topologia di \mathcal{A} .

Da

$$\mathcal{F}_\xi(\phi * G_\epsilon)(x, z) = \left[(\mathcal{F}_\xi \phi)(x, z) (\pi\epsilon)^{-1/2} * e^{-\frac{|x|^2}{\epsilon}} \right] e^{-\epsilon \frac{|z|^2}{4}}$$

si vede che

$$\begin{aligned} \|\phi * G_\epsilon - \phi\|_{\mathcal{A}} &\leq \int_{R^N} \sup_x \left| \mathcal{F}_\xi \phi - \mathcal{F}_\xi \phi * (\pi\epsilon)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{|x|^2}{\epsilon}} \right| dz \\ &\quad + \int_{R^N} (1 - e^{\epsilon|z|^2/4}) \sup_x |\mathcal{F}_\xi \phi| dz \end{aligned} \quad 11.27$$

Il secondo termine converge a zero, e così anche il primo se $\phi \in \mathcal{S}(R^N \times R^N)$. Poiché quest'ultimo insieme è denso in \mathcal{A} il punto 1) del teorema è dimostrato. La dimostrazione del punto 3) dato il punto 2) segue facilmente da

$$\int_{R^{2N}} \tilde{\mu}_u \leq \liminf \int_{R^N} |u_\epsilon|^2 dx$$

Per la dimostrazione del punto 2), notiamo che per una successione compatta u_ϵ che converge debolmente a u in $L^2(R^N)$ si ha per ogni $z \in R^N$

$$u_\epsilon \left(x + \frac{\epsilon z}{2} \right) \bar{u}_\epsilon \left(x - \frac{\epsilon z}{2} \right) \rightarrow |u(x)|^2$$

Quindi, debolmente per sottosuccessioni in $\mathcal{S}'(R^N \times R^N)$

$$W_{u_\epsilon}^\epsilon \rightarrow |u(x)|^2 \quad 11.28$$

e da qui segue $\mu_u = \|u\|^2 \delta_0(\xi)$. Indichiamo con $\widetilde{W}(u, v)$ l'espressione

$$\widetilde{W}(u, v)(\xi, x) = (2\pi)^{-N} \int e^{-i(\xi, y)} u \left(x + \frac{y}{2} \right) \bar{v} \left(x - \frac{y}{2} \right) dy$$

Allora

$$\widetilde{W}_{u_\epsilon}^\epsilon \geq \widetilde{W}_u^\epsilon + 2\widetilde{W}_{u_\epsilon - u}^\epsilon$$

e per dimostrare il punto 2) basta dimostrare che $\widetilde{W}^\epsilon(u, v_\epsilon)$ converge debolmente a zero (nel senso delle misure) se $u \in C_0^\infty(R^N)$ e v_ϵ converge debolmente a zero in $L^2(R^N)$. Si ha

$$\begin{aligned} \widetilde{W}^\epsilon(u, v_\epsilon) &= (2\pi)^{-N} \operatorname{Re} \int e^{-i(\xi, y)} u \left(x + \frac{\epsilon y}{2} \right) \bar{v}_\epsilon \left(x - \frac{\epsilon y}{2} \right) dy \end{aligned} \quad 11.29$$

Dunque, per ogni $\phi \in \mathcal{S}(R^N \times R^N)$

$$\langle W^\epsilon(u, v_\epsilon), \phi \rangle = (2\pi)^{-N} \operatorname{Re} \int_{R^{2N}} dy dz \bar{v}_\epsilon(y) u\left(x + \frac{\epsilon y}{2}\right) (\mathcal{F}_\xi \phi)(y - \epsilon z/2, z)$$

Se $u \in C_0^\infty(R^N)$ si ha inoltre

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} u\left(x + \frac{\epsilon y}{2}\right) (\mathcal{F}_\xi \phi)\left(y - \frac{\epsilon z}{2}, z\right) = u(x) \mathcal{F}_\xi \phi(y, z) \quad 11.30$$

nella topologia di $L^2(R_z^N, L^2(R_x^N))$.

Ne segue che $W^\epsilon(u, v_\epsilon)$ converge debolmente a zero in \mathcal{A}' .

Con stime analoghe si dimostra che $\widetilde{W}^\epsilon(u, v_\epsilon)$ converge debolmente a zero nel senso delle misure.

♡

Nota 11.3

Le seguenti osservazioni possono essere utili e sono facilmente verificabili

- a) Può avvenire che $\mu = 0$ (vedremo un esempio esplicito in seguito)
- b) Se μ_u è la misura associata alla successione u_ϵ debolmente convergente ad u , allora

$$\mu(\cdot - x_0, \cdot - \xi_0)$$

è la misura associata alla successione

$$u_\epsilon(x - x_0) e^{i \frac{(\xi_0, x)}{\epsilon}}$$

- c) La misura μ_u è anche il limite (per sottosuccessioni) per $\epsilon \rightarrow 0$ di

$$(2\pi)^{-N} \int e^{-i(\xi, z)} u_\epsilon\left(x + \frac{\alpha \epsilon z}{2}\right) \bar{u}_\epsilon\left(x - \frac{\beta \epsilon z}{2}\right) dz$$

per tutti i valori dei parametri $\alpha, \beta \in (0, 1)$, $\alpha + \beta = 1$.

- d) Se la misura μ_u è associata alla successione u_ϵ e la misura ν_v è associata alla successione v_ϵ , in generale alla successione $(u_\epsilon + v_\epsilon)$ non è associata la misura $\mu_u + \nu_v$ (ad esempio se $u_\epsilon = v_\epsilon$ la misura associata è $4\mu_u$).

Questa proprietà riflette il principio di sovrapposizione in Meccanica Quantistica.

L'additività si ha sempre quando le misure μ e ν sono mutuamente singolari.

♣

Esempio 1

Successione di funzioni che si concentrano in un punto

$$u_\epsilon(x) \equiv \frac{1}{\epsilon^{\frac{N\alpha}{2}}} u\left(\frac{x}{\epsilon^\alpha}\right) \quad 11.31$$

Allora si ha

$$\begin{aligned} \alpha < 1 & \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} W_{u_\epsilon}^\epsilon = \delta_0(x) \delta_0(\xi) \int |u(y)|^2 dy \\ \alpha > 1 & \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} W_{u_\epsilon}^\epsilon = 0 \\ \alpha = 1 & \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} W_{u_\epsilon}^\epsilon = \frac{1}{(4\pi)^N} |\widehat{u}(\xi)|^2 \delta_0(x) \end{aligned}$$

♣

Esempio 2 (stati coerenti)

$$u_\epsilon = \epsilon^{-\frac{N\alpha}{2}} u \left(\frac{x - x_0}{\epsilon^\alpha} \right) e^{i \frac{(\xi_0, x)}{\epsilon}} \quad 11.32$$

$$\begin{aligned} 0 < \alpha < 1 & \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} W_{\epsilon, u_\epsilon} = \|u\|_2^2 \delta_{x_0}(x) \delta_{\xi_0}(\xi) \\ \alpha > 1 & \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} W_{u_\epsilon}^\epsilon = 0 \\ \alpha = 1 & \quad W_{\epsilon, u_\epsilon} = (2\pi)^{-N} |\widehat{u}(\xi - \xi_0)|^2 \delta_{x_0}(x) \end{aligned}$$

Esempio 3 (stati WKB)

$$u_\epsilon(x) \equiv u(x) e^{ia(x)/\epsilon}, \quad u \in L^2(\mathbb{R}^N), \quad u(x) \in R \quad a \in W_{loc}^{1,1}(\mathbb{R}^N) \quad 11.33$$

Notiamo che $u_\epsilon(x + \frac{\epsilon^\alpha z}{2}) \bar{u}_\epsilon(x - \frac{\epsilon^\alpha z}{2})$ converge in $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^{2N})$ a $|u(x)|^2$ se $0 < \alpha < 1$ e a $|u(x)|^2 e^{i(\nabla a(x), z)}$ se $\alpha = 1$. Si ha quindi

$$\begin{aligned} \alpha < 1 & \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} W_{u_\epsilon}^\epsilon = |u(x)|^2 \delta_0(\xi) \\ \alpha = 1 & \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} W_{u_\epsilon}^\epsilon = |u(x)|^2 \delta(\xi - \nabla a(x)) \end{aligned}$$

♣

Esempio 4 (sovrapposizione di stati coerenti)

$$u_\epsilon = \sum_{x_j \neq x_k} \beta_j u^j \left(\frac{x - x_j}{\epsilon^\alpha} \right) e^{N/4} e^{i\xi, x/\epsilon} \quad 0 < \alpha < 1 \quad 11.34$$

Si verifica che il limite in questo caso è

$$\sum |\beta_j|^2 \delta(x - x_j) \delta(\xi - \xi_j)$$

♣

Uno studio dettagliato delle misure di Wigner nel limite semiclassico può essere trovato in [LP93].

Facendo uso della funzione di Wigner, studiamo ora il limite semiclassico. Abbiamo

Teorema 11.8 [LP93]

i) Supponiamo che V verifichi (11.20) e inoltre $V \in C^1(\mathbb{R}^N)$. Allora per ogni $T > 0$ f^{\hbar} converge per sottosuccessioni uniformemente in $|t| < T$ in senso *-debole (nella topologia di \mathbf{A}') verso una funzione $f \in C_b(\mathbb{R}^N)$ che soddisfa (11.11) nel senso delle distribuzioni.

ii) Se inoltre $V \in C^{1,1}(\mathbb{R}^N)$ e $V(x) \geq -c(1 + |x|^2)$, allora $f(t)$ è l'unica soluzione di (11.11) e rappresenta il trasporto di f_0 lungo il flusso di equazione

$$\dot{x} = \xi, \quad \dot{\xi} = -\nabla V$$

◇

Sotto le ipotesi del punto i) questo flusso non ha in generale soluzione unica. È facile allora costruire esempi di non unicità prendendo stati coerenti localizzati su soluzioni diverse.

Cenno di dimostrazione del Teorema 11.8

Per densità è sufficiente dimostrare che, se

$$\phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}_x^N \times \mathbb{R}_\xi^N), \quad \mathcal{F}_\xi \phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_x^N \times \mathbb{R}_\xi^N)$$

e se K_{\hbar} è definito come in (11.9), allora l'espressione $\langle K_{\hbar} *_{\xi} f^{\hbar}, \phi \rangle$ è limitata per $|t| \leq T$ e converge debolmente, quando $\hbar \rightarrow 0$, a

$$\int_{\mathbb{R}^{2N}} (\nabla V(x), \nabla_{\xi} \phi(x, \xi)) f(x, \xi) dx d\xi.$$

Si ha

$$\langle K_{\xi} * f, \phi \rangle = \frac{i}{(2\pi)^N} \langle f^{\hbar}, \phi^{\hbar} \rangle_{\mathcal{A}' \otimes \mathcal{A}}$$

dove

$$\phi^{\hbar}(x, \eta) = \int_{\mathbb{R}^N} (\mathcal{F}_{\xi} \phi)(x, y) e^{i(\eta, y)} \hbar^{-1} \left[V\left(x + \frac{\hbar z}{2}\right) - V\left(x - \frac{\hbar z}{2}\right) \right] dy \quad 11.35$$

Ne segue per ogni $\phi \in \mathcal{A}'$

$$\left\langle \frac{\partial f^{\hbar}}{\partial t}, \phi^{\hbar} \right\rangle - \langle f^{\hbar}, (\xi, \nabla_x \phi^{\hbar}) \rangle + \langle f^{\hbar}, (K_{\hbar} * 1) \phi^{\hbar} \rangle = 0$$

Quando \hbar tende a zero le successioni ϕ^{\hbar} e $\frac{\partial f^{\hbar}}{\partial t}$ convergono nella topologia indotta da \mathcal{A}' .

Tenendo conto della convergenza in \mathcal{A}' di ϕ^{\hbar} verso ϕ si ha

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial t}, \phi \right\rangle - \langle f, (\xi, \nabla_x \phi) \rangle + \langle f, (\nabla V, \nabla_\xi \phi) \rangle = 0 \quad 11.36$$

e quindi il limite $f \equiv \lim_{\hbar \rightarrow 0} f^{\hbar}$ soddisfa in senso debole l'equazione (11.10). Per dimostrare il punto ii), occorre fare un'integrazione per parti per passare dalla forma debole della soluzione alla forma forte nel caso classico. Per questo conviene regolarizzare f (per poi passare al limite) e utilizzare il fatto che la soluzione classica è di classe Lipschitz. Si può dimostrare che sotto le ipotesi fatte sul potenziale questo scambio di limite è legittimo.

♡

Nota 11.4

L'analisi che abbiamo fatto per il limite semiclassico dell'equazione di Schrödinger può essere estesa, con poche modifiche, al *sistema di Schrödinger-Poisson*, che descrive la propagazione di un sistema di N particelle quantistiche soggette ad un campo elettrico generato dalla loro stessa carica ed ad un eventuale campo elettrico E_0 generato da una densità di carica esterna ρ_0 . Le equazioni che descrivono il sistema quantistico sono

$$i\hbar \frac{\partial \phi_j}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta \phi_j + V \phi_j, \quad j = 1, \dots, N$$

$$\Delta V = E_0 - \sum_j e_j |\phi_j(t, x)|^2$$

È possibile dimostrare (vedi [MM]) che il limite $\hbar \rightarrow 0$, che indichiamo con f (una funzione sullo spazio delle fasi) della funzione di Wigner associata alla densità (e della misura di Husimi) soddisfa il sistema di equazioni classiche (di Vlasov-Poisson)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\xi, \nabla f) - (E, \nabla_\xi f) = 0, \quad E(x) = \nabla_x \left(\int \frac{1}{|x-y|} \left[\rho_0(y) - \int f(y, \xi) d\xi \right] dy \right)$$

dove x, ξ sono le coordinate nello spazio delle fasi.

♣

11.1 RELAZIONE TRA FUNZIONI DI WIGNER E QUANTIZZAZIONE DI WEYL OPERATORI PSEUDODIFFERENZIALI

La quantizzazione di Weyl è strettamente connessa alla trasformata di Wigner, che ne è la controparte nella rappresentazione di Schrödinger.

Sia \mathcal{S} lo spazio della funzioni $a(q, p)$ su R^{2d} di classe Schwartz.

Nel caso particolare della quantizzazione di Weyl utilizziamo la notazione $Op_{\hbar}^w(a)$ (anzichè $\mathcal{Q}(a)$) per l'operatore che viene associato alla funzione $a(q, p)$, $q, p \in R^d$.

Si ha, se $l(q, p)$ è una uno-forma su $T(R^N)$

$$Op_{\hbar}^w(e^{itl(q,p)}) = e^{itl(x, \frac{\hbar}{i}\nabla_x)} \quad 11.37$$

e quindi

$$(\phi, Op_{\hbar}^w(a)\phi) = \|Op_{\hbar}^w(a)\phi\|^2 = \int W(q, p)(\mathcal{F}\phi)(p, q) dpdq \quad 11.38$$

dove abbiamo indicato con \mathcal{F} la trasformazione di Fourier.

Nella rappresentazione di Schrödinger, come operatore su $L^2(R^d)$ questa relazione si traduce in

$$(Op_{\hbar}^w(a)\phi)(x) \equiv (2\pi\hbar)^{-d} \int \int a\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) e^{\frac{i}{\hbar}(x-y, \xi)} \phi(y) dy d\xi \quad 11.39$$

o equivalentemente

$$(Op_{\hbar}^w(a)\phi)(x) = \int \tilde{a}\left(\frac{x+y}{2}, x-y\right) \phi(y) dy, \quad \tilde{a}(\eta, \xi) \equiv (2\pi\hbar)^{-d} \int a(\eta, z) e^{\frac{i}{\hbar}(z, \xi)} dz \quad 11.40$$

La funzione $a(x, \xi)$ verrà detta *simbolo dell'operatore* $Op_{\hbar}^w(a)$.

Alcuni autori chiamano la funzione $a(x, \xi)$ *simbolo contravariante* per distinguerlo dal *simbolo covariante* che introdurremo ora.

La terminologia *controvariante* deriva dal fatto che questo simbolo (o piuttosto la sua trasformata di Fourier) è in dualità con la funzione di Wigner.

Ricordiamo che il sistema di Weyl (che origina l'algebra di Weyl) viene definito introducendo una fattore di fase per rendere più simmetrico il prodotto nell'algebra di Weyl.

Questo porta a definire una *trasformazione di Fourier simplettica* e definire il simbolo (di Weyl) *covariante* \tilde{a} dell'operatore $Op_{\hbar}^w(a)$ mediante $\tilde{a}(z) = a(Jz)$ dove $z \in C^d \equiv R^{2d}$ e J è la matrice simplettica.

Si ha quindi

$$Op_{\hbar}^w(a) = \int \tilde{a}(z) \hat{T}(z) dz \quad \hat{T}(z) = e^{\frac{i}{\hbar}(\xi\hat{q} - x\hat{p})}, \quad z = x + i\xi.$$

I simboli di Weyl covarianti sono particolarmente utili nell'analisi del moto quantistico dovuto ad hamiltoniane quadratiche (e quindi di gruppi di trasformazioni simplettiche lineari nello spazi della fasi classico); quindi sono utili nell'analisi semiclassica che abbiamo descritto nel Capitolo 8.

In particolare nel caso degli stati coerenti gaussiani

$$\phi_z = \widehat{T}(z)\phi_0 \quad \phi_0(x) = (\pi\hbar)^{-\frac{d}{4}} e^{-\frac{x^2}{2\hbar}}$$

si ha

$$(\phi_z, Op_{\hbar}^w \phi_0) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{R^{2d}} \tilde{a}(z) e^{-\frac{|\zeta-z|^2}{4\hbar} - \frac{i}{2\hbar} \sigma(\zeta, z)} d\zeta dz$$

dove $\sigma(\zeta, z) = \Im(\bar{\zeta}z)$ e abbiamo indicato con \widehat{a} la trasformata di Fourier di a

Noi non utilizzeremo nel seguito i simboli covarianti e intenderemo sempre con il nome *simbolo di un operatore pseudodifferenziale* il simbolo controvariante.

Notiamo che la definizione (11.39) può anche essere scritta

$$(Op_{\hbar}^w(a) \phi)(x) = \frac{(-1)^d}{(2\pi\hbar)^d} \int \int e^{\frac{2i}{\hbar}(z, \xi)} a\left(\frac{1}{2}z, \xi\right) \phi(x-z) d\xi dy$$

e che in questa forma può essere utilizzata per definire un operatore *anche a partire da funzioni che non appartengono a \mathcal{S}* .

Si vede facilmente che

$$Op_{\hbar}^w(a) = \int \int e^{i[(p, x) + \hbar(q, D_x)]} \widehat{a}(p, q) dp dq = \int W(q, p) \widehat{a}(q, p) dq dp \quad D_x = \frac{\hbar}{i} \nabla.$$

In particolare

$$\|Op_{\hbar}^w(a)\|_{L^2}^2 \leq \int \int |(\mathcal{F}a)(p, q)|^2 dq dp \quad 11.41$$

Tuttavia l'integrabilità del valore assoluto della funzione $\mathcal{F}a$ *non è condizione necessaria* perchè Op_{\hbar}^w sia un operatore limitato.

Definizione 11.1

Gli operatori ottenuti mediante la quantizzazione di Weyl vengono detti *operatori pseudodifferenziali*; essi sono una sottoclasse degli *operatori integrali di Fourier*; questi ultimi sono ottenuti da (11.40) sostituendo il fattore $e^{\frac{i}{\hbar}(x-y, \xi)}$ con il fattore $e^{\frac{i}{\hbar}f(x, y, \xi)}$ dove f è una funzione regolare dei suoi argomenti.

◇

Nota 11.7

La notazione *pseudodifferenziale* proviene dal fatto che se $a(q, p) = P(p)$ dove P è un polinomio a coefficienti numerici, l'operatore $Op_{\hbar}^w(a)$ è un operatore differenziale; se $a(q, p) = f(q)$, l'operatore $Op_{\hbar}^w(a)$ è l'operatore di moltiplicazione per la funzione $f(x)$.

Conviene tuttavia notare che se il polinomio in p ha coefficienti che dipendono da q la sua quantizzazione di Weyl *non* è un operatore differenziale se la dipendenza da q non è lineare.

♣

Per una trattazione molto dettagliata degli operatori pseudodifferenziali, anche in connessione con il limite semiclassico si può vedere [R], [G], [M].

La relazione tra il simbolo di Weyl di un operatore e la trasformata di Wigner di una matrice densità (in particolare di un proiettore su una funzione d'onda), è ottenuta utilizzando la dualità naturale tra operatori limitati e matrici densità. Questa relazione è data in modo esplicito da

$$(Op_{\hbar}^w(a)f, g) = (a(D, x)f, g) = \int \int a(\xi, x)W_{f,g}(\xi, x)d\xi dx \quad \forall f, g \in \mathcal{D}(a(D, x)) \quad 11.42$$

dove

$$W_{f,g}(\xi, x) \equiv \int e^{-i(\xi, p)} f\left(x + \hbar \frac{p}{2}\right) \bar{g}\left(x - \hbar \frac{p}{2}\right) dp$$

e abbiamo posto $D = \frac{\hbar}{i}\nabla$.

Ne deduciamo che la funzione di Wigner associata ad una matrice densità ρ è il simbolo di ρ visto come operatore pseudodifferenziale.

Definendo in generale

$$W_F(\xi, x) \equiv \int e^{-i(p, \xi)} F\left(x + \hbar \frac{p}{2}, x - \hbar \frac{p}{2}\right) dp \quad 11.43$$

e notando che si tratta della composizione della trasformazione di Fourier con una trasformazione di variabili che preserva la misura di Lebesgue, si vede che la (11.43) preserva le classi \mathcal{S} e \mathcal{S}' ed è unitaria in $L^2(\mathbb{R}^{2d})$.

Risulta

$$Op_{\hbar}^w(\bar{a}) = Op_{\hbar}^w(a)^*$$

Teorema 11.9

Siano l_1, \dots, l_k funzioni lineari indipendenti su \mathbb{R}^{2d} tali che $\{l_h, l_i\} = 0$.

Sia $\tau : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ un polinomio.

Definiamo

$$a(\xi, x) \equiv \tau(l_1(\xi, x), \dots, l_k(\xi, x))$$

Allora

- i) $a(D, x)$ è un'applicazione di \mathcal{S} in L^2 ed è un operatore autoaggiunto.
- ii) per ogni funzione continua g vale

$$g(a)(D, x) = g(a(D, x))$$

◇

Non diamo la facile dimostrazione di questo teorema.

Dalla definizione e analizzando la dualità tra funzioni di Wigner e operatori pseudodifferenziali si vede che

- 1) $Op_{\hbar}^w(a)$ è un'applicazione continua $\mathcal{S}(X) \rightarrow \mathcal{S}'(X)$
 2) $Op_{\hbar}^w(a)$ si estende ad un'applicazione continua $\mathcal{S}'(X) \rightarrow \mathcal{S}'(X)$

$$\text{Tr}(Op_{\hbar}^w(a) Op_{\hbar}^w(\rho)) \equiv \int a(p, q) \widehat{\rho}(p, q) dp dq, \quad \widehat{\rho}(p, q) = \int e^{i(p \cdot q')} \rho(q', q) dq' \quad 11.44$$

- 3) Se $a \in L^2(C^d)$, allora $Op_{\hbar}^w(a)$ è di classe Hilbert-Schmidt e si ha

$$|Op_{\hbar}^w(a)|_{H.S.} = (2\pi \hbar)^{-\frac{d}{2}} \left[\int |a(z)|^2 dz \right]^{1/2} \quad 11.45$$

- 4) Se $A, B \in L^2(C^d)$, allora il prodotto $Op_{\hbar}^w(a) \cdot Op_{\hbar}^w(b)$ è di classe traccia e

$$\text{Tr}(Op_{\hbar}^w(a) \cdot Op_{\hbar}^w(b)) = (2\pi \hbar)^{-d} \int \bar{a}(z) b(z) dz \quad 11.46$$

Per trovare condizioni sul simbolo a sotto le quali l'operatore $Op_{\hbar}^w(a)$ è limitato si potrebbe procedere utilizzando la dualità tra operatori e stati che si traduce in

$$(\psi, Op_{\hbar}^w(a)\psi) = \int \widehat{a}(p, q) W_{\psi}(p, q) dq dp \quad 11.47$$

In particolare si ha $\|Op_{\hbar}^w(a)\| \leq |\widehat{a}|_1$, ma la condizione $|\widehat{a}|_1 < \infty$ non è necessaria affinché $Op_{\hbar}^w(a)$ sia un operatore limitato.

Se si vuole trovare una limitazione di $Op_{\hbar}^w(a)$ in funzione del simbolo $a(x, \frac{\hbar}{i}\nabla)$ utilizzando la dualità con la funzione di Wigner W_{ψ} bisogna tener presente che la funzione di Wigner può avere forti oscillazioni locali.

Tali oscillazioni dovranno essere compensate da regolarità del simbolo; questo è il contenuto del teorema di Calderon Vaillancourt.

Dall'analisi che faremo segue che le condizioni che porremo sul simbolo sono lungi dall'essere necessarie.

Diamo una traccia della dimostrazione del teorema di Calderon-Vaillancourt perchè essa è il prototipo di analoghe dimostrazioni di altre proprietà di $Op_{\hbar}^w(a)$ e mette in luce il carattere *semiclassico* della quantizzazione di Weyl.

Teorema 11.11 (Calderon- Vaillancourt)

Se

$$A_0(a) \equiv \sum_{|\alpha|+|\beta| \leq 2d+1} |D_{\xi}^{\alpha} D_x^{\beta} a(x, \xi)|_{\infty} < \infty, \quad x, \xi \in R^d \quad 11.48$$

allora l'operatore $Op_{\hbar}^w(a)$ su $L^2(R^d)$ è limitato e la sua norma soddisfa

$$\|Op_{\hbar}^w(a)\| < c(d) A_0 \quad 11.49$$

dove la costante $c(d)$ dipende dalla dimensione d dello spazio della configurazioni.

◇

La dimostrazione del teorema di Calderon-Vaillancourt si basa sullo scrivere il simbolo a come

$$a(x, \xi) = \sum_{j,k} a(x, \xi) \zeta_{j,k}(x, \xi), \quad \sum_{j,k} \zeta_{j,k} = 1 \quad 11.50$$

dove $\zeta_{j,k}$ sono funzioni regolari che formano un ricoprimento di R^{2d} e di cui ciascuna ha supporto in un ipercubo di centro j, k e di lato $2\hbar^{\frac{1}{2}}$; notiamo che nello spazio delle fasi il prodotto $x_j \xi_k$ ha la dimensione di un'azione.

Vengono poi date stime sulla norma di $Op_{\hbar}^w\left(\sum_{j,k \in \Gamma} a(x, \xi) \zeta_{j,k}\right)$, dove Γ è una regione finita dello spazio, ponendo condizioni sulle derivate di $a(x, \xi)$ fino ad un ordine che dipende dalla dimensione d dello spazio delle configurazioni.

Queste condizioni riflettono le immersioni degli spazi di Sobolev $H^p(R^{2d})$ negli spazi di funzioni continue per opportuni valori di p (che dipendono dalle dimensioni d dello spazio delle configurazioni).

Si controlla infine il limite $\Gamma \rightarrow R^d$ utilizzando la decrescita del simbolo $a(x, \xi)$ all'infinito. Come usuale, in quest'ultimo passo si chiede inizialmente più decadimento all'infinito del simbolo e si conclude per densità la stima per la classe di simboli indicata nel teorema.

Le stime sulla norma di $Op_{\hbar}^w(a\zeta_{j,k})$ si basano sul fatto che questi operatori definiti su $L^2(R^d)$ sono quasi un prodotto di un proiettore su una regione dello spazio delle configurazioni e di un proiettore su una regione nello spazio degli impulsi.

Il quasi riflette il fatto che si utilizzano approssimanti regolari delle funzioni caratteristiche della partizione e che le variabili \hat{x} e \hat{p} non commutano.

Tenendo presente che il volume degli ipercubi è di ordine di grandezza \hbar^d , queste considerazioni qualitative spiegano perchè nello studio del limite semiclassico vengano utilizzate le stime che vengono fatte nello studio degli operatori pseudodifferenziali di tipo $Op_{\hbar}^w(a)$.

La dimostrazione del teorema di Calderon-Vaillancourt si basa su due Lemmi di interesse indipendente.

Il primo è il teorema di Cotlar-Knapp-Stein di cui diamo la versione data in [H]; questo articolo può essere utilmente consultato per un approfondimento delle teoria degli operatori pseudodifferenziali.

Nel seguito utilizzeremo unità di misura in cui $\hbar = 1$.

Teorema 11.10 (Cotlar-Knapp-Stein)

Sia \mathcal{H} uno spazio di Hilbert.

Se una successione finita di operatori limitati A_1, A_2, \dots, A_N soddisfa

$$\sum_{k,j=1}^N \|A_j^* A_k\| \leq M, \quad \sum_{k,j=1}^N \|A_j A_k^*\| \leq M \quad 11.51$$

allora si ha

$$\sum_{k=1}^N \|A_k\| \leq M \quad 11.52$$

◇

Dimostrazione

La dimostrazione segue la traccia della dimostrazione dell'analogia proprietà algebrica per matrici finite.

Per ogni intero m si ha

$$\|A\|^{2m} = \|(A^*A)^m\|$$

D'altra parte

$$(A^*A)^m = \sum_{1 \leq j_1 \leq j_2 \dots \leq j_m} A_{j_1}^* A_{j_2} \dots A_{j_{2m-1}}^* A_{j_{2m}}$$

Si ha

$$\|A_{j_1}^* A_{j_2} \dots A_{j_{2m-1}}^* A_{j_{2m}}\| \leq \min \left\{ \|A_{j_1}^* A_{j_2}\| \dots \|A_{j_{2m-1}}^* A_{j_{2m}}\|, \|A_{j_1}^*\| \|A_{j_1} A_{j_2}^*\| \dots \|A_{j_{2m}}\| \right\}$$

Utilizzando la disuguaglianza per numeri positivi $\min\{a, b\} \leq \sqrt{ab}$ e tenendo presente che per ipotesi $\|A_j\| \leq M$ e $\|A_j^*\| \leq M$ si ottiene

$$\|A_{j_1}^* A_{j_2} \dots A_{j_{2m-1}}^* A_{j_{2m}}\| \leq M \|A_{j_1}^* A_{j_2}\|^{\frac{1}{2}} \dots \|A_{j_{2m-1}}^* A_{j_{2m}}\|^{\frac{1}{2}}$$

Sommando su j_2, j_3, j_{2m} si ottiene

$$\|A\|^{2m} \leq NM^{2m}$$

da cui, prendendo i logaritmi, dividendo per N e passando al limite per $m \rightarrow \infty$

$$\|A\| \leq M$$

♡

Il teorema si generalizza facilmente al caso in cui la somma venga sostituita con l'integrazione su uno spazio Y di misura finita.

In questo caso il teorema di Cotlar-Knapp-Stein prende la forma

Teorema 11.11 (Kotlar-Knapp-Stein, versione continua)

Sia Y uno spazio di misura finita μ e $A(y)$ una famiglia misurabile di operatori su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} tali che

$$\int \|A(x)A(y)^*\| d\mu \leq C \quad \int \|A(x)^*A(y)\| d\mu \leq C \quad 11.53$$

Allora l'integrale $A = \int A(x)d\mu$ è definito per convergenza debole, e si ha $\|A\| \leq C$.

◇

Utilizzando il teorema 11.12 diamo una traccia di dimostrazione del teorema di Calderon-Valliantcourt.

Traccia di dimostrazione del Teorema di Calderon-Vaillantcourt

Costruiamo una partizione regolare dell'unità sullo spazio delle fasi mediante funzioni $\zeta_{j,k}(x, \xi)$.

Le funzione $\zeta_{i,j}$ sono di classe C^∞ e soddisfano

$$\zeta_{j,k}(x, \xi) = \zeta_{0,0}(x - j, \xi - k), \quad \sum_{j,k \in \mathbb{Z}} \zeta(x - j, \xi - k) = 1 \quad 11.54$$

Inoltre $\zeta_{0,0}(x, \xi)$ vale uno se $|x|^2 + |\xi|^2 \leq d$ e vale zero se $|x|^2 + |\xi|^2 \geq 2d$. Poniamo

$$a_{j,k} = \zeta_{j,k} a \quad A_{j,k} = Op_h^w(a_{j,k}). \quad 11.55$$

Dobbiamo controllare che i corrispondenti operatori siano limitati e che la loro somma converga nella topologia debole o forte degli operatori.

Vedremo che questo implica delle condizioni di regolarità del simbolo a nella sua dipendenza dalle variabili x e ξ .

Poiché le $\zeta_{j,k}$ sono ottenute una dall'altra per traslazione, le condizioni di regolarità non dipendono dagli indici j, k .

Dalle definizioni segue che $\sum A_{j,k}$ converge ad $Op_h^w(a)$ nella topologia della funzioni da $\mathcal{L}(\mathcal{S}(R^d))$ a $\mathcal{L}(\mathcal{S}'(R^d))$.

Noi siamo interessati a condizioni affinché la convergenza sia in $\mathcal{B}(L^2(R^d))$. Per questo è sufficiente dimostrare che esiste un intero $K(d)$ tale che, per ogni parte finita Γ del reticolo

$$\left\| \sum_{j,k \in \Gamma} A_{j,k} \right\| \leq C \sup_{|\alpha| \leq K(d), |\beta| \leq K(d), (x, \xi) \in R^d} |\partial_\xi^\alpha \partial_x^\beta a(x, \xi)| \quad 11.56$$

Questo provvede le condizioni sul simbolo a affinché l'operatore sia limitato e al tempo stesso provvede un limite alla sua norma.

Dal teorema 11.11 discende che è sufficiente controllare la norma di

$$A_\gamma^* \cdot A'_\gamma$$

dove abbiamo indicato con γ una scelta qualunque di indici e abbiamo ommesso l'apice N .

Se $a_{\gamma, \gamma'}$ viene definito da

$$Op_h^w(a_{\gamma, \gamma'}) = A_\gamma^* \cdot A'_\gamma \quad 11.57$$

dalla definizioni e dalla relazioni di Weyl un calcolo elementare dà

$$a_{\gamma, \gamma'} = e^{\frac{i}{2}\sigma(D_x, D_\xi; D_y, D_\eta)}(\bar{a}_\gamma(x, \xi) \cdot a_{\gamma'}(y, \eta))_{y=x, \eta=\xi} \quad 11.58$$

$$\forall \gamma \in Z^{2d} \quad a_\gamma \in L^2(R^d)$$

dove σ è la forma simplettica standard.

Notare che la (11.51) provvede una stima immediata della norma di $Op_h^w(a)$ ma in termini della trasformata di Fourier totale \hat{a} .

Noi cerchiamo ora una corrispondente relazione in termini di $a(x, \xi)$; la limitazione su a verrà dall'immersione di Sobolev, ma questa è valida per funzioni a supporto compatto.

Notiamo che il supporto di a_γ è contenuto nella palla in R^{2d} di raggio $d\sqrt{2}$.

La partizione dello spazio della fasi che abbiamo fatto serve a *localizzare* le stime; il numero di elementi nel procedimento di Cottlar-Kneipp-Stein di cui dovremo analizzare il prodotto dipenderà dalle dimensioni $2d$ dello spazio delle fasi. Inoltre $\sum_{n \in Z^{2d}} A(\gamma)$ converge a $A = Op_h^w a$ nella topologia degli operatori lineari limitati da $\mathcal{S}(R^d)$ a $\mathcal{S}'(R^d)$.

È pertanto sufficiente dimostrare che per ogni parte finita Γ di Z^{2d}

$$\left\| \sum_{\gamma \in \Gamma} A(\gamma) \right\|_{L^2(R^d)} \leq C(d) \sup_{|\alpha| \leq 2d+1, |\beta| \leq 2d+1, (x, \xi) \in R^{2d}} |\partial_\xi^\alpha \partial_x^\beta a(x, \xi)| \quad 11.59$$

Utilizziamo per questo il teorema 11.10. Per far questo dobbiamo avere un controllo di $\|A_\gamma^* \cdot A_{\gamma'}\|$ e quindi della norma dell'operatore quantizzazione di Weyl di $a_{\gamma, \gamma'}$.

Per stimare la norma di $Op_h^w(a_{\gamma, \gamma'})$ utilizziamo una disuguaglianza tipo Sobolev. Se B è una forma quadratica reale su R^{2d} allora per ogni $R > 0$ e ogni intero $M \geq 1$ si ha, per un'opportuna costante $C(R, M)$, per tutte le funzioni $u \in C_0^\infty(B(x_0, R))$ e per ogni $x_0 \in R^{2d}$

$$\left| e^{iB(x, D)} u(x) \right| \leq C(R, M)(1 + |x - x_0|^2)^{-d} \sup_{|\alpha| \leq 2M+d+1, x \in B(x_0, R)} |\partial_x^\alpha u(x)|. \quad 11.60$$

Questa disuguaglianza è una classica disuguaglianza di Sobolev se $x_0 = 0$, $M = 0$; vale per x_0 qualunque perchè l'operatore considerato commuta con la traslazioni ed è soddisfatta per qualunque valore di M perchè

$$\mathcal{F}_{x \rightarrow \zeta}[(1 + q|x|^2)^M e^{iB(D)} u](\zeta) = e^{iB(\zeta)} \sum_{|\alpha| + |\beta| \leq 2M} C_{\alpha, \beta} \mathcal{F}_{x \rightarrow \zeta}[x^\beta \partial^\alpha u](\zeta)$$

dove abbiamo indicato con il simbolo $\mathcal{F}_{x \rightarrow \zeta}$ la trasformata di Fourier totale e le costanti $C_{\alpha, \beta}$ dipendono solo dalla dimensione d e dalla forma quadratica B .

Questo conclude la traccia di dimostrazione del teorema di Calderon-Valliantcourt. \heartsuit

Per caratterizzare le altre classi di operatori introduciamo due nuove definizioni

Definizione 11.2

Chiamiamo *peso temperato* su R^d una funzione continua positiva $m(x)$ tale che esitano costanti positive C_0 ed N_0 tali che

$$\forall x, y \in R^d \quad m(x) \leq C_0 m(y) (1 + |y - x|)^{N_0}$$

\diamond

Definizione 11.3

Se Ω è un aperto di R^d , $\rho \in [0, 1]$ e m un peso temperato, chiamiamo *simbolo di peso* (m, ρ) in Ω ogni funzione $a \in C^\infty(\Omega)$ tale che

$$\forall x \in \Omega \quad |\partial^\alpha a(x)| \leq C_\alpha m(x) (1 + |x|)^{-\rho|\alpha|}$$

In particolare la funzione ι (identicamente uguale ad uno) è un peso temperato. Utilizzeremo la notazione $\Sigma_{m, \rho}$ per lo spazio dei simboli di peso (m, ρ) e in particolare la notazione $\Sigma_\rho \equiv \Sigma_{\iota, \rho}$. \diamond

Con questa notazione si può dimostrare (la dimostrazione di questo teorema procede secondo le linee della dimostrazione del teorema di Calderon-Vaillantcourt).

Teorema 11.12

1) Se il simbolo a appartiene a $\Sigma_{\iota, 0}$ esiste un numero reale $T(d)$ che dipende solo dalla dimensione dello spazio tale che

$$\|Op_h^w(a)\|_{\text{Tr}} \leq T(d) \sum_{|\alpha|+|\beta| \leq d+2} \int \int |\partial_x^\alpha \partial_\eta^\beta a(x, \eta)| dx d\eta \quad 11.61$$

(α e β sono multi-indici).

2) Se $a \in \Sigma_{m, 0}$ con un peso che verifica $\lim_{|x|+|\eta| \rightarrow \infty} m(x, \eta) = 0$ allora la chiusura dell'operatore $Op^w(a)$ è un operatore compatto su $L^2(R^N)$. \diamond

Sostanzialmente si tratta di utilizzare la dualità con le funzioni di Wigner e utilizzare il fatto che gli operatori di classe traccia e di Hilbert-Schmidt sono somma di proiettori con una convergenza in l^1 e l^2 rispettivamente e che un operatore compatto è limite in norma di una successione di operatori di Hilbert-Schmidt.

Una condizione *più stringente* ma che ammette una dimostrazione più semplice (utilizzando ancora la dualità tra gli operatori pseudodifferenziali e le funzioni

di Wigner) e dà una stima della norma in classe traccia dell'operatore è data dal teorema successivo

Teorema 11.14

Sia $a \in \Sigma_{\iota,0}$ tale che per tutti i multi-indici α e β si abbia

$$\partial_x^\alpha \partial_\eta^\beta a \in L^1(\mathbb{R}^{2d})$$

Allora $Op_\hbar^w(a)$ è di classe traccia e

$$\text{Tr } Op_\hbar^w(a) = \int \int a(x, \eta) dx d\eta \quad 11.62$$

◇

Risultati più semplici si ottengono se si cercano le condizioni sul simbolo affinché l'operatore sia di classe Hilbert-Schmidt.

Questo è dovuto al fatto che gli operatori di classe Hilbert-Schmidt sono caratterizzati dall'appartenere ad uno spazio di Hilbert e quindi si possono utilizzare tecniche di convergenza debole.

Un primo risultato in questa direzione è il seguente

Teorema 11.15

Sia $a \in \Sigma_{m,0}$, $b \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2N})$. Allora

$$\text{Tr}[Op_\hbar^w(a) \cdot Op_\hbar^w(b)] = \int \int a(x, p)b(x, p) dx dp \quad 11.63$$

◇

Dimostrazione

Consideriamo innanzitutto il caso in cui $B \equiv Op_\hbar^w(b)$ è di rango uno

$$B = \psi \otimes \phi \quad \psi, \phi \in \mathcal{S}$$

In questo caso

$$\text{Tr}(A \cdot B) = (\phi, A\psi) \quad A = Op^w(a)$$

Dalla definizione di $Op_\hbar^w(a)$ segue

$$(\phi, A\psi) = \int \int a(x, p) \left[\int e^{ip\zeta} \bar{\phi}\left(x + \frac{\zeta}{2}\right) \psi\left(x - \frac{\zeta}{2}\right) d\zeta \right] dx dp$$

L'equazione (11.63) risulta così dimostrata in questo caso.

La dimostrazione per B di rango finito procede sulla stessa linea, e si può prendere anche il limite utilizzando la regolarità assunta per $b(x, p)$.

♡

L'operazione di traccia permette di definire una forma sesquilineare (un prodotto scalare)

$$A, B \rightarrow \text{Tr}(A^*B) \equiv \langle A, B \rangle \quad 11.64$$

che può essere estesa a

$$\mathcal{L}(\mathcal{S}(R^{2d}), \mathcal{S}'(R^{2d})) \times \mathcal{L}(\mathcal{S}'(R^{2d}), \mathcal{S}(R^{2d}))$$

mantenendo la proprietà $\langle A, B \rangle = \langle B, A \rangle^*$.

Questa dualità permette di definire il simbolo $\sigma^w(a)$ di una distribuzione temperata a mediante

$$\text{Tr}(A \cdot Op^w(b)) = 2\pi^{-d}(b, \sigma^w(a)) \quad 11.65$$

La dualità può essere estesa ai simboli appartenenti a classi di Sobolev duali (rispetto a L^2).

Nota 11.10

Vale

$$a \in L^2(R^{2d}) \leftrightarrow Op_h^w(a) \in H.S.$$

ma non è vero che $|a|_\infty < \infty$ implichi che $a(D, x)$ sia limitato; ad esempio se $a(\xi, x) = e^{i(\xi, x)}$ si ha $(a(D, x))f(x) = \int f(y)dy \cdot \delta(x)$.



È conveniente introdurre alcune definizioni.

Definizione 11.4

Una funzione a su $C^d \equiv R^{2d}$ appartiene ad $O(M)$ se e solo se $f \in C^\infty$ e per ogni multi-indice m con $|m| = M$ si ha

$$\left| \frac{\partial^m}{\partial z^m} a(z) \right| \leq C|z^M|, \quad \forall z \in C^n \quad 11.66$$

Indichiamo con Σ_M la collezione di funzioni in $O(M)$.



Seguendo la traccia della dimostrazione del teorema 11.11 si può dimostrare

Teorema 11.16

- i) Se $a \in O(0)$, allora $Op^w(a)$ è un operatore limitato
- ii) Se $a \in O(M)$, $M \leq -2d$ allora $Op_h^w(a)$ è di classe traccia e

$$\text{Tr } Op_h^w(a) = (2\pi \hbar)^{-d} \int |A(z)| dz \quad 11.67$$

- iii) Se $a \in O(M)$ è reale, allora $Op_h^w(a)$ è essenzialmente autoaggiunto sulle funzioni C^∞ a supporto compatto.



Nota 11.11

Queste definizioni possono essere generalizzate per coprire anche il caso in $a(q, p)$ sia un operatore su uno spazio di Hilbert \mathcal{K} .

Questo è necessario quando si considerino problemi che contengono naturalmente due (o più) scale spaziali diverse.

Ad esempio nello studio della dinamica degli atomi e delle molecole o dei solidi cristallini o nella studio della stabilità di un sistema composto da N nuclei di carica Z e di NZ elettroni, è naturale utilizzare come piccolo parametro, che individua il rapporto tra le diverse scale, il rapporto $\epsilon \equiv \frac{m_e}{m_N}$ tra la massa dell'elettrone e la massa del nucleo.

All'ordine zero in questo parametro i nuclei sono considerati come centri fissi e viene determinata conseguentemente la dinamica del sistema di elettroni.

Questa dinamica, molto veloce, origina un campo di forze medio di natura potenziale che agisce sui nuclei, e al primo ordine in ϵ si studia la dinamica dei nuclei in questo campo medio (approssimazione di Born-Oppenheimer).

Analogamente, se un cristallo viene assoggettato ad un campo magnetico esterno lentamente variabile nello spazio o nel tempo occorre far uso dell'algebra di Weyl magnetica (Capitolo 7) e il parametro ϵ caratterizza la velocità di variazione del campo esterno.

In questo caso il metodo multiscale può essere utilizzato nello studio del moto degli elettroni nel cristallo. Il parametro ϵ gioca un ruolo simile alla costante di Planck nello studio del limite semiclassico.

In entrambi questi casi è necessario studiare un limite semiclassico di quantità i cui simboli a sono funzioni delle variabili classiche (p_k, q_k) a valori operatori nello spazio di Hilbert \mathcal{K} nel quale viene descritta la dinamica veloce (ad esempio lo spazio di Hilbert in cui viene descritta la dinamica degli elettroni mediante una hamiltoniana quantistica).

Non entriamo qui nel dettaglio di come questa generalizzazione possa essere fatta e della sua difficoltà, soprattutto proveniente dal fatto che i simboli che si considerano possono essere autoaggiunti ma illimitati come operatori su \mathcal{K} con conseguente necessità di controllo dei domini uniforme nel parametro ϵ .

Una strategia è considerare questi operatori limitati da uno spazio di Hilbert ad un altro spazio di Hilbert (ad esempio $\frac{d^2}{dx^2}$ è un operatore limitato se considerato come applicazione da $H^2(R)$ ad $L^2(R)$).

Una descrizione in termini relativamente elementari si può trovare su [GMS].

Ad esempio sussiste un analogo del Teorema di Calderon-Vaillancourt: se esiste una costante $b_d < \infty$ tale che

$$a \in C^{2d+1}(R^{2d}, \mathcal{B}(\mathcal{K})) \quad \sup_x \|a_x\| = b_d$$

allora $Op_{\hbar}^w(a) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ con la stima

$$\|Op_{\hbar}^w(a)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{H})} \leq b_d \sup_{|\alpha|+|\beta| \leq 2d+1} \sup_{q,p \in \mathcal{R}^d} \|(\partial_q^\alpha \partial_p^\beta a)(q,p)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{K})} \quad 11.68$$

♣

Il passo successivo consiste nello stabilire la corrispondenza tra prodotto di funzioni e prodotto dei corrispondenti operatori.

Anche quest'analisi può essere estesa al caso in cui i simboli sono funzioni delle variabili classiche a valori operatori nello spazio di Hilbert interno \mathcal{K} .

Ci possiamo ad esempio chiedere se, date due osservabili classiche a e b esista una terza osservabile classica c tale che $Op_{\hbar}^w(c) = Op_{\hbar}^w(a) \cdot Op_{\hbar}^w(b)$.

La risposta *in generale* è *negativa*.

Per ottenere una risposta almeno parzialmente positiva sarà necessario allargare la classe delle funzioni che consideriamo e considerare simboli che dipendono *esplicitamente* dal piccolo parametro \hbar .

Nella loro dipendenza da questo parametro devono inoltre ammettere uno sviluppo in serie a un ordine M (qualunque ma finito) tale che il simbolo $\hbar^{M+1}r_{\hbar}$ del termine residuo abbia le opportune proprietà di regolarità che garantiscano che $Op_{\hbar}^w r_{\hbar}$ sia un operatore limitato e si possa dare una stima esplicita della sua norma.

Questo controllo del termine residuo distingue la quantizzazione stretta mediante operatori pseudodifferenziali dalla quantizzazioni mediante serie formali in \hbar .

Ci limitiamo a considerare operatori pseudodifferenziali associati a simboli in $O(M)$.

Definizione 11.5

Un simbolo \hbar -ammissibile di peso M è un'applicazione di classe C^∞ da $\hbar \in]0, \hbar_0]$ a Σ_M tale che esista una collezione di funzioni $a_j(z) \in O(M)$ con la proprietà che, per ogni intero N e ogni multi-indice γ , esiste una costante C_N tale che

$$\sup_z \left[\left(\frac{1}{1+|z|^2} \right)^{n/2} \left| \frac{\partial^\gamma}{\partial z^\gamma} (a(z, \hbar) - \sum_1^N \hbar^j a_j(z)) \right| \right] < C_N \hbar^{N+1} \quad 11.69$$

◇

Definizione 11.6

Un operatore \hbar -ammissibile di peso M è un'applicazione di classe C^∞

$$A_{\hbar} : \hbar \in]0, \hbar_0] \Leftrightarrow \mathcal{L}(\mathcal{S}(\mathcal{R}^d), L^2(\mathcal{R}^d)) \quad 11.70$$

tale che esista una successione di simboli $a_j \in \Sigma_M$ e una successione $R_N \in \mathcal{L}(L^2(\mathcal{R}^d))$ tali che per ogni $\phi \in \mathcal{S}$

$$A_{\hbar} = \sum \hbar^j Op_{\hbar}^w a_j + R_N(\hbar), \quad \sup_{0 < \hbar \leq \hbar_0} \|R_N(\hbar)\phi\|_2 < \infty \quad \forall \phi \in L^2(\mathcal{R}^d) \quad 11.71$$

La funzione $a_0(z)$ è detta simbolo principale dell'operatore \hbar -ammissibile A_{\hbar} ; la indicheremo con il simbolo $\sigma_P(A_{\hbar})$. La funzione $a_1(z)$ è detta simbolo sottoprin-
cipale dell'operatore \hbar -ammissibile A_{\hbar} ; la indicheremo con il simbolo $\sigma_{SP}(A_{\hbar})$. ◇

Definizione 11.7

Indicheremo con \widehat{O}_M^{sc} l'immagine in $\mathcal{L}(\mathcal{S}(X))$ (l'insieme degli operatori lineari su $\mathcal{S}(X)$) ottenuta associando a ciascuna collezione di funzioni in Σ_M una collezione di operatori mediante la quantizzazione di Weyl. Questa classe di operatori viene spesso indicata con la dicitura *operatori \hbar -ammissibili*. ♣

Avendo così allargato la classe di oggetti, vale adesso la regola di prodotto

Teorema 11.18

Per ogni coppia $a \in O(M)$ e $b \in O(P)$ esiste unica un'osservabile semiclassica $\widehat{C} \in O_{M+P}^{sc}$ tale che risulti

$$Op_{\hbar}^w(a) \cdot Op_{\hbar}^w(b) = \widehat{C} \tag{11.72}$$

dove l'osservabile semiclassica \widehat{C} ha la seguente rappresentazione

$$\begin{aligned} \widehat{C} &= \sum \hbar^j Op_{\hbar}^w(c_j) \\ c_j &= 2^{-j} \sum_{|\alpha|+|\beta|=j} \frac{(1)^\beta}{\alpha! \beta!} (D_x^\beta D_\xi^\alpha a) (D_x^\beta D_\xi^\alpha b)(x, \xi) \end{aligned} \tag{11.73}$$

Inoltre vale

$$\frac{i}{\hbar} [Op_{\hbar}^w(a), Op_{\hbar}^w(b)] \in \widehat{O}^{sc}(M+P) \tag{11.74}$$

con simbolo principale la parentesi di Poisson $\{a, b\}$. ◇

Traccia della dimostrazione

La dimostrazione di questo teorema segue la linea di dimostrazione del teorema di Calderon-Vaillantcourt e utilizza la definizione di operatore associato a un simbolo, la dualità con le funzioni di Wigner e la forma esplicita del fattore di fase del prodotto di Weyl.

Conviene innanzitutto notare che la struttura dell'algebra di Weyl implica che, se L è una forma lineare su R^{2d} e $a_{\hbar} \in O(M)$ si ha

$$L(x, \hbar \nabla) Op_{\hbar}^w a_{\hbar} = Op_{\hbar}^w b_{\hbar}, \quad b_{\hbar} = L \cdot a_{\hbar} + \frac{\hbar}{2i} \{L, a_{\hbar}\} \tag{11.75}$$

dove $\{.,.\}$ è la parentesi di Poisson.

Questo serve per porre in una forma più conveniente il prodotto dei fattori di fase che entrano nella definizione del prodotto $Op_{\hbar}^w(a) \cdot Op_{\hbar}^w(a_1)$ in termini del duale delle funzioni di Wigner.

Ricordiamo che si ha per definizione

$$A_{\hbar}\phi(x) = \hbar^{-d} \int \int e^{\frac{2\pi i}{\hbar}(\frac{x+z}{2}, \xi)} \phi(y) dy d\xi \quad 11.76$$

e B ha una simile espressione.

Il nucleo integrale $K_{A_{\hbar} \cdot B_{\hbar}}$ dell'operatore $A_{\hbar} \cdot B_{\hbar}$ è allora dato da

$$K_{A_{\hbar} \cdot B_{\hbar}}(x, y) = \hbar^{2d} \int \int \int e^{\frac{i}{\hbar}[(x-z, \xi) + (z-y, \eta)]} a\left(\frac{1}{2}(x+z), \xi\right) b\left(\frac{1}{2}(y+z), \eta\right) dz d\xi d\eta \quad 11.77$$

Non è in generale vero che vi sia un simbolo c tale che $C_{\hbar} = Op^w(c)$.

Si può verificare tuttavia, utilizzando (11.76) e confrontando (11.76) con (11.73), che se $a_{\hbar}, b_{\hbar} \in O(M)$ l'operatore C_{\hbar} è ammissibile (appartiene a $\widehat{O}^{sc}(M)$) cioè per ogni $N \in \mathbb{Z}$ finito può essere scritto nella forma

$$C_{\hbar} = \sum_{n=0, \dots, N} c_N(\hbar) + \hbar^{N+1} R_{N+1}(\hbar) \quad 11.78$$

dove $a_n \in O(M)$ e $\sup_{\hbar \in [0, \hbar_0]} \|R_{N+1}(\hbar)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))}$,

♡

Nota 11.12

Il Teorema 11.18 si estende facilmente a tutte le classi di osservabili semiclassiche. Per ogni $A \in O^{sc}(M)$, $B \in O^{sc}(N)$ esiste unica un'osservabile semiclassica $C \in \widehat{O}^{sc}(N+M)$ tale che $\widehat{A} \cdot \widehat{B} = \widehat{C}$. Inoltre si applicano le regole usuali di composizione e di inversione.

♣

Dall'analisi precedente si possono dedurre le seguenti relazioni.

Siano A_{\hbar}, B_{\hbar} due operatori ammissibili. Allora valgono le seguenti relazioni per i simboli principali e sotto-principali

1)

$$\sigma_P(A_{\hbar} \cdot B_{\hbar}) = \sigma_P(A_{\hbar}) \cdot \sigma_P(B_{\hbar}) \quad 11.79$$

2)

$$\sigma_{SP}(A_{\hbar} \cdot B_{\hbar}) = \sigma_P(A) \cdot \sigma_P(B) + \sigma_{SP}(A) \cdot \sigma_P(B) + \frac{1}{2i} \{\sigma_P(A) \cdot \sigma_P(B)\} \quad 11.80$$

Queste relazioni rendono esplicita la corrispondenza tra il commutatore di due variabili quantistiche e la parentesi di Poisson delle variabili classiche corrispondenti.

L'introduzione delle osservabili semiclassiche è utile per studiare l'evoluzione nel tempo.

Si ha

Teorema 11.19

Sia $H \in O^{sc}(2)$ una hamiltoniana (classica) che soddisfa

$$\begin{aligned} |\partial_z^\gamma H_j(z)| &< c_\gamma, \quad \gamma + j \geq 2 \\ \hbar^{-2}(H - H_0 - \hbar H_1) &\in \widehat{O}_{sc}(0) \end{aligned} \quad 11.81$$

Sia $a \in O(m)$, $m \in Z$. Allora

i) Per ogni \hbar sufficientemente piccolo, \widehat{H} è essenzialmente autoaggiunto con dominio naturale $S(X)$. Dunque $\exp\{-i\hbar^{-1}\widehat{H}t\}$ è definito e unitario per ogni t , ed è continuo in t nella topologia forte.

ii)

$$\forall t \in R, \quad Op_\hbar^w(a(t)) \equiv e^{i\frac{t}{\hbar}\widehat{H}} Op^w(a) e^{-i\frac{t}{\hbar}\widehat{H}} \in \widehat{O}_{sc}(m) \quad 11.82$$

Inoltre

$$a(t) = \sum_{k \geq 0} \hbar^k a_k(t) \quad a_k(t) \in O_{sc}(m)$$

uniformemente sui compatti in t .

◇

Dimostrazione (cenno)

Per ipotesi il campo hamiltoniano considerato ha crescita al più lineare all'infinito, dunque il flusso classico $\{q(0), p(0)\} \rightarrow \{q(t), p(t)\}$ esiste globalmente. Utilizzeremo la notazione $z \equiv \{q, p\}$.

Dallo studio del flusso tangente è facile dedurre che $a(z(t)) \in O(m)$ uniformemente sui compatti in t .

Dalle equazioni di Heisenberg, posto $U_H(t) = \exp\{-i\frac{t}{\hbar}\widehat{H}\}$, si ha

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} U_H(-s) Op_\hbar^w(a(\psi(z, t-s))) U_H(s) = \\ U_H(-s) \left(\frac{i}{\hbar} [H, Op_\hbar^w(a(z, (t-s)))] - Op_\hbar^w(\{H, a(z, t-s)\}) (\psi^{t-s}) \right) U_H(s) \end{aligned} \quad 11.83$$

Dalla regola di prodotto (11.79) si deduce allora che il simbolo principale del termine a destra, cioè

$$\frac{i}{\hbar} [H, Op_\hbar^w A_0(t-s)] - Op_\hbar^w(\{H_0, A_0(\psi^{t-s})\})$$

è nullo. Dunque il termine a destra in 11.83 è infinitesimo in \hbar e le conclusioni del teorema si ottengono attraverso lo sviluppo formale di (11.81) in potenze di \hbar data dalla formula di Duhamel.



Nota 11.13

Se H è un polinomio in x , $i \frac{d}{dx}$ di ordine ≤ 2 , si ha

$$(Op_{\hbar}^w(a))(t) = Op_{\hbar}^w(a(z(t))) \quad 11.84$$

dove $z(t)$ è soluzione dell'equazione di Hamilton. Infatti in questo caso si ha

$$\frac{i}{\hbar} [\widehat{H}, Op_{\hbar}^w(b)] = Op_{\hbar}^w\{h, b\}. \quad 11.85$$

In particolare se $W(z)$ è un elemento dell'algebra di Weyl

$$W(z) Op_{\hbar}^w(b) W(-z) = Op_{\hbar}^w(b_z) \quad b_z(z') = b(z' - z)$$

dove $\{\cdot, \cdot\}$ è la parentesi di Poisson.

Questo è un corollario del teorema di Ehrenfest.



In generale, se H non è un polinomio di ordine ≤ 2 la (11.84) non vale.

Tuttavia, sotto le ipotesi del teorema precedente, nel limite $\hbar \rightarrow 0$ una relazione del tipo (11.84) vale *in senso debole*, cioè come identità degli elementi di matrice tra stati semiclassici (ad esempio stati coerenti).

Abbiamo visto questo nella nostra analisi del limite semiclassico nel Capitolo 5

Nota 11.14

Il teorema 11.20 può essere esteso ad hamiltoniane che non siano in $O(2)$ (ad esempio ad hamiltoniane del tipo $H = \frac{p^2}{2} + V(q)$ con V limitato dal basso) purchè l'evoluzione classica sia definita per ogni tempo.



Nota 11.15

La quantizzazione di Weyl può essere estesa a distribuzioni in \mathcal{S}' ; l'operatore \widehat{A} è in questo caso un operatore limitato da \mathcal{S} a \mathcal{S}' e la corrispondenza è una biiezione.

Questo segue da un analogo del teorema di Schwartz che afferma che ogni applicazione bilineare da $\mathcal{S}(X)$ a $L^2(X)$ continua nella topologia di $L^2(X)$ può essere estesa ad un'applicazione continua da $\mathcal{S}(X)$ a $\mathcal{S}'(X)$.

Un procedimento per ottenere questa estensione utilizza il simbolo di Weyl $\pi_{u,v}$ dell'operatore di rango uno $\Pi_{u,v}$ definito, per $u, v \in \mathcal{S}(X)$ da

$$\Pi_{u,v}\psi = (\psi, u)v \quad 11.86$$

Si ha allora

$$(Op_{\hbar}^w(a)u, v) = (2\pi\hbar)^{-1} \int a(x, \xi)\pi_{u,v}(x, \xi)dx d\xi$$

Poiché per definizione

$$\langle Op_{\hbar}^w(a)u, v \rangle = \text{Tr}(\Pi_{u,v} Op_{\hbar}^w(a)) = \int \Pi_{u,v}(x, \xi) A(x, \xi) dx d\xi \quad 11.87$$

La funzione $\pi_{u,v}(x, \xi)$ è la funzione di Wigner della coppia u, v che è stata definita precedentemente.

Si noti che

$$(Op_{\hbar}^w(a)u, v) = (2\pi \hbar)^{-n} \int a(z) \pi_{u,v}(z) dz \quad 11.88$$

♣

11.2 QUANTIZZAZIONE DI BEREZIN-WICK

Una quantizzazione con la proprietà che ad una funzione positiva corrisponda un operatore positivo è la quantizzazione di Berezin-(anti-)Wick definita utilizzando gli stati coerenti.

Essa non preserva però le relazioni tra polinomi e le regole di prodotto sono più complicate di quelle che abbiamo dato per la quantizzazione di Weyl.

Ricordiamo che uno stato coerente centrato nel punto dello spazio delle fasi (y, η) è per definizione dato da

$$\phi_{y,\eta} \equiv e^{\frac{i}{\hbar}(\eta, x) + \frac{i}{\hbar}(y, D_x)} \phi_0(x)$$

dove $\phi_0(x)$ è lo stato fondamentale dell'oscillatore armonico per un sistema a n gradi di libertà.

$$\phi_0 \equiv (\pi \hbar)^{-n/4} e^{-\frac{|x|^2}{2\hbar}}$$

Utilizzeremo il simbolo $Op_{\hbar}^{BW}(a)$ per designare la quantizzazione di Berezin-Wick.

Definizione 11.8

La quantizzazione di Berezin-Wick dell'osservabile classica a è per definizione

$$Op_{\hbar}^{BW}(a)\psi \equiv (2\pi \hbar)^{-n} \int \int a(y, \eta) \overline{(\psi, \phi_{y,\eta})} \phi_{y,\eta} dy d\eta \quad 11.89$$

◇

Si può dimostrare, direttamente o utilizzando la rappresentazione di Weyl per determinare il simbolo di $Op_{\hbar}^{BW}(a)$, che la quantizzazione di Berezin-Wick ha le seguenti proprietà

1) Se $a \geq 0$ allora $Op_{\hbar}^{BW}(a) \geq 0$

2) L'operatore $Op_{\hbar}^{BW}(a)$ ha un simbolo di Weyl dato da

$$\widehat{a}_{Weyl}(\hbar, x, \xi) = (\pi \hbar)^{-n} \int \int a(y, \eta) e^{-\frac{1}{\hbar}[(x-y)^2 + (\xi-\eta)^2]} dy d\eta \quad 11.90$$

3) Per ogni $a \in O(0)$ si ha

$$\|Op_{\hbar}^{BW}(a) - Op_{\hbar}^w(a)\| = O(\hbar) \quad 11.91$$

La quantizzazione di Berezin-Wick appare come l'operazione duale di un'operazione che permette di associare ad ogni vettore dello spazio di Hilbert una misura positiva nello spazio delle fasi, detta *misura di Husimi* (nello stesso modo i cui la quantizzazione di Weyl è duale alla costruzione della funzione di Wigner).

Definizione 11.9 (misura di Husimi)

La misura di Husimi μ_{ψ} associata al vettore ψ è definita da

$$d\mu_{\psi} = \widetilde{\rho}(q, p) dq dp \quad \widetilde{\rho}(q, p) \equiv |(\phi_{q,p}, \psi)|^2 \quad 11.92$$

Da (11.92) si vede che la misura di Husimi è una misura di Radon positiva. La sua relazione con la quantizzazione di Berezin-Wick è data da

$$\int a d\mu_{\psi} = (Op_{\hbar}^{BW}(a)\psi, \psi), \quad a \in \mathcal{S} \quad 11.93$$

◇

Sebbene associ operatori positivi a funzioni positive sullo spazio della fasi, la quantizzazione di Wick è meno adatta di quella di Weyl per descrivere la dinamica delle osservabili quantistiche; in particolare non vale il teorema di Ehrenfest, e l'enunciato del teorema di propagazione semiclassico risulta più complesso.

Anche il prodotto di due operatori che corrispondono a due funzioni sullo spazio delle fasi appare avere una forma più complicata.

È facile vedere che la quantizzazione di Berezin-Wick (più precisamente anti-Wick) ha origine dalla rappresentazione di Bargman-Segal delle relazioni di commutazione canoniche (come quella di Weyl aveva origine dalla rappresentazione di Weyl-Schrödinger).

Ricordiamo che la rappresentazione di Bargman-Segal è ambientata nello spazio di funzioni C^d , olomorfe nel settore $\text{Im}z_k \geq 0$, $k = 1, \dots, d$ e a quadrato integrabile rispetto alla misura di probabilità gaussiana

$$d\mu_r(z) = \left(\frac{r}{\pi}\right)^d e^{-r|z|^2} dz, \quad r > 0.$$

Indichiamo questo spazio con la notazione \mathcal{H}_r . Il parametro r gioca il ruolo di \hbar^{-1} nello studio del limite semi-classico.

Nella rappresentazione di Berezin-Wick hanno un ruolo importante gli *operatori di Toeplitz*.

Se $g \in L^2(d\mu_r)$ l'operatore di Toeplitz $T_g^{(r)}$ è definito su un sottospazio denso di \mathcal{H}_r da

$$(T_g^{(r)}f)(z) = \int g(w)h(w)e^{r(z,w)}d\mu_r(w) \quad 11.94$$

(il nucleo $e^{r(z,w)}$ è il nucleo riprodotto che abbiamo introdotto nel Capitolo 7 nell'ambito della rappresentazione complessa di Bargman-Segal).

Notiamo che se $g, f \in L^2(d\mu_r)$ allora $T_g^{(r)}f \in \mathcal{H}_r$.

L'applicazione $g \rightarrow T_g^{(r)}$ è la quantizzazione di Berezin-Wick (il parametro $r = h^{-1}$ è il parametro di deformazione).

Sotto l'isometria (di Bargman-Segal) $B_r : L^2(\mathbb{R}^n, dx) \rightarrow \mathcal{H}_r$ la rappresentazione di Weyl-Schrödinger delle relazioni di commutazione canoniche è trasformata nella rappresentazione complessa di Bargman-Segal e gli operatori \hat{z}_k vengono trasformati negli operatori di Toeplitz.

Per gli operatori di Toeplitz valgono le stesse stime di deformazione del prodotto che si dimostrano nel caso della quantizzazione di Weyl (e che sono utili nello studio del limite semi-classico)

$$\|T_f^{(r)}T_g^{(r)} - T_{fg}^{(r)} + \frac{1}{r}T_{\sum_j(\frac{\partial f}{\partial z_j}\frac{\partial g}{\partial \bar{z}_j})}^{(r)}\|_r \leq C(f, g)r^{-2} \quad 11.95$$

Nota 11.16

Più in generale la quantizzazione di Berezin (detta anche *quantizzazione di Berezin-Toeplitz*) viene definita e utilizzata nell'ambito della quantizzazione geometrica.

Sia (\mathcal{M}, ω) una varietà simplettica chiusa.

In questo ambito la quantizzazione di Berezin-Toeplitz consiste in una successione di spazi di Hilbert *finito-dimensionali*

$$\mathcal{H}_m, \quad m \rightarrow \infty$$

di dimensione crescente, e in una successione di applicazioni surgettive

$$T_m : C^\infty(\mathcal{M}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_m)$$

con le proprietà seguenti per ogni $f, g \in C_0^\infty$

BT1

$$T_m(1) = I$$

BT2

$$T_m(f) \geq 0 \text{ se } f \geq 0$$

BT3

$$\|T_m(f)\| = \|f\| + O\left(\frac{1}{m}\right)$$

BT4

$$\left\| m[T_m(f), T_m(g)] - \frac{1}{i}T_m\{f, g\} \right\| = O\left(\frac{1}{m}\right)$$

BT5

$$\|T_m(fg) - T_m(f)T_m(g)\| = O\left(\frac{1}{m}\right)$$

Abbiamo denotato con $\|f\|$ la norma L^∞ di f , con $\|T_M(f)\|$ la norma operatoriale e con $\{f, g\}$ la parentesi di Poisson di f e g .

In quest'approcio $\frac{1}{m}$ ha il ruolo della costante di Planck's constant \hbar .



Si possono consultare [B,C], [C] per ulteriori dettagli sulla quantizzazione di Berezin e la sua connessione con gli operatori di Toeplitz

Notiamo che la quantizzazione di Berezin-Wick ha un ruolo rilevante nel caso di sistemi con un numero infinito di gradi di libertà; in questo caso le rappresentazioni delle relazioni di commutazione non sono tutte equivalenti, e la quantizzazione di Berezin-Wick assume una forma particolarmente conveniente nella *rappresentazione di Fock*.

11.3 QUANTIZZAZIONE DI KOHN-NIRENBERG [KN]

Per completezza, diamo qui la prescrizione di quantizzazione di Kohn-Nirenberg, spesso utilizzata in analisi nello studio delle equazioni ellittiche e della regolarità delle loro soluzioni.

Per definizione

$$(\sigma_{KN}(D, x)f)(x) \equiv \int \sigma(\xi, x)e^{i(x-y)} f(y) dy d\xi$$

$$= \int \int \widehat{\sigma}(p, q)(e^{i(q,x)} e^{i(p,D)} f)(x) dp dq \quad 11.96$$

Nel caso particolare $\sigma(\xi, x) = \sum a_k(x)\xi^k$ si ha

$$\sigma_{KN}(D, x) = \sum_k a_k(x) D^k \quad 11.97$$

In meccanica quantistica la prescrizione di quantizzazione di Kohn-Nirenberg è poco utilizzata.

Si ha in generale

$$\sigma_{KN}^*(D, x) \neq \overline{\sigma}_{KN}(D, x)$$

La relazione tra un operatore e il suo *simbolo* a nel caso della quantizzazione di Kohn-Nirenberg è

$$Op_{\hbar}^{KN}(a)\phi(x) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{d}{2}} \int_{R^d} e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot x} a(x, p) \widehat{\phi}(p) dp$$

dove $\widehat{\phi}$ è la trasformata di Fourier di ϕ .

Questa è la definizione di operatore pseudo-differenziale che si trova più comunemente nei testi che trattano equazioni alle derivate parziali (PDE).

La quantizzazione di Kohn-Nirenberg è comunemente utilizzata nell'analisi microlocale e anche nella analisi tempo-frequenza perchè porta a una formulazione meno complessa [G].

Il motivo è che in queste analisi si studiano le proprietà delle soluzioni di equazioni in cui intervengono operatori differenziali di ordine basso (due o al più quattro) e quindi non è interessante studiare operatori della forma $L(x, \nabla)$ che dipendono in modo non polinomiale da ∇ .

La quantizzazione di *Weyl* risulta molto utile invece quando si studia la riduzione di questi operatori a sottospazi (ad esempio sottospazi spettrali, quindi invarianti per l'evoluzione); in generale l'operatore di proiezione *non dipende in modo polinomiale* da ∇ e non è facile trovare il suo simbolo in rappresentazione di Kohn-Nirenberg.

11.4 QUANTIZZAZIONE DI SHUBIN

Notiamo che le prescrizioni di quantizzazione di Weyl, Wick e Kohn-Nirenberg sono casi particolari di una più generale prescrizione parametrizzata da un numero reale $\tau \in [0, 1]$ [Sh].

Chiameremo questa *quantizzazione di Shubin* dal nome dell'autore che più l'ha messa in evidenza.

In questa forma più generale di quantizzazione alla funzione $a \in \mathcal{S}(R^{2d})$ è associato un operatore continuo $a_t(x, D)$ su $\mathcal{S}(R^d)$ definito da

$$Op_{\hbar}^{S,\tau} a \phi(x) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^d \int \int a((\tau x + (1-\tau)y), \xi) f(y) e^{\frac{i}{\hbar}(x-y, \xi)} dy d\xi \quad 11.98$$

Il caso $\tau = \frac{1}{2}$ corrisponde alla quantizzazione di Weyl, il caso $\tau = 0$ corrisponde alla quantizzazione di Kohn-Nirenberg, il caso $\tau = 1$ corrisponde alla quantizzazione di Wick.

Solamente per il caso $\tau = \frac{1}{2}$ vale il teorema di Ehrenfest.

Inoltre è facile verificare che solamente per $\tau = \frac{1}{2}$ la relazione tra l'operatore e il suo simbolo è *covariante* per trasformazioni simplettiche lineari : se $s \in \text{Sp}(2d, R)$ è una trasformazioni (lineare) simplettica, esiste un operatore S unitario

$$S^{-1}(s) Op_{\hbar}^w(a) S(s) = Op_{\hbar}^w(a \circ s) \quad 11.99$$

dove $S(s)$ è l'operatore unitario nella rappresentazione del gruppo metaplettico (vedere Capitolo 8).

Per le altre quantizzazioni vale invece

$$\mathcal{F} Op_{\hbar}^{S,\tau} \mathcal{F}^{-1} = Op_{\hbar}^{S,1-\tau}(a \circ J^{-1}) \quad 11.100$$

dove J è la matrice simplettica standard e \mathcal{F} denota la trasformata di Fourier.

Terminiamo questo Capitolo dando alcuni cenni sulla quantizzazione di Born e Jordan [BJ].

Questa quantizzazione è stata introdotta da Born e Jordan per dare una prescrizione di quantizzazione per monomi nelle variabili q_k e p_j ; la corrispondenza proposta è

$$x_j^m p_j^n \rightarrow \frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^n \widehat{p}_j^{n-k} \widehat{x}_j^m \widehat{p}_j^k \quad 11.101$$

dove \widehat{x}_j (nella rappresentazione di Schrödinger) è l'operatore di moltiplicazione per x_j e $\widehat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$.

Per indici diversi tra loro gli operatori commutano e l'ordine relativo è irrilevante.

Per confronto la prescrizione che corrisponde alla quantizzazione di Weyl è

$$x_j^m p_j^n \rightarrow \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} \widehat{p}_j^{n-k} \widehat{x}_j^m \widehat{p}_j^k. \quad 11.102$$

Questa prescrizione (che coincide con quella di Born e Jordan se il monomio è di rango al più due) ha la proprietà di essere covariante per trasformazioni lineari simplettiche (mentre la quantizzazione di Born e Jordan non lo è).

La quantizzazione di Born e Jordan può essere estesa a una classe di funzioni più grande dei polinomi. Con questa definizione (che include (11.100)) la quantizzazione di Born e Jordan assume la forma

$$Op_{\hbar}^{BJ} \phi = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^d \int_0^1 Op_{\hbar}^{S,\tau} \phi d\tau \quad 11.103$$

su un opportuno dominio (in generale l'operatore è illimitato).

Dalla relazione tra $Op_{\hbar}^{S,\tau}(a)$ e $Op_{\hbar}^{S,1-\tau}(\bar{a})$ risulta

$$Op_{\hbar}^{BJ}(a)^* = Op_{\hbar}^{BJ}(\bar{a}) \quad 11.104$$

quindi in particolare l'operatore $Op_{\hbar}^{BJ}(a)$ è autoaggiunto (almeno formalmente) se e solo se a è una funzione reale.

Si possono considerare anche funzioni di Wigner associate alle quantizzazioni di Shubin.

In particolare

$$W_{\tau}(\phi, \psi)(x, p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^d \int_{R^d} e^{-\frac{i}{\hbar}py} \phi(x + \tau y) \psi(x - (1 - \tau)y) dy \quad 11.105$$

con, indipendentemente dal valore di $0 \leq \tau \leq 1$

$$\int_{R^d} W_{\tau}(x, p) dp = |\phi(x)|^2, \quad \int_{R^d} W_{\tau}(x, p) dx = |\hat{\phi}(p)|^2$$

Si può vedere facilmente che l'estensione (11.103) della quantizzazione di Born e Jordan soddisfa

$$Op_{\hbar}^w(H) = Op_{\hbar}^{BJ}(H), \quad H = \sum_{k=1}^d \frac{1}{2m_k} (p_k - A_k(x, t))^2 + V(x, t)$$

quindi la quantizzazione di Born e Jordan coincide con la quantizzazione di Weyl per le hamiltoniane comunemente utilizzate in Meccanica Quantistica.

La possibilità di avere una quantizzazione di Born e Jordan magnetica, in analogia con la quantizzazione che si ottiene mediante l'algebra di Weyl magnetica (vedi Capitolo 7), non è stata ancora esplorata).

APPENDICE 11A: ANALISI IN RAPPRESENTAZIONE DI HEISENBERG

Lo studio del limite semiclassico può essere fatto anche utilizzando la rappresentazione di Heisenberg. In questo caso si deve dimostrare che l'evoluzione dei valori di aspettazione (in opportuni stati) di funzioni degli operatori \hat{q}_k, \hat{p}_k converge per $\hbar \rightarrow 0$ all'evoluzione delle corrispondenti funzioni sullo spazio della fasi classico sotto l'azione della hamiltoniana classica corrispondente.

Naturalmente anche qui non ci possiamo aspettare che questa convergenza abbia luogo per tutti gli stati iniziali ma solamente per un'opportuna sottoclasse, ad esempio gli stati coerenti con dispersione congiunta di ordine \hbar o gli stati *W.K.B.*. Noi ci limitiamo al caso degli stati coerenti.

Uno studio del limite semiclassico secondo questa linea è stato fatto da Klaus Hepp [He]. Ne diamo qui un breve sunto rimandando per ulteriori dettagli all'articolo di Hepp.

Notiamo che le relazioni di commutazione

$$[\widehat{p}_k, \widehat{q}_i] = -i\hbar\delta_{k,i} \quad [\widehat{q}_k, \widehat{q}_i] = [\widehat{p}_k, \widehat{p}_i] = 0$$

indicano che le osservabili \widehat{q}_k , \widehat{p}_k e i loro prodotti devono essere valutati su scala $\frac{1}{\hbar}$.

Questo viene realizzato considerando il valore d'aspettazione di polinomi nelle \widehat{q}_i e \widehat{p}_k *tra stati classici*, in particolare tra stati coerenti localizzati attorno a punti dello spazio della fasi classico visto su scala classica, cioè su una scala che differisce dalla scala atomica per un fattore moltiplicativo $\frac{1}{\sqrt{\hbar}}$.

Per questo è conveniente introdurre operatori *normalizzati*

$$\widehat{P}_k \equiv \frac{\widehat{p}_k}{\sqrt{\hbar}}, \quad \widehat{Q}_k \equiv \frac{\widehat{q}_k}{\sqrt{\hbar}} \quad 11A.1$$

che soddisfano su opportuni domini le relazioni di commutazione $[\widehat{P}_k, \widehat{Q}_h] = -i\delta_{k,h}$.

Gli stati che consideriamo sono stati coerenti ϕ_α *centrati* in un punto $\alpha = \frac{\xi + i\pi}{\sqrt{2}}$ dello spazio delle fasi classico. Ricordiamo che uno stato coerente è dato da

$$\phi_\alpha \equiv U(\alpha)\Omega$$

dove $U(\alpha)$ agisce sull'operatore di annichilazione a_k nel modo seguente

$$U(\alpha)a_kU^*(\alpha) = a_k - \alpha_k, \quad \alpha_k = \frac{Q_k + iP_k}{\sqrt{2}}$$

Ω è il vuoto di Fock. In queste notazioni si ha

$$(\phi_{\hbar^{-\frac{1}{2}}\alpha}, (\widehat{Q}_1 - \hbar^{-\frac{1}{2}}\xi_1) \dots (\widehat{P}_n - \hbar^{-\frac{1}{2}}\pi_n)\phi_{\hbar^{-\frac{1}{2}}\alpha}) = (\Omega, \widehat{Q}_1 \dots \widehat{P}_n\Omega) \quad 11A.2$$

per qualunque polinomio nelle \widehat{P}_k e nelle \widehat{Q}_h .

Da (11A.2), moltiplicando per $\hbar^{s/2}$, dove s è il grado del polinomio, si ottiene

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} (\phi_{\hbar^{-\frac{1}{2}}\alpha}, (q_1^\hbar - \xi_1) \dots (p_n^\hbar - \pi_n)\phi_{\hbar^{-\frac{1}{2}}\alpha}) = 0$$

da cui per iterazione, scegliendo polinomi del tipo P^*P ,

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} (\phi_{\hbar^{-\frac{1}{2}}\alpha}, (q_1^\hbar \dots p_n^\hbar)\phi_{\hbar^{-\frac{1}{2}}\alpha}) = \xi_1 \dots \pi_n \quad 11A.3$$

Vogliamo dimostrare che se $\{\xi_m(s)\}, \{\pi_m(s)\}$ sono soluzioni delle equazioni di Hamilton con potenziale V e se

$$q(\alpha, t) \equiv \{q_m(\alpha, t)\} \quad p(\alpha, t) \equiv \{p_m(\alpha, t)\} \quad 11A.4$$

sono soluzioni delle equazioni dell'equazione per il flusso tangente

$$\begin{aligned} \dot{q}(\alpha, t) &= p(\alpha, t), & \dot{p}(\alpha, t) &= -\nabla V(\xi(\alpha, t)) \cdot q(\alpha, t) \\ \dot{\xi}(t) &= \pi(t), & \dot{\pi}(t) &= -\nabla V(\xi(t)) \end{aligned} \quad 11A.5$$

allora le (11A.2) e (11A.3) sono soddisfatte per tutti i tempi se lo sono al tempo iniziale. Infatti per ogni T e per $|s| \leq T$ si ha

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \left(\phi_{\hbar^{-\frac{1}{2}}\alpha}, (q_1^{\hbar} - \xi_1(\alpha, s)) \dots (p_n^{\hbar} - \pi_n(\alpha, s)) \phi_{\hbar^{-\frac{1}{2}}\alpha} \right) = q_1(\alpha, s) \dots p_n(\alpha, s) \quad 11A.6$$

Enunciamo e dimostriamo il teorema nel caso di un solo grado di libertà. La dimostrazione si generalizza facilmente al caso di un numero finito di gradi di libertà.

Teorema 11A.1 (Hepp)

Sia $V(x)$ reale, sia $\xi(\alpha, t), \pi(\alpha, t)$ una soluzione delle equazioni di Hamilton con dato iniziale $\alpha \equiv (\xi, \pi)$ e definita in $t \in (-T, +T)$.

Sia $V(x)$ di classe $C^{2+\delta}$, con $\delta > 0$, in un intorno di $\xi(\alpha, t)$, e sia

$$\int |V(x)|^2 e^{-\rho x^2} < \infty$$

per qualche $\rho > 0$.

Sia H_{\hbar} un'estensione autoaggiunta dell'operatore reale simmetrico

$$-\frac{\hbar}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(\sqrt{\hbar}x)$$

definito su $C_0^\infty(R)$ e poniamo

$$U_{\hbar}(t) \equiv e^{-i \frac{H_{\hbar} t}{\hbar}} \quad 11A.7$$

Siano $\{p(t), q(t)\}$ la soluzione del flusso linearizzato attorno a $\xi(\alpha, t)$ con dati iniziali p, q . Questo flusso corrisponde alla hamiltoniana

$$H(t) \equiv \frac{p^2}{2} + C(t) \frac{q^2}{2} \quad C(t) \equiv \frac{d^2 V}{dq^2}(\xi(\alpha, t)) \quad 11A.8$$

Allora per ogni $r, s \in R^2$ e uniformemente in $t \in (-T, +T)$ si ha che

$$s\text{-}\lim_{\hbar \rightarrow 0} U^* \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right) U_{\hbar}^*(t) e^{i \left[r \left(q - \frac{\xi(\alpha, t)}{\sqrt{\hbar}} \right) + s \left(p - \frac{\pi(\alpha, t)}{\sqrt{\hbar}} \right) \right]} U_{\hbar}(t) U \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right) = e^{i[r q(\alpha, t) + s p(\alpha, t)]} \quad 11A.9$$

e inoltre

$$s - \lim_{\hbar \rightarrow 0} U^* \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right) U_{\hbar}^*(t) e^{i(rQ_{\hbar} + sP_{\hbar})} U_{\hbar}(t) U \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right) = e^{i[r\xi(\alpha, t) + s\pi(\alpha, t)]} \quad 11A.10$$

◇

Nota 11A.1

Lo stesso risultato si sarebbe ottenuto utilizzando stati coerenti modificati (strizzati), per i quali la dispersione nello spazio delle configurazioni è di ordine \hbar^α e nello spazio dei momenti è di ordine $\hbar^{1-\alpha}$ dove $0 < \alpha < 1$.

♣

Dimostrazione del teorema 11A.1

Diamo una traccia della dimostrazione; dettagli possono essere trovati sull'articolo di Hepp che abbiamo citato.

Notiamo che l'equazione di Schrödinger si scrive $i\frac{\partial\phi}{\partial t} = \hbar^{-1}H_{\hbar}\phi$. Espandiamo $\hbar^{-1}H_{\hbar}$ in potenze di \hbar intorno all'orbita classica $\xi(\alpha, t) \equiv \xi(t)$.

$$\begin{aligned} \hbar^{-1}H_{\hbar} &= H_{\hbar}^0(t) + H_{\hbar}^1(t) + H_{\hbar}^2(t) + H_{\hbar}^3(t) \\ H_{\hbar}^0(t) &= \hbar^{-1}H(\pi, \xi) \\ H_{\hbar}^1(t) &= \hbar^{-1/2} \left[\pi_t \left(\hat{p} - \frac{\pi_t}{\sqrt{\hbar}} \right) + \frac{dV}{dx}(\xi(t)) \left(\hat{q} - \frac{\xi(t)}{\sqrt{\hbar}} \right) \right] \\ H_{\hbar}^2(t) &= \frac{1}{2} \left(\hat{p} - \frac{\pi_t}{\sqrt{\hbar}} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dx^2}(\xi(t)) \left(\hat{q} - \frac{\xi(t)}{\sqrt{\hbar}} \right)^2 \end{aligned} \quad 11A.11$$

Si ha

$$H_{\hbar}^3(t) = V(x) - V(\xi(t)) - (x - \xi(t)) \cdot \frac{dV}{dx}(\xi(t)) - \frac{1}{2}(x - \xi(t))^2 \frac{d^2V}{dx^2}(\xi(t)) \quad 11A.12$$

e quindi $H_{\hbar}^3(t)$ è, almeno formalmente, un operatore di ordine di grandezza $O(\hbar^{\frac{1}{2}})$.

Notiamo che H_{\hbar}^1 è lineare nelle \hat{p} e \hat{q} , e pertanto il propagatore $U_{\hbar}^s(t)$ esiste per ogni t ed è unitario (utilizzare sulla chiusura convessa dei polinomi di Hermite la serie di Dyson, che converge fortemente; oppure applicare i risultati riguardanti il gruppo metaplettico descritti nel Capitolo 8).

Gli operatori unitari $U_{\hbar}^1(t) \equiv e^{iH_{\hbar}^1 t}$ definiscono una famiglia di automorfismi dell'algebra di Weyl. Pertanto il termine di cui si prende il limite in (11A.10) può essere scritto

$$W^{\hbar}(t, 0)^* e^{i(r\hat{q} + s\hat{p})} W^{\hbar}(t, 0) \quad 11A.13$$

con

$$W^{\hbar}(t, s) \equiv U^* \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right) U_{\hbar}^1(t)^* U_{\hbar}(t-s) U_{\hbar}^1(s) U \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right) e^{i \int_s^t dr H_{\hbar}^0(r)}$$

La prima parte del teorema risulta pertanto dimostrata se si dimostra che

$$s - \lim_{\hbar \rightarrow 0} W^{\hbar}(t, s) \equiv W(t, s) = e^{-i \int_s^t H^0(r) dr} \quad 11A.14$$

È sufficiente dare la dimostrazione su un insieme denso di stati, che sceglieremo essere l'insieme degli stati coerenti

$$\phi_a(x) \equiv \pi^{-1/4} e^{-(x-a)^2/2}, \quad a \in R.$$

Dobbiamo innanzitutto dimostrare che per ogni τ , $|\tau| < T$, esiste un $\hbar(\tau) > 0$ tale che, per ogni $\hbar < \hbar(\tau)$ gli stati

$$\phi_a^{\hbar, s} \equiv U_{\hbar}^1(s) U \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right) W(s, 0) \phi_a \quad 11A.15$$

appartengono al dominio dell'operatore H^1 .

Utilizziamo il fatto che H^1 è quadratica, la forma esplicita di $W^{\hbar}(t, s)$ e la relazione

$$W(s, 0) \hat{q} W(s, 0)^* = \alpha \hat{q} + \beta \hat{p} \quad W(s, 0) \hat{p} W(s, 0)^* = \gamma \hat{q} + \delta \hat{p}$$

con $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ che formano una matrice simplettica e dipendono in modo continuo dal tempo. Otteniamo così

$$\phi_a^{\hbar, s}(x) = C \exp \left[-\frac{\alpha + i\gamma}{2(\delta - i\beta)} \left(x - \frac{\xi_s}{\sqrt{\hbar}} - \frac{a}{\alpha + i\gamma} \right) + i \frac{\pi_s}{\sqrt{\hbar}} x \right] \quad 11A.16$$

dove

$$\operatorname{Re} \frac{\alpha + i\gamma}{2(\delta - i\beta)} = \frac{1}{2}(\delta^2 + \beta^2) > \eta(\tau) > 0$$

per ogni $|s| < T$. Poiché

$$\int dx |V(x)|^2 e^{-\rho x^2} < \infty$$

per un opportuno $\rho > 0$ l'inclusione voluta nel dominio si ha se

$$\hbar(\tau) = 2\eta(\tau)\rho^{-1} \quad 11A.17$$

Ne concludiamo che il prodotto $W^{\hbar}(t, s)W(r, s)$ è differenziabile in senso forte rispetto ad s , per $\hbar < \hbar(\tau)$.

Dalla formula di Duhamel si ha

$$W(t, 0)\phi_a - W^{\hbar}(t, 0)\phi_a = \int_0^t ds \frac{d}{ds} W^{\hbar}(t, s)W(s, 0)\phi_a =$$

$$\int_0^t i W^{\hbar}(t, s) \left[\hbar^{-1} \left(V(\xi_s + \sqrt{\hbar} q) - V(\xi_s) \right) - \hbar^{-\frac{1}{2}} V'(\xi_s) q - V''(\xi_s) \frac{q^2}{2} \right] W(s, 0) \phi_a \quad 11A.18$$

Diamo una stima della norma L^2 del termine a destra.

Utilizziamo il fatto che V è di classe $C^{2+\delta}$ per stimare l'integrale per valori della variabile x di ordine di grandezza 1 (e quindi $\sqrt{\hbar}x \simeq \sqrt{\hbar}$); per grandi valori di x utilizziamo invece la decrescenza rapida di $|W(s, 0)\phi_a|^2$.

Per $\sqrt{\hbar}x \simeq \sqrt{\hbar}$ utilizziamo anche la stima

$$\left| \hbar^{-1} \left[V(\xi_s + \sqrt{\hbar} x) - V(\xi_s) \right] - \hbar^{-1/2} x V'(\xi_s) - \frac{1}{2} x^2 V''(\xi_s) \right| \leq C x^{2+\delta} \hbar^{\delta/2} \quad 11A.19$$

e deduciamo

$$\|W(t, 0)\phi_a - W^{\hbar}(t, 0)\phi_a\| = O(\hbar^{\delta/2}) \quad 11A.20$$

Con un procedimento analogo si dimostra (11A.9). Si utilizza l'identità

$$\begin{aligned} & \left\| U \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right)^* U_{\hbar}^*(t) e^{i(r q_n + s p_n)} U_{\hbar}(t) U \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\hbar}} \right) \phi - e^{i(r \xi_t + s \pi_t)} \phi \right\| \\ &= \|W^{\hbar}(t, 0) e^{i\sqrt{\hbar}(r q + s p)} W^{\hbar}(t, 0) \phi - \phi\| \end{aligned} \quad 11A.21$$

e il fatto che

$$s - \lim W^{\hbar}(t, 0) = W(t, 0), \quad s - \lim e^{i\sqrt{\hbar}(r q + s p)} = 1$$

Questo conclude la traccia della dimostrazione del Teorema 11A.1.

♡

Nota 11A.2

Procedendo in modo analogo si dimostra che si ottiene un limite semiclassico anche considerando una particella quantistica di massa M nel limite $M \rightarrow \infty$. Per questo si considera la hamiltoniana

$$H(\xi, x) = \frac{1}{2M} \xi^2 + V(x)$$

e si pone

$$\xi_{\lambda} = M\sqrt{\lambda}\xi, \quad x_{\lambda} = \sqrt{\lambda}x \quad 11A.22$$

Si denota poi con $\hbar^{-1}H_{\lambda}$ un' estensione autoaggiunta di H e con U_{λ} l'operatore

$$\exp\{-iH_{\lambda}t\}$$

Vale allora lo stesso risultato del teorema 11.2 nel limite $\lambda \rightarrow 0$.

♣

Notiamo anche che nel limite semiclassico per quanto riguarda i valori d'aspettazione scompare la differenza tra sovrapposizione e miscele statistiche per stati del tipo

$$U\left(\frac{\alpha_n}{\sqrt{\hbar}}\right)\phi_n, \quad \alpha_n \neq \alpha_m$$

Infatti si ha, per $|t| \leq T$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \left(\phi_{\hbar}, U_{\hbar}^*(t) e^{i(r \hat{q} + s \hat{p})} U_{\hbar}(t) \phi_{\hbar} \right) = \sum_n |\phi_n|^2 e^{i(r \xi(\alpha_n, t) + s \eta(\alpha_n, t))} \quad 11A.23$$

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [BC] C.A.Berger, A.Coburn *Transactions of the American Math. Soc.* 301 (1987) 813-829
- [BJ] Born M., Jordan H, *Zur Quantenmechanik Zeits.fur Physik* 34 (1925) 858-888
- [C] L.A.Coburn, *Comm. Math. Phus.* 149 (1992) 415-424
- [G] K.Grochenig, *Foundations of Time-Frequency Analysis*, Birkhauser Boston 2000
- [GMS] G.Gerard, A.Martinez e J.Sjostrand, *Comm. Math. Physics* 142, (1991) 217-244.
- [GS] A.Grigis, J.Sjostrand, *Microlocal Analysis for Differential Operators*, London Math. Soc. Lecture Notes 196 Cambdrige Univ. Press 1994
- [H] L.Hormander, *Comm. Pure Appl. Math.*, 32 (1979) 359-443
- [He] K.Hepp *Comm. Math. Phys.* 35 (1974) 265-277
- [KN] J.J.Kohn, L.Nirenberg, *Comm. Pure Appl.Math.* 18 (1965) 269-305
- [LP] Lions P.L., Paul T., *Sur le mesures de Wigner*, Rev.Mat. Iberoamericana 9 (1993) 553-618
- [M] A.Martinez, *An Introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis*, Universitext Springer-Verlag New York 2002
- [MM] P.Markovic, N.Mauser, *Math. Models and Methods in Applied Sciences* 3, (1993) 109-124
- [R] D.Robert, *Autour de l'approximation semiclassique*, Birkhauser 1987
- [Sh] .A.Shubin, *Pseudo-differential Operators and Spectral Theory*, Springer Veralg 1987

CAPITOLO 12
OPERATORI COMPATTI E DI CLASSE SHATTEN.
CRITERI DI COMPATTEZZA. UNA COLLEZIONE DI
DISEGUAGLIANZE.

La compattezza è una proprietà che gioca un ruolo molto importante nella Meccanica Quantistica di Schrödinger. Ad esempio nella teoria dello scattering ha un ruolo importante la compattezza della risolvente della hamiltoniana H .

In questo capitolo daremo una collezione di definizioni e di risultati che sono importanti per quanto riguarda la compattezza.

In appendice diamo una collezione di relazioni di disuguaglianza che si utilizzano frequentemente.

Definizione 12.1 (operatore compatto),

Un operatore chiudibile A su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} è detto essere *compatto* (o *completamente continuo*) se l'insieme $\{A\phi, \phi \in D(A), \|\phi\|_2 = 1\}$ è precompatto in \mathcal{H} (cioè la sua chiusura è compatta).

◇

Nota 12.1

Ricordiamo che un insieme Y chiuso in uno spazio topologico X è compatto se da ogni successione limitata in Y può essere estratta una sottosuccessione convergente.

Tenendo presente che la palla unitaria in \mathcal{H} è compatta nella topologia debole e quindi da ogni successione limitata in \mathcal{H} può essere estratta una sottosuccessione che converge debolmente, concludiamo che A è compatto se e solo se, per ogni successione $\{\phi_n\}$ che converge debolmente in \mathcal{H} , la successione $\{A\phi_n\}$ converge fortemente.

Ogni operatore chiuso su \mathcal{H} che sia compatto è automaticamente limitato.

Dalla definizione segue che l'insieme degli operatori compatti è chiuso per la topologia uniforme e che esso è un ideale bilatero in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Inoltre se A è compatto, anche A^* è compatto.

♣

Definizione 12.2

Un operatore A è *di rango finito* se il suo codominio è finito-dimensionale: esistono $N < \infty$ vettori ϕ_n e N funzioni lineari γ_n su \mathcal{H} tali che per ogni $\psi \in \mathcal{H}$

si ha

$$A\psi = \sum_{n=1}^N \gamma_n(\psi)\phi_n.$$

◇

Poiché un insieme chiuso in R^N è compatto, ogni operatore di rango finito è compatto.

Teorema 12.1

Ogni operatore compatto è limite in norma di operatori di rango finito.

◇

Dimostrazione

Sia \mathcal{H} uno spazio di Hilbert di dimensione infinita e separabile; la dimostrazione nel caso non separabile è leggermente più involuta e utilizza il lemma di Zorn e il fatto che la topologia della norma è separabile.

Sia $\{\phi_n\}$ una base ortonormale in \mathcal{H} . Denotiamo con \mathcal{H}_N il sottospazio sotteso da $\{\phi_k, k = 1, \dots, N\}$. Definiamo

$$\lambda_N \equiv \sup_{\{\phi \in \mathcal{H}_N^{\perp}, \|\phi\|_2=1\}} \|A\phi\|_2. \quad 12.1$$

Per costruzione λ_N è monotona decrescente. Sia λ il suo limite.

Dimostriamo che $\lambda = 0$. Questo fornisce la dimostrazione del teorema perché per costruzione $\lambda_N = \|A - A_N\|$, dove A_N è la restrizione di A ad \mathcal{H}_N .

Procediamo per assurdo. Supponiamo che $\lambda > 0$ e deduciamo una contraddizione.

Se $\lambda > 0$, segue che $\|A\phi\|_2 \geq \lambda\|\phi\|_2$. Ma allora l'insieme immagine non è compatto perché contiene una palla di raggio finito in \mathcal{H} .

♡

Un risultato particolarmente importante è il seguente

Teorema 12.2

Sia A autoaggiunto. Esso è compatto se e solo se il suo spettro è puramente puntuale, gli autovalori diversi da zero sono di molteplicità finita e, se sono infiniti in numero, hanno zero come unico punto d'accumulazione.

◇

Dimostrazione

Se $\sigma_{cont} \neq \emptyset$, esso contiene un intervallo $I \equiv (\lambda_0 - \epsilon, \lambda_0 + \epsilon)$.

Senza perdita di generalità possiamo considerare il caso $\lambda_0 = 0$.

Denotiamo con π il proiettore ortogonale sul sottospazio associato allo spettro continuo nell'intervallo spettrale I ; poiché lo spettro è continuo, per il lemma di Weyl questo sottospazio ha dimensione infinita.

Per costruzione, se $\phi \in \pi\mathcal{H}$, si ha $\|A\phi\|_2 \geq \epsilon\|\phi\|_2$.

Quindi l'immagine della palla unitaria in \mathcal{H} sotto A contiene una palla in un sottospazio di dimensione infinita e non può essere un insieme compatto. Nello stesso modo si dimostra che gli autovalori diversi da zero hanno molteplicità finita.

♡

Sia \mathcal{H} uno spazio di Hilbert separabile, $\{\phi_n\}$ una sua base ortonormale completa. Sia A un operatore positivo. Poniamo per definizione

$$\mathrm{Tr} A \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N (\phi_n, A\phi_n). \quad 12.2$$

Notare che questa successione è non decrescente (perché A è positivo) e quindi ha certamente un limite, che può essere $+\infty$.

Si verifica facilmente che la funzione $\mathrm{Tr}(\cdot)$ (per il momento solamente definita sul cono degli operatori positivi) non dipende dalla base scelta per la sua definizione. Si può vedere questo notando che se $U(t)$ è un gruppo ad un parametro di operatori unitari si ha

$$\left. \frac{d}{dt} [\mathrm{Tr} U(t) A U(t)] \right|_{t=0} = 0.$$

Scegliendo come base gli autovettori di A si ottiene $\mathrm{Tr}(A) = \sum_k a_k$, dove a_k sono gli autovalori di A (contati con la loro molteplicità).

Definizione 12.2

Un operatore A è detto essere di classe traccia se $\mathrm{Tr} \sqrt{A^* A} < \infty$.

◇

Ogni operatore autoaggiunto limitato A può essere scritto come $A = A_+ - A_-$, con A_{\pm} operatori positivi e $A_+ A_- = A_- A_+ = 0$.

Ne segue che A è di classe traccia se e solo se gli operatori positivi A_{\pm} lo sono. In questo caso $\mathrm{Tr} A = \mathrm{Tr} A_+ - \mathrm{Tr} A_-$.

La funzione Tr può essere estesa ad un classe di operatori limitati non necessariamente autoaggiunti.

Ricordando che ogni operatore chiuso e limitato A può essere scritto come somma sul campo complesso di due operatori autoaggiunti

$$A = \frac{A + A^*}{2} + \frac{A - A^*}{2} \equiv \Re A + i \Im A.$$

La funzione Tr resta così definita per ogni operatore chiuso e limitato le cui parti reale e immaginaria siano entrambe di classe traccia secondo la definizione precedente.

La traccia così definita ha le seguenti proprietà:

i) $\mathrm{Tr}(A + B) = \mathrm{Tr} A + \mathrm{Tr} B$;

- ii) $\text{Tr}(\lambda A) = \lambda \text{Tr} A$;
 iii) $0 < A \leq B \Rightarrow \text{Tr} A \leq \text{Tr} B$.

Prima di enunciare e dimostrare il prossimo teorema, notiamo che il funzionale traccia induce una norma. Per dimostrare quest'ultima affermazione verifichiamo che

$$\text{Tr}|A+B| \leq \text{Tr}|A| + \text{Tr}|B|$$

Notiamo che $A+B = U_{A+B}|A+B|$, $A = U_A|A|$, $B = U_B|B|$.

Allora

$$\sum_n (\phi_n, |A+B|\phi_n) = \sum_n [(\phi_n, U_{A+B}^* U_A |A|\phi_n) + (\phi_n, U_{A+B}^* U_B |B|\phi_n)], \quad 12.4$$

$$(\phi_n, U^* V |A|\phi_n) = (|A|^{1/2} V^* U \phi_n, |A|^{1/2} \phi_n),$$

e dunque

$$\left| \sum_n (\phi_n, U^* V |A|\phi_n) \right| \leq \left(\sum_n \| |A|^{1/2} V^* U \phi_n \|_2^2 \right)^{1/2} \left(\sum_n \| |A|^{1/2} \phi_n \|_2^2 \right)^{1/2}. \quad 12.5$$

Le isometrie parziali portano basi ortonormali complete in basi ortonormali non necessariamente complete. Dunque il termine a destra in (12.5) è minore o al più uguale a $\sum_n (\phi_n, |A|\phi_n)$. Questa disuguaglianza, unitamente alla corrispondente disuguaglianza per B , conclude la dimostrazione.

Teorema 12.3

L'insieme J_1 degli operatori di classe traccia è uno *-ideale bilatero in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ ed è uno spazio di Banach con norma $\text{Tr}|A|$.

◇

Dimostrazione

Dobbiamo dimostrare

- a) J_1 è uno spazio vettoriale;
 b) $A \in J_1, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \implies AB \in J_1, BA \in J_1$;
 c) $A \in J_1 \implies A^* \in J_1$;
 d) Lo spazio J_1 è chiuso per la topologia data dalla norma $\|A\|_1 \equiv \text{Tr}|A|$ (che noi indicheremo con il termine *topologia della traccia*).

Le prime tre affermazioni seguono direttamente dalla definizione; notare che per ogni operatore limitato l'immagine di un compatto è un compatto e che per tutti gli operatori limitati vale $(AB)^* = B^*A^*$.

Dimostriamo il punto d).

Se $A \in J_1$, consideriamo $A_N = A - \sum_1^N (\phi_n, \cdot) A \phi_n$ dove $\{\phi_k\}$ è una base ortonormale completa di autovettori di $|A|$ e abbiamo ordinato gli autovalori in modo che sia $a_k \leq a_h$ se $h > k$.

Sia \mathcal{H}_N il sottospazio sotteso dai primi N autovettori; si ha allora $A_N \phi = 0$, $\phi \in \mathcal{H}_N$.

Se A è positivo, $A_N \geq 0$ e $\|A_N\|_1 = \sum_{k>N} a_k \rightarrow 0$ per $N \rightarrow \infty$, poiché la serie è convergente.

Se A non è positivo, consideriamo la decomposizione polare $A = U_A |A|$ e sia $A_N = U_A |A|_N$.

Ricordiamo che ogni operatore limitato A può essere scritto nella forma

$$A \equiv U_A |A| = |A| U_A, \quad |A| \equiv \sqrt{A^* A},$$

dove U_A è un'isometria parziale dalla chiusura del codominio di $|A|$ alla chiusura del codominio di A ed è tale che $\text{Ker}|A| \subset \text{Ker} U_A$.

Allora $\|A_N\|_1 \rightarrow 0$ e quindi $\|A\|_1 \rightarrow 0$.

♡

Teorema 12.4

Gli operatori di rango finito sono densi in J_1 .

◇

Dimostrazione

L'asserto del Teorema segue immediatamente dal fatto che ogni operatore di classe traccia può essere scritto come somma nel campo complesso di operatori positivi di classe traccia e dal fatto che per operatori positivi di classe traccia gli autovalori non nulli si accumulano a zero.

♡

Dai risultati descritti qui sopra segue che la funzione $\text{Tr}(\cdot)$ definita su J_1 è una funzione lineare che preserva l'ordine degli operatori e ha le seguenti proprietà:

- i) $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$, $A, B \in J_1$;
- ii) $\text{Tr}(UAU^*) = \text{Tr}A$, se U è unitario.

Nota 12.2

Se $A \in J_1$, $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, anche AB e BA sono in J_1 e vale l'identità $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$. Quindi la funzione $\text{Tr}(\cdot)$ è definita per un prodotto di operatori limitati quando almeno uno dei fattori è un operatore di classe traccia.

Notiamo ancora esplicitamente che *solamente per operatori positivi in J_1* si ha

$$\text{Tr}A = \sum_n (\phi_n, A\phi_n),$$

dove $\{\phi_n\}$ è una base ortonormale completa.

♣

Nota 12.3

Abbiamo visto nel capitolo 2 che gli operatori di classe traccia giocano un ruolo importante in Meccanica Quantistica, perché gli operatori positivi di classe traccia e con traccia uno (in notazione $J_{1,+1}$) rappresentano stati del sistema. Abbiamo anche notato in quel contesto che $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ è il duale di J_1 e che gli stati rappresentati da $J_{1,+1}$ sono gli stati normali.



Un'altra categoria importante di operatori compatti è costituita dagli *operatori di Hilbert-Schmidt*.

Definizione 12.3

L'operatore A è detto essere *di classe Hilbert-Schmidt* se A^*A è di classe traccia.



Denoteremo con il simbolo J_2 l'insieme degli operatori di Hilbert-Schmidt.

È facile verificare che J_2 è uno *-ideale bilatero di $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Siano A, B elementi di J_2 e sia $\{\phi_n\}$ una base ortonormale in \mathcal{H} . Allora A^*B è di classe traccia. Infatti si ha

$$\mathrm{Tr}(B^*AA^*B)^{\frac{1}{2}} = \mathrm{Tr}[(AA^*)(BB^*)]^{\frac{1}{2}} \leq \|A\| \mathrm{Tr}|B|.$$

Definiamo

$$\langle A, B \rangle_2 \equiv \mathrm{Tr}(A^*B) \equiv \sum_n (A\phi_n, B\phi_n), \quad \|A\|_2 = [\mathrm{Tr}(A^*A)]^{\frac{1}{2}}$$

(è facile vedere che quest'ultima definizione non dipende dalla base scelta).

La forma quadratica $\langle \cdot, \cdot \rangle_2$ definisce in J_2 un prodotto scalare non degenere e quindi una struttura prehilbertiana.

Non è difficile verificare che J_2 dotato di questo prodotto scalare è uno spazio di Hilbert completo. Inoltre

$$|\langle A, B \rangle| \leq [\mathrm{Tr}(A^*A)]^{1/2} [\mathrm{Tr}(B^*B)]^{1/2} = \|A\|_2 \|B\|_2.$$

Si ha $\|A\|_1 \geq \|A\|_2 \geq \|A\|$ e quindi

$$\{A : \|A\|_1 \leq 1\} \subset \{A : \|A\|_2 \leq 1\} \subset \{A : \|A\| \leq 1\}.$$

Dunque la topologia di J_2 è intermedia tra quella di J_1 e la topologia uniforme di $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Procedendo come abbiamo fatto nel caso di J_1 si può dimostrare che la parte hermitiana di J_2 , che indichiamo con J_2^{her} , soddisfa

$$J_2^{her} \equiv \left\{ A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}), A^* = A, \sum_k a_k^2 < \infty \right\},$$

dove $\{a_n\}$ sono gli autovalori di A .

Conviene tenere presente il seguente *schema di inclusione e densità*: indichiamo con \mathcal{F} gli operatori di rango finito e con \mathcal{K} gli operatori compatti. Si verifica facilmente che:

- 1) \mathcal{F} è denso in J_1 nella topologia della norma $\|\cdot\|_1$;
- 2) J_1 è denso in J_2 nella topologia della norma $\|\cdot\|_2$;
- 3) J_2 è denso in \mathcal{K} nella topologia della norma uniforme (operatoriale);
- 4) \mathcal{K} è denso in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ nella topologia forte degli operatori.

Inoltre $\mathcal{F} \subset J_1 \subset J_2 \subset \mathcal{K} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Tutte le inclusioni sono strette se lo spazio di Hilbert ha dimensione infinita.

Le classe di operatori compatti e di Hilbert-Schmidt sono parte di una collezione di classi di operatori che sono frequentemente utilizzate nella teoria degli operatori di Schrödinger, le *classi di Schatten*.

Definizione 12.4

Sia $1 \leq p \leq +\infty$. Un operatore A è di classe Schatten p se $\text{Tr} \sqrt{(A^*A)^p} < \infty$. Indichiamo la classe p di Schatten con il simbolo $\mathcal{L}^p(\mathcal{H})$. È uno spazio di Banach con norma

$$\|A\|_p \equiv \left[\text{Tr} \sqrt{(A^*A)^p} \right]^{\frac{1}{p}}.$$

In particolare \mathcal{L}^1 è la classe degli operatori di classe traccia e \mathcal{L}^2 è la classe di operatori di Hilbert-Schmidt.

◇

Indichiamo con λ_n gli autovalori dell'operatore A . Allora $A \in \mathcal{L}^p$ se e solo se $\sum_n |\lambda_n|^p < \infty$.

Gli spazi \mathcal{L}^p sono un analogo non commutativo degli spazi $L^p(X, \mu)$ dove $\{X, \mu\}$ è uno spazio di misura e μ è una misura *finita*.

In analogia con il caso classico, si ha

- 1) $\mathcal{L}^p(\mathcal{H})$ è uno *-ideale di $\mathcal{B}(\mathcal{H})$;
- 2) $\mathcal{L}^p(\mathcal{H})$ è completo nella norma $\|A\|_p$;
- 3) $p < q \implies \mathcal{L}^p(\mathcal{H}) \subset \mathcal{L}^q(\mathcal{H})$ e $\|A\| \leq \|A\|_p \leq \|A\|_q$;
- 4) vale la disuguaglianza di Hölder per $1 \leq p, q, r \leq +\infty$, $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = \frac{1}{r}$

$$A \in \mathcal{L}^p(\mathcal{H}), \quad B \in \mathcal{L}^q(\mathcal{H}) \implies AB \in \mathcal{L}^r(\mathcal{H}), \quad \|AB\|_r \leq \|A\|_p \|B\|_q;$$

5) Se $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, $p \geq 1$, allora per $A \in \mathcal{L}^p(\mathcal{H})$ e $B \in \mathcal{L}^q(\mathcal{H})$ si ha $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$ (usiamo la notazione $\mathcal{L}^\infty(\mathcal{H}) = \mathcal{B}(\mathcal{H})$ e $\|A\|_\infty = \|A\|$).

Queste proprietà sono anche possedute dagli spazi \mathcal{L}^p definiti su un'algebra di von Neumann \mathcal{M} con uno stato traccia ω come collezione di tutti gli elementi tali che

$$\|a\|_p \equiv (\omega(a^*a))^{\frac{p}{2}} < \infty.$$

La corrispondente teoria dell'integrazione non commutativa è stata sviluppata tra gli altri da D. Gross, E. Nelson, I. Segal.

Daremo dei cenni di questa teoria Capitolo 16 nel quale tratteremo anche brevemente una generalizzazione al caso di stati che non sono stati traccia (teoria di Tomita-Takesaki e condizione K.M.S.).

Studiamo ora la struttura degli spazi $\mathcal{L}^p(\mathcal{H})$ nella rappresentazione di \mathcal{H} come $L^2(X, d\mu)$ dove X è uno spazio localmente compatto e μ è una misura regolare. In questa rappresentazione gli operatori di Shatten e in particolare gli operatori di Hilbert-Schmidt hanno una rappresentazione come nuclei integrali.

Teorema 12.5

Sia $\mathcal{H} \equiv L^2(X, d\mu)$, $X \subset \mathbb{R}^d$. Allora $A \in \mathcal{J}_2$ se e solo se esiste una funzione misurabile

$$a(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in L^2(X \otimes X, d\mu \otimes d\mu),$$

tale che, per ogni $f \in \mathcal{H}$, si abbia

$$(Af)(\mathbf{x}) = \int a(\mathbf{x}, \mathbf{y})f(\mathbf{y}) d\mu(\mathbf{y}). \quad 12.7$$

Inoltre si ha

$$\|A\|_2^2 = \int |a(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 d\mu(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{y}). \quad 12.8$$

◇

Dimostrazione

Per dimostrare che la condizione è sufficiente sia $a(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in L^2(X \otimes X, d\mu \otimes d\mu)$ e poniamo per ogni funzione $f \in \mathcal{H} \equiv L^2(X, d\mu)$

$$(Af)(\mathbf{x}) \equiv \int a(\mathbf{x}, \mathbf{y})f(\mathbf{y}) d\mu(\mathbf{y}).$$

Allora per ogni $g \in \mathcal{H}$ si ha, per la disuguaglianza di Schwartz,

$$(g, Af) = \int \bar{g}(\mathbf{x})a(\mathbf{x}, \mathbf{y})f(\mathbf{y}) d\mu(\mathbf{x})d\mu(\mathbf{y}) \leq \|a\|_2 \|f\|_2 \|g\|_2.$$

Dunque A è limitato e $\|A\|_2 \leq \|a\|_2$.

Sia $\{\phi_n\}$ una base ortonormale in \mathcal{H} , allora $\phi_n \otimes \phi_m$ è una base ortonormale in $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$.

Dunque esistono $c_{n,m}$ tali che

$$a(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n,m} c_{n,m} \bar{\phi}_n(\mathbf{x}) \phi_m(\mathbf{y}), \quad \sum_{n,m} |c_{n,m}|^2 = \|a\|_2^2 < \infty.$$

Posto

$$a_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n,m \leq N} c_{n,m} \bar{\phi}_n(\mathbf{x}) \phi_m(\mathbf{y}), \quad (A_N f)(\mathbf{x}) = \int a_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}) f(\mathbf{y}) d\mu(\mathbf{y}),$$

si ha, quando $N \rightarrow \infty$,

$$\|a_N - a\|_2 \rightarrow 0, \quad \|A_N - A\|_2 \rightarrow 0,$$

dunque l'operatore A è compatto (come limite in norma di operatori compatti).
Ma si ha anche

$$\text{Tr}(A^* A) = \sum_n \|A\phi_n\|_2^2 = \sum_{n,m} |c_{n,m}|^2 = \|a\|_2^2 < \infty.$$

Dunque A è un operatore di classe Hilbert-Schmidt.

Per dimostrare che la condizione è anche sufficiente, si utilizza la proprietà di J_2 di essere chiusura di \mathcal{F} in norma $\|\cdot\|_2$. Per costruzione ogni operatore di rango finito può essere rappresentato mediante un nucleo integrale.

Scegliendo una successione A_n che converge all'operatore A si può facilmente vedere che i corrispondenti nuclei integrali a_n convergono nella topologia di $L^2(X \otimes X, d\mu \otimes d\mu)$.

Sia $a(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ il nucleo integrale limite. Per ogni $f \in L^2(X, d\mu)$ si ha $(Af) = \int a(\mathbf{x}, \mathbf{y}) f(\mathbf{y}) d\mu(\mathbf{y})$ e inoltre $\|A\|_2 = \|a\|_2$.

♡

Nota 12.4

Se $A \in J_1$ e $A > 0$ si può dimostrare che

$$\|A\|_1 = \int a(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x}).$$

Ma in generale se A non è positivo, *non vale* l'implicazione

$$\left| \int a(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x}) \right| < \infty \implies A \in J_1.$$

♣

Esempio

Abbiamo visto che l'operatore $H_0 \equiv -\frac{d^2}{dx^2}$ su $L^2((0, \pi), dx)$ con condizioni di Dirichlet al bordo ha spettro discreto con autovalori n^2 , ciascuno con molteplicità uno, e autofunzioni associate $\sqrt{2/\pi} \sin nx$, $n \geq 1$. La risolvente $R_\lambda = (H_0 + \lambda)^{-1}$ con parametro $\lambda \in C \setminus R^-$ ha le stesse autofunzioni ed autovalori $(\lambda + n^2)^{-1}$ ed è rappresentata dal nucleo integrale

$$R_\lambda(x, y) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2 + \lambda} \sin nx \sin ny.$$

Dunque, per $\lambda \notin (-\infty, -1]$, l'operatore risolvente R_λ è di classe traccia (si può utilizzare la nota precedente per λ positivo ed estendere poi il risultato a tutto l'insieme risolvente utilizzando l'identità di risolvente e il fatto che J_1 è un ideale bilatero).



Una conseguenza immediata del Teorema 12.5 è la seguente Proposizione, di cui non daremo la facile dimostrazione.

Proposizione 12.6

Sia A un operatore lineare su $L^2(X, d\mu)$, $X \subset R^d$. Le seguenti affermazioni sono tra loro equivalenti

- a) A è un operatore di Hilbert-Schmidt.
- b) Esiste $\xi(\mathbf{x}) \in L^2(X, d\mu)$ tale che, per ogni $f \in D(A)$ valga $|(A f)(\mathbf{x})| \leq \xi(\mathbf{x}) \|f\|_2$.
- c) Esiste un nucleo $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in L^2(X, d\mu)$ tale che, per ogni $f \in L^2(X, d\mu)$ e per quasi tutti i valori di $\mathbf{x} \in X$ si ha $(A f)(\mathbf{x}) = \int K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) f(\mathbf{y}) d\mu(\mathbf{y})$.



Nota 12.5

Un operatore A dotato di nucleo integrale è simmetrico se e solo se il suo nucleo integrale è simmetrico; esso può essere limitato anche se il suo nucleo integrale è singolare.

Ad esempio l'operatore identità ha nucleo integrale $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$. D'altra parte il nucleo $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = h(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{y})$, $h \in C^\infty$, corrisponde all'operatore definito sulle funzioni $f(\mathbf{x})$ continue nell'origine da

$$(K f)(\mathbf{x}) = h(\mathbf{x}) f(0).$$

Questo operatore non è chiudibile poiché l'applicazione $f(\cdot) \rightarrow f(0)$ non è continua in $L^2(X, d\mu)$.



Prima di discutere più in dettaglio gli operatori compatti, diamo un breve cenno agli operatori di Carleman.

Questi operatori sono d'uso frequente in Meccanica Quantistica perché intervengono in modo naturale nell'inversione di operatori differenziali.

Definizione 12.4

Un'applicazione T lineare da \mathcal{H} in $L^2(X, d\mu)$, $X \subset \mathbb{R}^d$, è detta *operatore di Carleman* se esiste una funzione $K_T(\mathbf{x})$ misurabile a valori in \mathcal{H} tale che, per ogni $f \in D(A)$ si abbia

$$(Tf)(\mathbf{x}) = (K_T(\mathbf{x}), f)$$

per quasi ogni \mathbf{x} . La funzione misurabile K_T è detta *nucleo di Carleman associato a T* .

◇

Si ha

Teorema 12.7

L'applicazione T è un operatore di Carleman se e solo se esiste una funzione positiva misurabile $g(\mathbf{x})$ tale che, per ogni $f \in D(T)$, si ha per quasi ogni $\mathbf{x} \in X$ (rispetto alla misura μ)

$$|(Tf)(\mathbf{x})| \leq g(\mathbf{x}) \|f\|_2. \quad 12.9$$

◇

Dimostrazione

La condizione è necessaria: sia T un operatore di Carleman e sia $K(\mathbf{x})$ il nucleo associato. L'affermazione è allora vera prendendo $g(\mathbf{x}) \equiv \|K(\mathbf{x})\|_2$.

La condizione è sufficiente: sia $\rho(\mathbf{x})$ una funzione positiva limitata misurabile e tale che $g(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}) \in L^2(X, d\mu)$.

Indichiamo ancora con ρ l'operatore di moltiplicazione per la funzione $\rho(\mathbf{x})$.

Allora $|(\rho Tf)(\mathbf{x})| \leq g(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}) \|f\|_2$, quindi, per la Proposizione 12.6, ρT rappresenta un operatore di Hilbert-Schmidt.

Dunque esiste una funzione misurabile $\tilde{K}(\mathbf{x})$ a valori negli operatori di Hilbert-Schmidt tale che, per quasi ogni \mathbf{x} , $(\rho Tf)(\mathbf{x}) = (\tilde{K}(\mathbf{x}), f)$.

Posto $K(\mathbf{x}) = (\rho(\mathbf{x}))^{-1} \tilde{K}(\mathbf{x})$ si deduce

$$(Tf)(\mathbf{x}) = (K(\mathbf{x}), f).$$

♡

Spesso i nuclei integrali che si incontrano nello studio dell'equazione di Schrödinger hanno la forma $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$.

Sia A un operatore che è rappresentato da questo nucleo integrale, con K_1, K_2 che soddisfano, per quasi tutti i valori di $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$,

$$\int |K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 d\mu(\mathbf{y}) < C_1, \quad \int |K_2(\mathbf{y}, \mathbf{x})|^2 d\mu(\mathbf{y}) < C_2 \quad 12.10$$

Poiché $\|A\| \equiv \sup_{\phi, \|\phi\|_2=1} |(\phi, A\phi)|$, è facile verificare che A è limitato in $L^2(R^d, d\mu)$ e che la sua norma soddisfa $\|A\| \leq \sqrt{C_1 C_2}$. Inoltre l'aggiunto A^* ha nucleo integrale $\overline{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$.

Da questa osservazione, scegliendo

$$K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv |K(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^{1/2}, \quad K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \text{sign}(K(\mathbf{x}, \mathbf{y})) |K(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^{1/2},$$

si deduce il seguente importante risultato:

Teorema 12.8

Se il nucleo integrale dell'operatore A soddisfa quasi ovunque

$$\int |K(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \mu(d\mathbf{y}) \leq C_1, \quad \int |K(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \mu(d\mathbf{x}) \leq C_2, \quad 12.11$$

allora $\|A\| \leq \sqrt{C_1 C_2}$.

◇

Diamo infine un utile criterio che dà una condizione sufficiente perché un operatore sia compatto.

Teorema 12.9

Sia A un operatore con nucleo $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ con $K_{1,2}$ misurabili.

Siano X_n^1, X_n^2 due successioni crescenti di sottoinsiemi misurabili di X , con X come limite comune.

Supponiamo che per ogni valore dell'indice n si abbia

$$\int \int_{X_n^1 \otimes X_n^2} |K(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 d\mu(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{y}) < \infty, \quad 12.12$$

e inoltre che, per ogni $\epsilon > 0$, esista un intero $N(\epsilon)$ tale che le seguenti disuguaglianze siano soddisfatte

a) $\int_X |K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})| d\mu(\mathbf{y}) < \epsilon$ quasi ovunque in $X \setminus X_{N(\epsilon)}^1$;

b) $\int_X |K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})| d\mu(\mathbf{y}) < \epsilon$ quasi ovunque in $X \setminus X_{N(\epsilon)}^2$;

c) $\int_{X \setminus X_{N(\epsilon)}^1} |K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})| d\mu(\mathbf{y}) < \epsilon$ quasi ovunque in X ;

d) $\int_{X \setminus X_{N(\epsilon)}^2} |K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})| d\mu(\mathbf{y}) < \epsilon$ quasi ovunque in X ;

allora l'operatore A è compatto.

◇

Traccia della dimostrazione

Consideriamo gli operatori A_n descritti dai nuclei integrali $K_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = K(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ se $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in X_n \otimes X_n$, zero altrimenti.

Dai teoremi precedenti segue che A_n è di classe Hilbert-Schmidt.

D'altra parte da $a)$, $b)$, $c)$, $d)$ segue che $\|S_n\| < \epsilon$, dove S_n è l'operatore il cui nucleo integrale è K ristretto al complemento $X_{N(\epsilon)}^1 \otimes X_{N(\epsilon)}^2$.

Dunque A è limite in norma di operatori di Hilbert-Schmidt e quindi è compatto. \diamond

Esempio 1

Sia $X \equiv R^d$, μ la misura di Lebesgue e supponiamo che l'operatore A abbia nucleo integrale

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f_1(\mathbf{x}) f_2(\mathbf{y}) f_3(\mathbf{x} - \mathbf{y}),$$

con f_1, f_2 limitate misurabili, $f_k(\mathbf{x}) \rightarrow 0$, quando $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$, e $f_3 \in L^1(R^d)$.

Poniamo

$$X_{(1,n)} = X_{(2,n)} \equiv \{\mathbf{x} : \mathbf{x} \in R^d, |\mathbf{x}| < n\},$$

$$K_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f_1(\mathbf{x})|f_3(\mathbf{x}-\mathbf{y})|^{1/2}, \quad K_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f_2(\mathbf{y})|f_3(\mathbf{x}-\mathbf{y})|^{1/2} \text{sign}(f_3(\mathbf{x}-\mathbf{y})).$$

Allora per il teorema precedente l'operatore A è compatto. \clubsuit

Nota 12.7

Si può vedere che, se nell'esempio precedente si richiede un'opportuna convergenza a zero delle funzioni f_1 e f_2 , è sufficiente richiedere che la funzione f_3 sia in $L_{\text{loc}}^1(R^d)$.

Il risultato è quindi applicabile al caso $f_3(\mathbf{z}) = \frac{1}{|\mathbf{z}|}$. \clubsuit

Esempio 2

Sia $X = R^d$, μ la misura di Lebesgue. Sia A un operatore di nucleo

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \begin{cases} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{\alpha-d} H(\mathbf{x}, \mathbf{y}), & \text{per } \mathbf{x} \neq \mathbf{y}, \\ 0, & \text{per } \mathbf{x} = \mathbf{y}, \end{cases} \quad 12.13$$

con $\alpha > 0$ e H funzione limitata misurabile.

Poniamo $K_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{\alpha-d} H(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, se $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \geq n^{-1}$, zero altrimenti. Allora per ogni n l'operatore A_n è di classe Hilbert-Schmidt e la successione A_n converge a A in norma. Dunque A è compatto. \clubsuit

Data l'importanza della compattezza di operatori nello studio della matematica della Meccanica Quantistica diamo un altro criterio di compattezza.

Teorema 12.10

Sia A un operatore positivo. Le seguenti affermazioni sono tra loro equivalenti.

- i) $(A - \mu_0 I)^{-1}$ è compatto per un valore $\mu_0 \in \rho(A)$.
- ii) $(A - \mu I)^{-1}$ è compatto per ogni $\mu \in \rho(A)$.
- iii) $\{\phi \in D(A), \|\phi\|_2 \leq 1, \|A\phi\|_2 \leq b\}$ è compatto per ogni $b > 0$.
- iv) $\{\phi \in D(A), \|\phi\|_2 \leq 1, (\phi, A\phi) \leq b\}$ è compatto per ogni $b > 0$.
- v) A ha spettro discreto e, se a_n sono gli autovalori, ordinati in ordine crescente, si ha $a_n \rightarrow \infty$ per $n \rightarrow \infty$.

◇

Dimostrazione

i) \leftrightarrow ii)

Facciamo uso dell'identità di risolvete,

$$(A - \mu I)^{-1} = (A - \mu_0 I)^{-1} + (A - \mu_0 I)^{-1}(\mu - \mu_0)(A - \mu I)^{-1}. \quad 12.14$$

Il primo addendo è compatto per ipotesi. Anche il secondo è compatto, perché gli operatori compatti formano un ideale in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

ii) \rightarrow v)

Poiché $(A - \mu I)^{-1}$ è compatto, per il teorema spettrale il suo spettro puntuale ha molteplicità finita e zero come (eventuale) punto di accumulazione.

v) \rightarrow iv)

Sia $Q(A)$ il dominio della forma quadratica chiusa positiva $q_A(\phi) = (\phi, A\phi) \in \mathbb{R}^+$, $\phi \in \mathcal{H}$. Poniamo

$$\mathcal{F}_b^A \equiv \{\psi \in Q(A), \|\psi\|_2 = 1, q_A(\psi) \leq b\}$$

L'insieme \mathcal{F}_b^A è chiuso perché la forma è chiusa.

Per dimostrare che è compatto, dimostriamo che per ogni $\epsilon > 0$ è possibile ricoprire \mathcal{F}_b^A con un numero finito di palle (in \mathcal{H}) di raggio ϵ .

Dato ϵ scegliamo N così grande che risulti $a_N \geq b\epsilon^{-1}$.

Allora v) implica che

$$\sum_{n \geq N} |(\psi, \phi_n)|^2 \leq \epsilon,$$

quindi ogni $\psi \in \mathcal{F}_b^A$ è a distanza minore di $\sqrt{\epsilon}$ da ogni vettore nella palla unitaria generata dalle prime $N - 1$ autofunzioni.

Poiché quest'insieme è compatto (essendo un sottoinsieme chiuso e limitato di R^{N-1}) esso può essere ricoperto con un numero finito di palle di raggio $\sqrt{\epsilon}$. Dunque anche \mathcal{F}_b^A può essere ricoperto da un numero finito di palle di raggio $\sqrt{\epsilon}$.

iv) \rightarrow iii)

Se *iv)* è soddisfatto per A , lo è anche per A^2 ; quindi anche $\mathcal{F}_b^{A^2}$ è compatto. Ma $(\psi, A^2\psi) = \|A\psi\|_2^2$.

iii) \rightarrow i)

Sia

$$\mathcal{M} \equiv \{ \psi \in \mathcal{H} : \exists \phi \in \mathcal{H}, \psi = (A + I)^{-1}\phi, \|\phi\|_2 \leq 1 \}.$$

Allora $\|\psi\|_2 \leq \|\phi\|_2 \leq 1$ e $\|A\psi\|_2 = \|A(A + I)^{-1}\phi\|_2 \leq \|\phi\|_2 \leq 1$, per cui $\psi \in D_1 \equiv \{ \psi \in D(A), \|\psi\|_2 \leq 1, \|A\psi\|_2 \leq 1 \}$.

Quindi $\mathcal{M} \subset D_1$ che è compatto. Di conseguenza \mathcal{M} è precompatto e quindi $(A + I)^{-1}$ è un operatore compatto.

♡

Consideriamo ad esempio l'operatore in $\mathcal{H} \equiv L^2(-\pi, \pi)$ definito da

$$A \equiv -\frac{d^2}{dx^2}, \quad D(A) = \{ \phi \in C^\infty, \phi(-\pi) = \phi(\pi) \} \quad 12.15$$

e poniamo

$$S \equiv \left\{ \phi \in L^2(-\pi, \pi), \|\phi\|_2 \leq 1, \left\| \frac{d\phi}{dx} \right\|_2 \leq 1 \right\} \quad 12.16$$

(cioè il dominio della forma quadratica q_A associata ad A).

Utilizzando la serie di Fourier e denotando con c_n i coefficienti di Fourier si vede che S è caratterizzato dalle relazioni $\sum |c_n|^2 < \infty$, $\sum n^2 |c_n|^2 < \infty$. In queste notazioni si vede subito che S è compatto nella topologia di \mathcal{H} , e quindi l'operatore $(\bar{A} + I)^{-1}$ è compatto.

Nello stesso modo si tratta la chiusura dell'operatore $-\frac{d^2}{dx^2} + x^2$ definito su $C_0^\infty(R)$.

Notiamo che lo stesso risultato *non è vero* per l'operatore $-\frac{d^2}{dx^2}$ definito inizialmente su $C_0^\infty(R)$.

Infatti la chiusura di quest'operatore è un operatore autoaggiunto con spettro continuo coincidente con $[0, \infty)$.

Questo è dovuto al fatto che nel dominio dell'operatore esistono successioni di funzioni che convergono fortemente e le cui trasformate secondo $(A + I)^{-1}$ non convergono debolmente; queste funzioni non hanno una convergenza abbastanza rapida all'infinito.

Dal teorema precedente si conclude che è utile avere dei criteri per decidere se un sottoinsieme di uno spazio di Hilbert \mathcal{H} è compatto.

Nella realizzazione dello spazio di Hilbert \mathcal{H} come $L^2(\Omega, d\mathbf{x})$, $\Omega \subset R^d$, questi criteri sono in generale conseguenza dei criteri di immersione di Sobolev e questi a loro volta sono conseguenza di disuguaglianze che sono soddisfatte tra norme diverse in spazi di funzioni.

Diamo in Appendice a questo capitolo alcune definizioni e disuguaglianze che sono utili nello studio delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger.

Nel seguito di questo capitolo, diamo dei criteri di compattezza che risultano da disuguaglianze generali di tipo Sobolev, ma che possono essere dedotte in modo più elementare e che sono utili per l'applicazione a problemi particolari.

In questa direzione va il seguente criterio di compattezza, dovuto a Rellich.

Criterio di compattezza di Rellich

Siano F e G due funzioni continue positive in R^d tali che

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} F(\mathbf{x}) = +\infty, \quad \lim_{|\mathbf{p}| \rightarrow \infty} G(\mathbf{p}) = +\infty.$$

Allora l'insieme

$$S \equiv \left\{ f : \int F(\mathbf{x})|f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \leq 1, \quad \int G(\mathbf{p})|\hat{f}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} \leq 1 \right\}$$

è un insieme compatto in $L^2(R^d)$.

◇

Dimostrazione

L'insieme considerato è chiuso. Senza perdita di generalità possiamo assumere

$$F(\mathbf{x}) \leq |\mathbf{x}|^2, \quad G(\mathbf{p}) \leq |\mathbf{p}|^2. \quad 12.17$$

Infatti se le (12.17) non sono soddisfatte, l'insieme S è chiuso ed è contenuto nell'insieme (compatto) definito da funzioni che soddisfano (12.17), per esempio rimpiazzando F e G con $\min\{F(\mathbf{x}), |\mathbf{x}|^2\}$ e $\min\{G(\mathbf{p}), |\mathbf{p}|^2\}$.

L'insieme considerato è denso in $L^2(R^d)$ perché contiene il dominio dell'oscillatore armonico. Ne segue che

$$S \subset \left\{ f : \int |f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \leq 1, \quad (f, Af) \leq 2 \right\},$$

dove A è la hamiltoniana dell'oscillatore armonico.

Indichiamo con \hat{G} l'operatore che agisce in trasformata di Fourier come operatore di moltiplicazione per $G(\mathbf{p})$.

Notiamo innanzitutto che, se $V(\mathbf{x})$ è limitato e ha supporto compatto, allora

$$[V(\hat{G} + I)^{-1}](\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad 12.18$$

è un operatore compatto.

Infatti per ogni valore di $\epsilon > 0$ il nucleo di $V[\epsilon|\mathbf{p}|^d + \hat{G} + I]^{-1}$ è in $L^2(R^d) \otimes L^2(R^d)$ e d'altra parte $(\epsilon|\mathbf{p}|^d + G(\mathbf{p}) + 1)^{-1}$ converge a $(G(\mathbf{p}) + 1)^{-1}$ nella topologia di $L^\infty(R^d)$.

Dunque $V(\hat{G} + I)^{-1}$ è il limite in norma di operatori compatti e quindi è compatto.

Dato $\alpha > 0$ definiamo ora

$$V_\alpha \equiv \min\{F(\mathbf{x}), \alpha + 1\} - \alpha - 1.$$

Poiché $\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} F(\mathbf{x}) = +\infty$, V_α ha supporto compatto e quindi $V_\alpha(\hat{G} + I)^{-1}$ è compatto.

Dal principio di minimax

$$\lambda_n(\hat{G} + V) \geq \lambda_n(\hat{G} + V_\alpha + \alpha + 1) \quad 12.19$$

e dunque per ogni $\alpha > 0$ esiste un $m(\alpha)$ tale che $\lambda_{m(\alpha)}(\hat{G} + V) \geq \alpha$.

Poiché α è positivo arbitrario ne segue che $\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n(\hat{G} + V) = \infty$.

Questo dimostra che $(\hat{G} + V)^{-1}$ è compatto e quindi S è un insieme compatto. \heartsuit

Esempio 1

Sia

$$V \in L^1_{\text{loc}}(R^d), \quad V(\mathbf{x}) \geq 0, \quad \lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} V(\mathbf{x}) \rightarrow +\infty. \quad 12.20$$

Allora $H \equiv -\Delta + V$ definito come somma di forme quadratiche è un operatore che ha risolvente compatta. \diamond

Dimostrazione

Poiché $-\Delta$ e V sono entrambi operatori positivi, si ha per ogni ϕ

$$(\phi, H\phi) \leq b \implies (\phi, -\Delta\phi) \leq b, \quad (\phi, V\phi) \leq b,$$

dunque l'insieme

$$\mathcal{F}_{H,b} \equiv \{\phi \in D(H), \|\phi\|_2 \leq 1, (\phi, H\phi) \leq b\}$$

è chiuso e contenuto in

$$\left\{ \phi : \|\phi\|_2 \leq 1, \int |\mathbf{p}|^2 |\hat{\phi}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} \leq b, \int V(\mathbf{x}) |\phi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \leq b \right\}$$

e quest'ultimo insieme è compatto per il criterio di Rellich. \heartsuit

Esempio 2

Sia $d \geq 3$. Sia

$$\begin{aligned} V &= V_1 + V_2, & V_2 &\in L^{d/2}(R^d) + L^\infty(R^d) \\ V_1 &\in L^1_{\text{loc}}(R^d), & V_1 &\geq 0, \quad \lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} V_1(\mathbf{x}) = +\infty. \end{aligned} \quad 12.21$$

Allora $H \equiv -\Delta + V$, definito come somma di forme quadratiche, ha risolvete compatta.

◇

Dimostrazione

V_2 è piccolo in forma rispetto a $-\Delta$ quindi anche rispetto a $-\Delta + V_1$. D'altra parte se $A \geq 0$ ha risolvete compatta e B è simmetrico e piccolo in forma rispetto ad A , allora $C \equiv A + B$ (visto come operatore la cui forma quadratica q_C è la la somma delle forme quadratiche q_A e q_B) ha risolvete compatta.

Ricordiamo che la forma quadratica q_A è definita da $q_A(\phi) \equiv (\phi, A\phi)$ se $\phi \in D(A)$ ed estesa al dominio naturale $Q(A)$ mediante chiusura nella topologia di $q_A(\phi) + \|\phi\|^2$ (ricordare che A è positivo).

Infatti per ogni $\phi \in Q(C) \cap Q(A)$ si ha $q(B)(\phi) \leq \alpha[q(\phi) + b\|\phi\|^2]$ con $\alpha < 1$, $\beta > 0$, e quindi

$$q_C(\phi) \geq (1 - \alpha)q_A(\phi) - \beta\|\phi\|^2.$$

Dal principio di minimax si deduce

$$\lambda_n(C) \geq (1 - \alpha)\lambda_n(A) - \beta$$

e dunque $\lambda_n \rightarrow \infty$ implica $\lambda_n(A) \rightarrow \infty$.

♡

Un altro criterio di compattezza di uso frequente è il seguente

Criterio di compattezza di Riesz

Sia $1 \leq p < \infty$, e sia S un sottoinsieme della palla unitale in $L^p(R^d)$. Condizione necessaria e sufficiente affinché la chiusura in norma L^p di S sia compatta è che

a)

$f \rightarrow 0$ in L^p all'infinito uniformemente su S
($\forall \epsilon > 0, \exists$ un compatto $K \subset R^d$ tale che $\int_{R^d - K} |f(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} < \epsilon$ per ogni $f \in S$);

b)

Quando $\mathbf{y} \rightarrow 0$, $f(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rightarrow f(\mathbf{x})$ uniformemente in S
($\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0$ tale che per ogni $f \in S$ e $|\mathbf{y}| < \delta$ si abbia $\int |f(\mathbf{x} - \mathbf{y}) - f(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} < \epsilon$).

◇

Dimostrazione

la condizione è necessaria

Se S è compatto, scelto $\alpha > 0$, siano f_1, \dots, f_N tali che le palle di raggio $\frac{\alpha}{3}$ aventi centro nella palla unitale del sottospazio sotteso dalle f_k coprono \bar{S} . Esistono quindi K e δ tali che le condizioni a) e b) siano soddisfatte per f_1, \dots, f_N ed $\epsilon = \frac{\alpha}{3}$.

Per estendere la disuguaglianza a tutto S , notiamo che per ogni $g \in L^p$ si ha

$$\lim_{K \rightarrow R^d} \int_{R^d - K} |g(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow 0} \|g_{\mathbf{y}} - g\|_p = 0, \quad g_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) \equiv g(\mathbf{x} - \mathbf{y}).$$

Per un argomento standard si deduce allora che a) e b) valgono su tutto S .

la condizione è sufficiente

Supponiamo che S soddisfi a) e b).

Per ogni compatto $\Omega \subset R^d$ e costanti positive α, β , il teorema di Ascoli-Arzelà garantisce che è compatto l'insieme

$$T(\Omega, \alpha, \beta) \equiv \{f \in C_0^\infty(R^d), \text{supp}(f) \subset \Omega, \|f\|_\infty \leq \alpha, \|\nabla f\|_\infty \leq \beta\}. \quad 12.24$$

Dunque, dato $\epsilon > 0$ è sufficiente trovare Ω, α, β in modo tale che per ogni $f \in S$ esista $g \in T(\Omega, \alpha, \beta)$ con $\|f - g\|_p < \epsilon$.

Infatti in questo caso, dal fatto che $T(\Omega, \alpha, \beta)$ può essere ricoperto da un numero finito di palle di raggio ϵ segue che S può essere ricoperto da un numero finito di palle di raggio 2ϵ .

Per trovare Ω, α, β con le proprietà volute, data $\epsilon > 0$ scegliamo K, δ in modo tale che per $f \in S$

$$\int_{R^d - K} |f(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} < \frac{\epsilon^p}{4}, \quad |\mathbf{y}| < \delta \implies \|f_{\mathbf{y}} - f\|_p \leq \frac{\epsilon}{4}, \quad 12.25$$

dove abbiamo posto $f_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{x} - \mathbf{y})$.

Sia ora η una funzione positiva C^∞ con supporto in $y : \|y\| < \delta, \int \eta(x) dx$.

Sia ξ la funzione caratteristica di

$$K' \equiv \{y : \text{dist}(y, K) < \delta\}.$$

Una scelta possibile di $\{\Omega, \alpha, \beta\}$ è la seguente

$$\Omega \equiv \{y : \text{dist}(y, K) \leq 2\delta\}, \quad \alpha = \|\eta\|_q, \quad \beta = \|\nabla \eta\|_p, \quad p^{-1} + q^{-1} = 1. \quad 12.26$$

Quest'ultima affermazione segue dalle disuguaglianze seguenti, di cui la prima è la disuguaglianza di Hölder

$$\|f * g\|_\infty \leq \|f\|_p \|g\|_q, \quad p^{-1} + q^{-1} = 1, \quad \| |f| * |g| \|_1 \leq \|f\|_1 \|g\|_1$$

dalle quali si deduce per interpolazione

$$\|f * g\|_s \leq \|f\|_q \|g\|_p, \quad p^{-1} + q^{-1} = 1 + s^{-1} \quad 12.27$$

Dobbiamo allora dimostrare $\|f - g\|_p < \epsilon$.

Dalle definizioni segue

$$\int_{R^d - K'} |f - g|^p dx \leq \int_{R^d - K'} |f(x)|^p dx < \frac{\epsilon^p}{4}$$

e dunque

$$\|\xi f_y - \xi\|_p \leq \|f_y - f\|_p + \|1 - \xi\|_p f + \|(1 - \xi_y)f_y\|_p \leq \frac{3}{4}\epsilon$$

e quindi

$$\|(\eta * \xi)f - \xi f\|_p \leq \int \eta(y) \|\xi f(\cdot - y) - \xi f(\cdot)\|_p dy \leq \frac{3\epsilon}{4} \quad 12.28$$

da cui si deduce

$$\|g - f\|_p \leq \|g - \xi f\|_p + \|(1 - \xi)f\|_p < \epsilon.$$

♡

APPENDICE 12A: BOUQUET DI DISUGUAGLIANZE

Diamo in questa Appendice una collezione di disuguaglianze di uso comune nella teoria degli operatori di Schrödinger.

In proposito si può vedere il lavoro di rassegna di Beckner ([B75]) o i libri di Bers, John, Schechter ([BJS64]) e di Garling ([G07]).

Talune di queste disuguaglianze possono essere ottenute in modo elementare, utilizzando in particolare la trasformazione di Fourier.

Per altre la dimostrazione richiede tecniche più sofisticate.

Diamo un esempio di una disuguaglianza che si può ottenere in modo elementare. Si ha in R^d

$$\begin{aligned} \|f\|_\infty &\leq \int |\hat{f}(\mathbf{p})| d\mathbf{p} = \int (|\mathbf{p}|^2 + 1)^\alpha |\hat{f}(\mathbf{p})| (|\mathbf{p}|^2 + 1)^{-\alpha} d\mathbf{p} \\ &\leq \left[\int (|\mathbf{p}|^2 + 1)^{2\alpha} |\hat{f}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} \right]^{1/2} \left[\int (|\mathbf{p}|^2 + 1)^{-2\alpha} d\mathbf{p} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (12.1)$$

cioè se $4\alpha > d$

$$\|f\|_\infty \leq C \left\| (|\mathbf{p}|^2 + 1)^\alpha \hat{f} \right\|_2.$$

Ciò significa che per ogni d lo spazio $H^{\frac{d}{2}+\epsilon}$ è immerso in modo completamente continuo in L^∞ .

Tre le disuguaglianze hanno assunto un ruolo principale, per l'utilizzazione molto frequente che ne viene fatta, le *disuguaglianze di Jensen*.

Premettiamo una definizione.

Una funzione f a valori reali definita su un insieme convesso C di uno spazio vettoriale X si dice *convessa* se

$$\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in C, \quad \forall \theta \in (0, 1), \quad f((1-\theta)\mathbf{x} + \theta\mathbf{y}) \leq (1-\theta)f(\mathbf{x}) + \theta f(\mathbf{y}).$$

Se la disuguaglianza è stretta, la funzione si dice *strettamente convessa*.

12A.1 Disuguaglianza di JENSEN I

Se f è una funzione convessa su un insieme convesso $C \subset X$ e p_1, \dots, p_n sono numeri positivi con $\sum_k p_k = 1$, allora

$$f(p_1\mathbf{x}_1 + \dots + p_n\mathbf{x}_n) \leq p_1f(\mathbf{x}_1) + \dots + p_nf(\mathbf{x}_n). \quad 12A.1$$

Se la funzione è strettamente convessa, l'eguaglianza vale solo se $\mathbf{x}_1 = \dots = \mathbf{x}_n$. \diamond

12A.2 Disuguaglianza di JENSEN II

Sia μ una misura di probabilità sugli insiemi di Borel di un intervallo aperto I dell'asse reale e sia $\bar{\mu}$ sia il suo baricentro.

Se f è una funzione convessa misurabile con $-\infty < \int_I f d\mu < \infty$ allora

$$f(\bar{\mu}) \leq \int_I f d\mu. \quad 12A.2$$

Se f è strettamente convessa, l'uguaglianza vale se e solo se $\mu(\{\bar{\mu}\}) = 1$, cioè se la misura è concentrata nel punto $\bar{\mu}$. \diamond

Dimostrazione

È facile vedere che se f è una funzione reale convessa nell'intervallo I , per qualunque punto $x_0 \in I$ esiste una funzione affine $a(x)$ su R tale che $a(x_0) = f(x_0)$ e che $\forall x \in I, f(x) \leq a(x)$.

Esiste quindi una funzione affine a su R tale che $a(\bar{\mu}) = f(\bar{\mu})$ e $a(x) \leq f(x)$ per ogni $x \in I$.

Ne segue

$$f(\bar{\mu}) = a(\bar{\mu}) = \int_I a d\mu \leq \int_I f d\mu.$$

Se f è strettamente convessa, allora $f(x) > a(x)$ se $x \neq \bar{\mu}$ e quindi l'eguaglianza vale se e solo se la misura μ è concentrata nel punto $\bar{\mu}$.

♡

12A.3 Disuguaglianza di JENSEN III

Sia μ una misura di probabilità sugli insiemi di Borel di uno spazio di Banach reale separabile X e supponiamo che μ abbia un baricentro $\bar{\mu}$.

Se f è una funzione continua convessa con $-\infty < \int_X f d\mu < \infty$ allora

$$f(\bar{\mu}) \leq \int_X f d\mu. \quad 12A.3$$

Se f è strettamente convessa, l'uguaglianza vale se e solo se $\mu(\{\bar{\mu}\}) = 1$ (cioè se la misura è concentrata nel punto $\bar{\mu}$).

◇

Dimostrazione

La dimostrazione è la stessa della dimostrazione della disuguaglianza di Jensen II.

Per avere funzionali affini di confronto, utilizziamo il teorema di separazione per insiemi convessi disgiunti in uno spazio di Banach.

Possiamo pertanto utilizzare come funzionali affini di confronto gli elementi di X^* e possiamo procedere per induzione utilizzando la separabilità di X .

◇

Si utilizza spesso la decomposizione di una misura in una parte continua rispetto alla misura di Lebesgue e una parte singolare rispetto a questa misura.

Questo è una conseguenza del seguente Teorema

12A.4 Teorema (di decomposizione di LEBESGUE)

Sia $\{\Omega, \Sigma, \mu\}$ uno spazio di misura e ν una misura su Σ con $\nu(\Omega) < \infty$.

Allora esiste una funzione non-negativa $f \in L^1(\Omega, d\mu)$ e un insieme $B \in \Sigma$ con $\mu(B) = 0$ tale che

$$\nu(A) = \int_A f d\mu + \nu(A \cap B), \quad \forall A \in \Sigma \quad 12A.4$$

(tutte le misure che considereremo sono *regolari*).

◇

Nota 12A.1

Definiamo una misura ν_B mediante $\nu_B(A) = \nu(A \cap B)$.

Le misure μ e ν_B sono mutuamente singolari. Inoltre se decomponiamo Ω in $B \cup \Omega/B$ risulta che $\mu(B) = 0$ e $\nu_B(\Omega/B) = 0$ (le misure μ e ν_B hanno supporti disgiunti).

♣

Dimostrazione del teorema di decomposizione

Poniamo $\rho(A) = \mu(A) + \nu(A)$. Sia $g \in L^2_\rho$ e poniamo $m(g) = \int_\Omega g \, d\mu$.
Dalla disuguaglianza di Schwarz risulta

$$|m(g)| \leq (\rho(\Omega))^{\frac{1}{2}} \|g\|_{L^2_\rho}.$$

Per il teorema di rappresentabilità di Riesz, esiste un elemento $f \in L^2_\rho$ tale che $m(g) = (g, f)$. Pertanto

$$\int_\Omega g \, d\mu = \int_\Omega fg \, d\rho = \int_\Omega fg \, d\nu + \int_\Omega fg \, d\mu.$$

Prendendo come funzione g la funzione indicatrice ξ_A dell'insieme A risulta

$$\mu(A) = \int_\Omega \xi_A \, d\mu = \int_A f \, d\mu + \int_A f \, d\nu. \quad 12A.6$$

La funzione f è definita quasi ovunque rispetto a ρ (e quindi rispetto sia ad μ che a ν).

Risulta da (12A.6) che la funzione f assume nel supporto di μ valori compresi tra 0 e 1.

Indichiamo rispettivamente con G, G_N, \mathcal{B} , gli insiemi di punti nei quali f prende valori rispettivamente in $[0, 1], [0, 1 - \frac{1}{N}), (1, \infty)$.

Per la regolarità della misura μ e poiché $g \in L^2_\rho$ (e quindi anche in L^2_μ) risulta $\mu(\mathcal{B}) = 0$.

Inoltre $\mu(A \cap G_N) = \int_{G_N} f \, d\mu$ e per convergenza monotona, essendo f integrabile in G e μ una misura regolare, risulta $\mu(A \cap G) = \int_A f \, d\mu$.

Ne segue che

$$\nu(A) = \int_A f \, d\mu + \nu(A \cap \mathcal{B}). \quad 12A.7$$

Prendendo $A = \Omega$ risulta infine che $f \in L^1(\mu)$.

♡

Dal teorema di decomposizione di Lebesgue segue come corollario:

12A.5 Teorema di RADON-NIKODYM

Sia $\{\Omega, \Sigma, \mu\}$ uno spazio di misura e sia ν una misura su Σ con $\nu(\Omega) < \infty$. Allora ν è assolutamente continua rispetto a μ se e solo se esiste una funzione non-negativa $f \in L^1_\mu$ tale che per ogni $A \in \Sigma$ si abbia $\nu(A) = \int_A f \, d\mu$.

◇

Daremo qui di seguito alcune delle disuguaglianze di uso più frequente nella teoria degli operatori di Schrödinger.

Dimostreremo le più semplici, per le altre rimandiamo ai riferimenti citati nella bibliografia posta alla fine del Capitolo.

12A.6 Disuguaglianza di HÖLDER

Se $1 < p < \infty$ e $f \in L^p$, $g \in L^{p'}$ con $\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1$, allora $fg \in L^1$ e si ha

$$\int |fg| d\mu \leq \|f\|_p \|g\|_{p'}. \quad 12A.6$$

Il segno di uguaglianza vale se $\|f\|_p \|g\|_{p'} = 0$ o se quasi ovunque $g = \lambda|f|^{p-1}\text{sign}f$. Chiamiamo *esponente coniugato a p* l'esponente p' definito da

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1.$$

◇

Non diamo qui la dimostrazione del Teorema di Hölder; notiamo tuttavia che da esso segue il seguente

12A.7 Corollario I

Se $f \in L^p$ si ha

$$\|f\|_p = \max \left\{ \left| \int fg d\mu \right| : \|g\|_{p'} = 1 \right\}. \quad 12A.7$$

Reciprocamente una funzione misurabile f appartiene a L^p , $1 \leq p < \infty$, se e solo se $fg \in L^1$ per tutte le funzioni $g \in L^{p'}$.

◇

Il seguente corollario del teorema di Hölder è spesso utilizzato

12A.8 Corollario II

Sia f è una funzione non negativa su $(\Omega_1, \Sigma_1, \mu_1) \otimes (\Omega_2, \Sigma_2, \mu_2)$ e sia $0 < p \leq q < \infty$. Allora

$$\left[\int_{\Omega_1} \left(\int_{\Omega_2} f^p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mu_2(\mathbf{y}) \right)^{\frac{q}{p}} d\mu_1(\mathbf{x}) \right]^{\frac{1}{q}} \leq \left[\int_{\Omega_2} \left(\int_{\Omega_1} f^q(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mu_1(\mathbf{x}) \right)^{\frac{p}{q}} d\mu_2(\mathbf{y}) \right]^{\frac{1}{p}}. \quad 12A.8$$

◇

Dimostrazione

La dimostrazione si ottiene utilizzando il teorema di Fubini (per scambiare gli ordini di integrazione) e il corollario I.

♡

12A.9 Disuguaglianze di SOBOLEV

Se f è una funzione su R^d , $d > 1$, a supporto compatto e differenziabile con differenziale continuo e se $1 \leq p < d$ allora vale la disuguaglianza

$$\|f\|_{\frac{pd}{d-p}} \leq \frac{p(d-1)}{2(d-p)} \left[\prod_{j=1}^d \left\| \frac{\partial f}{\partial x_j} \right\|_p^p \right]^{\frac{1}{d}} \leq \frac{p(d-1)}{2d(d-p)} \left[\sum_{j=1}^d \left\| \frac{\partial f}{\partial x_j} \right\|_p^p \right]^{\frac{1}{p}} \quad 12A.9$$

◇

Dimostrazione

Notiamo che, applicando ripetutamente il teorema fondamentale del calcolo come nella disuguaglianza mostrata sotto, si ha

$$\|f\|_{\frac{d}{d-1}} \leq \frac{1}{2} \left(\prod_{j=1}^d \left\| \frac{\partial f}{\partial x_j} \right\|_1 \right)^{\frac{1}{d}} \leq \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^d \left\| \frac{\partial f}{\partial x_j} \right\|_1 \right).$$

Questo dimostra (12A.9) nel caso $p = 1$.

Analizziamo adesso il caso $1 < p < d$.

Per qualunque s e qualunque $1 \leq j \leq d$ abbiamo

$$|f(\mathbf{x})|^s \leq s \int_{-\infty}^{x_j} |f(t, \mathbf{x}^j)|^{s-1} \left| \frac{\partial f}{\partial x_j}(t, \mathbf{x}^j) \right| dt$$

(abbiamo utilizzato la notazione x^j per le rimanenti coordinate).

Un analogo disuguaglianza si ottiene integrando tra x_j e ∞ , quindi

$$|f(\mathbf{x})|^s \leq \frac{s}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |f(t, \mathbf{x}^j)|^{s-1} \left| \frac{\partial f}{\partial x_j}(t, \mathbf{x}^j) \right| dt.$$

Da qui si deduce

$$\|f\|_{\frac{sd}{d-1}}^{sd} \leq \frac{s}{2} \prod_{j=1}^d \left\| |f|^{s-1} \left| \frac{\partial f}{\partial x_j} \right| \right\|_1.$$

La disuguaglianza di Hölder dà allora

$$\|f\|_{\frac{sd}{d-1}}^{sd} \leq \frac{s}{2} \prod_{j=1}^d \left\| \frac{\partial f}{\partial x_j} \right\|_p \|f\|_{(s-1)p'}^{s-1}.$$

Scegliendo $s = \frac{p(d-1)}{d-p}$ e quindi $(s-1)p' = \frac{sd}{d-1} = \frac{pd}{d-p}$ si dimostra infine la tesi del Teorema.

♡

12A.10 Test di SCHUR

Sia $k(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ una funzione non negativa misurabile su uno spazio prodotto $(X, \Sigma, \mu) \otimes (Y, \Xi, \nu)$ e sia $1 < p < \infty$.

Supponiamo che esistano funzioni misurabili strettamente positive g su (X, Σ, μ) e h su (Y, Ξ, ν) e due costanti a e b tali che quasi ovunque

$$\int_Y k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) h^{p'}(\mathbf{y}) d\nu(\mathbf{y}) \leq (ag(\mathbf{x}))^{p'}, \quad \int_Y k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) g^p(\mathbf{x}) d\mu(\mathbf{x}) \leq (bh(\mathbf{y}))^p. \quad 12A.10$$

Allora se $f \in L^p(Y)$ si ha

- a) $T(f) \equiv \int_Y k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) f(\mathbf{y}) d\nu(\mathbf{y})$ esiste per quasi tutti i valori di \mathbf{x} ;
 b) $T(f) \in L^p(X)$ e $\|T(f)\| \leq ab\|f\|_p$.

◇

Dimostrazione

La dimostrazione utilizza la disuguaglianza di Hölder.

Notiamo che è sufficiente dimostrare che se g è una funzione non-negativa in $L^p(Y)$ e h è una funzione non negativa in $L^{p'}(X)$ allora

$$\int_X \int_Y h(\mathbf{x}) k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) g(\mathbf{y}) d\nu(\mathbf{y}) d\mu(\mathbf{x}) \leq ab \|h\|_{p'} \|g\|_p.$$

Facendo uso di questa disuguaglianza e utilizzando ancora due volte la disuguaglianza di Hölder si completa la dimostrazione del test di Schur.

♡

Le dimostrazioni delle formule di interpolazione che daremo in seguito sono facilitate dall'uso di risultati classici di analisi complessa, che d'altra parte hanno un interesse intrinseco.

La strategia è di costruire uno spazio di Banach \mathcal{B} che abbia come sottospazi chiusi i due spazi di Banach \mathcal{B}_0 e \mathcal{B}_1 tra cui si vuole interpolare e come sottospazi chiusi anche spazi di Banach *interpolanti* \mathcal{B}_z , $z \in Y$, parametrizzati dai punti di un sottoinsieme $Y \subset C$ (tipicamente una striscia $z \in C$, $0 \leq \Re(z) \leq 1$).

Dalla definizione di questi spazi segue che le loro norme nella loro dipendenza da z sono analitiche nell'interno di C in un aperto e continue fino al bordo.

Questo permette di utilizzare teoremi e disuguaglianze di analisi complessa, un esempio dei quali è la disuguaglianza di Hadamard, conosciuta come *three-lines inequality*.

Essa è il prototipo di disuguaglianze per funzioni analitiche in una striscia $S \equiv \{z = x + iy, 0 < x < 1, y \in R\}$ (la cui chiusura indichiamo con \bar{S}).

12A.11 Disuguaglianza di HADAMARD

Sia f una funzione continua limitata in \bar{S} e analitica in S . Definiamo

$$M_x = \sup_{y \in R} |f(x + iy)|.$$

Allora si ha $\forall x \in [0, 1]$

$$M_x \leq M_0^x M_1^{1-x}. \quad 12A.11$$

◇

Dimostrazione

Scegliamo $N_0 > M_0$, $N_1 > M_1$ e poniamo $g(z) = N_0^{-x} N_1^{x-1} f(z)$.

Dimostriamo che $\forall z \in S$, $|g(z)| \leq 1$.

Da questo segue $|f(x + iy)| \leq N_0^x N_1^{1-x}$ e, poiché possiamo scegliere $N_0 - M_0$, $N_1 - M_1$ arbitrariamente piccoli, segue la tesi del teorema.

Per dimostrare $\forall z \in S$, $|g(z)| \leq 1$, usiamo il principio del massimo modulo per funzioni analitiche.

L'unica difficoltà sta nel controllo della funzione $g(z)$ per $|y| \rightarrow \infty$.

Questa difficoltà può essere aggirata studiando la funzione $h_\epsilon(z) = g(z)e^{\epsilon z^2}$.

Questa funzione tende a zero per $|y| \rightarrow \infty$ e quindi il massimo del suo modulo in \bar{S} deve essere raggiunto per y finito.

Dal principio del massimo modulo deduciamo che $|h_\epsilon(z)| \leq e^\epsilon$.

Poiché ϵ è arbitrario, ne segue $|g(z)| \leq 1$ per ogni valore di $z \in \bar{S}$.

♡

Prima di introdurre il teorema di interpolazione di Riesz-Thorin, uno dei teoremi più frequentemente utilizzati per le stime a-priori, diamo alcune definizioni.

Definizione 12A.12 (coppie compatibili)

Siano A_0 con norma $\|\cdot\|_{A_0}$ e A_1 con norma $\|\cdot\|_{A_1}$ sottospazi lineari di uno spazio di Banach $(V, \|\cdot\|_V)$; la coppia $(A_0, \|\cdot\|_{A_0})$, $(A_1, \|\cdot\|_{A_1})$ è detta *compatibile* se le applicazioni $(A_j, \|\cdot\|_{A_j}) \rightarrow (V, \|\cdot\|_V)$, $j = 1, 2$, sono continue.

Uno spazio di Banach $(A, \|\cdot\|_A)$ contenuto in $A_0 + A_1$ e che contiene $A_0 \cap A_1$ viene detto *spazio intermedio* se le immersioni

$$(A_0 \cap A_1, \|\cdot\|_{A_0 \cap A_1}) \rightarrow (A, \|\cdot\|_A) \rightarrow (A_0 + A_1, \|\cdot\|_{A_0 + A_1})$$

sono continue.

Ricordiamo che la topologia su $A_0 \cap A_1$ è definita da

$$\|a\|_{A_0 \cap A_1} \equiv \max(\|a\|_{A_0}, \|a\|_{A_1})$$

e quella su $A_0 + A_1$ è definita da

$$\|a\|_{A_0 + A_1} \equiv \min_{a=a_0+a_1, a_j \in A_j} (\|a\|_{A_0}, \|a\|_{A_1}).$$

◇

Nota 12A.1

È facile verificare che $(L^p, \|\cdot\|_p)$ e $(L^q, \|\cdot\|_q)$, con $1 \leq p, q \leq +\infty$, formano una coppia compatibile e $(L^r, \|\cdot\|_r)$, $r \in (p, q)$, è uno spazio intermedio.



Per applicare il lemma di Hadamard, consideriamo come funzioni di $z \in S$ le norme dei vari spazi che abbiamo introdotto.

Siano $(A_0, \|\cdot\|_0)$ e $(A_1, \|\cdot\|_1)$ una coppia compatibile e indichiamo con $B_0 = \{iy, y \in R\}$ e $B_1 = \{1 + iy, y \in R\}$ le due componenti della frontiera (dei "lati") della striscia S .

Indichiamo con $\mathcal{F}(A_0, A_1)$ lo spazio vettoriale complesso composto dalle funzioni $F(z)$ nella striscia chiusa \bar{S} che prendono valore in $A_0 + A_1$ e tali che

- 1) $F(z)$ è continua in \bar{S} ;
- 2) per ogni elemento Φ di $(A_0 + A_1)^*$ la funzione $\Phi(F(z))$ è analitica in S ;
- 3) $F(z)$ è un'applicazione *continua limitata* da B_j a A_j , $j = 0, 1$.

Lo spazio \mathcal{F} è uno spazio di Banach con norma

$$\|F\|_{\mathcal{F}(A_0, A_1)} = \max_{j=0,1} \left(\sup_{z \in B_j} \|F(z)\|_{A_j} \right).$$

Con queste notazioni, vale il teorema seguente

Proposizione 12A.12

Se $F \in \mathcal{F}(A_0, A_1)$ e $z \in S$ allora $\|F(z)\|_{A_0+A_1} \leq \|F\|_{\mathcal{F}}$.



Dimostrazione

Sappiamo che esiste un elemento $\Phi \in (A_0 + A_1)^*$ di norma uno per cui $\Phi(F(z)) = \|F(z)\|_{A_0+A_1}$.

Quindi $\Phi(F)$ soddisfa le condizioni per la validità della disuguaglianza di Hadamard, e ne segue $\Phi(F(z)) \leq \|F\|_{\mathcal{F}}$.



Denotiamo con $F_\theta(y)$ la restrizione di $F(z)$ alla retta $\Re(z) = \theta$.

Notiamo che $F_\theta(y)$, $0 < \theta < 1$, è un'applicazione continua (in y) da \mathcal{F} a $A_0 + A_1$.

Indichiamo la sua immagine con $A_\theta(y)$ e le diamo la norma quoziente

$$\|a\|_\theta = \inf \{ \|F\|_{\mathcal{F}} : F_\theta(y) = a(y) \}. \quad 12A.12$$

Con questa posizione $(A_\theta, \|\cdot\|_\theta)$ è uno *spazio intermedio*.

Con queste notazioni si ha

Teorema 12A.13

Siano (A_0, A_1) e (B_0, B_1) coppie compatibili e sia T un'applicazione lineare da $(A_0 + A_1)$ a $(B_0 + B_1)$ che applica A_j in B_j e, se $a \in A_j$, $j = 1, 2$, soddisfa $\|Ta\|_{B_j} \leq M_j \|a\|_{A_j}$.

Sia inoltre $0 < \theta < 1$.

Allora $T(A_\theta) \subset B_\theta$ e si ha per $a \in A_\theta$

$$\|T(a)\|_\theta \leq M_0^{1-\theta} M_1^\theta \|a\|_\theta. \quad 12A.13$$

◇

Dimostrazione

Sia a un elemento non nullo di A_θ e sia $\epsilon > 0$.

Esiste allora $F \in \mathcal{F}(A_0, A_1)$ tale che $F(\theta) = a$ e $\|T(a)\|_{B_\theta} < (1 + \epsilon) \|a\|_\theta$.

Per definizione allora la funzione $T(F(z))$ appartiene a $\mathcal{F}(B_0, B_1)$ e si ha

$$\|T(F(z))\|_{B_j} \leq (1 + \epsilon) M_j \|F(z)\|_{A_j}, \quad z \in L_j.$$

Ne segue che $T(a) = T(F(\theta)) \in B_\theta$.

Se poniamo $G(z) \equiv M_0^{z-1} M_1^{-z} T(F(z))$ allora $G \in \mathcal{F}(B_0, B_1)$ e $\|G(z)\|_{B_j} \leq \|F(z)\|_{A_j}$ per $z \in L_j$.

Ne segue

$$\|G(\theta)\|_\theta = M_0^{\theta-1} M_1^{-\theta} \|T(a)\|_\theta \leq (1 + \epsilon) M_j \|a\|_\theta.$$

Quindi $\|T(a)\|_\theta \leq M_0^{1-\theta} M_1^\theta \|a\|_\theta$. Siccome ϵ era arbitrio, il Teorema è dimostrato.

♡

Dopo questi preparativi, possiamo enunciare e dimostrare il teorema di Riesz-Thorin.

12A.14 Teorema di interpolazione di RIESZ-THORIN

Siano (Ω, Σ, μ) e (Ψ, Ξ, ν) spazi di misura. Sia $1 \leq p_0, p_1, q_0, q_1 \leq \infty$.

Sia T un'applicazione lineare da $L^{p_0}(\Omega, \Sigma, \mu) + L^{p_1}(\Omega, \Sigma, \mu)$ su $L^{q_0}(\Psi, \Xi, \nu) + L^{q_1}(\Psi, \Xi, \nu)$.

Supponiamo inoltre che T applichi $L^{p_j}(\Omega, \Sigma, \mu)$ in modo continuo su $L^{q_j}(\Psi, \Xi, \nu)$ con norme M_j , $j = 1, 2$.

Sia $0 < \theta < 1$ e definiamo $p(\theta)$ e $q(\theta)$ mediante

$$\frac{1}{p(\theta)} = \frac{1-\theta}{p_0} + \frac{\theta}{p_1}, \quad \frac{1}{q(\theta)} = \frac{1-\theta}{q_0} + \frac{\theta}{q_1}.$$

Allora T applica $L^p(\Omega, \Sigma, \mu)$ in modo continuo su $L^q(\Psi, \Xi, \nu)$ con norma al più uguale a $M_0^{1-\theta} M_1^\theta$.

◇

Dimostrazione

La tesi del teorema è certamente vera se $p_0 = p_1$. Se $p_0 \neq p_1$ poniamo, per $z \in \bar{S}$, $\frac{1}{p(z)} \equiv \frac{1-z}{p_0} + \frac{z}{p_1}$.

Notiamo che se $z \in L_j$ si ha $\Re\left(\frac{1}{p(z)}\right) = \frac{1}{p_j}$, $j = 1, 2$.

Consideriamo una partizione misurabile finita dell'insieme Ω in insiemi E_k e consideriamo la funzione semplice (somma di funzioni costanti su ciascun insieme E_k)

$$f = \sum_{k=1}^K r_k e^{i\alpha_k} \xi(E_k), \quad \|f\|_{p(\theta)} = 1,$$

dove $\xi(E_k)$ è la funzione indicatrice dell'insieme E_k e le costanti r_k sono scelte in modo tale che $\|f\|_{p(\theta)} = 1$.

Definiamo

$$F(z) = \sum_{k=1}^K r_k^{\frac{p(\theta)}{p(z)}} e^{i\alpha_k} \xi(E_k),$$

così da avere $F(\theta) = f$.

Se $z \in L_j$ si ha

$$|F(z)| = \sum_{k=1}^K r_k^{\frac{p(\theta)}{p_j}} \xi(E_k), \quad \|F(z)\|_{p_j} = \|f\|_{p_j}^{\frac{p(\theta)}{p_j}} = 1.$$

Pertanto la funzione F è analitica in S , continua in \bar{S} e limitata in \bar{S} nella topologia di $A_0 + A_1$.

Ne segue $\|f\|_{\theta} \leq 1$ e quindi $\|f\|_{\theta} \leq \|f\|_{p(\theta)}$ per ogni funzione semplice f . Questo risultato resta vero (per approssimazione continua) per ogni $f \in L^p(\Omega, \Sigma, \mu)$ e quindi

$$\|f\|_{\theta} \leq \|f\|_{p(\theta)}.$$

Dimostriamo ora che $\|f\|_{\theta} \geq \|f\|_{p(\theta)}$.

Facendo uso del teorema 12A.1 questo completerà la dimostrazione del teorema di interpolazione di Riesz-Thorin.

Utilizziamo la dualità tra L^p e $L^{p'}$. Sia f una funzione non nulla su $(A_0, A_1)_{\theta}$.

Se $\epsilon > 0$ esiste una funzione $F \in \mathcal{F}(A_0, A_1)$ tale che $F(\theta) = f$ e $\|F\|_{\mathcal{F}} \leq (1 + \epsilon)\|f\|_{\theta}$.

Poniamo $B_j = L^{p_j'(\theta)}$; allora (B_0, B_1) è una coppia compatibile, $L^{p'(\theta)}(\Omega, \Sigma, \mu) \subset (B_0, B_1)_{\theta}$ e inoltre $\|g\|_{\theta} \leq \|g\|_{p'(\theta)}$ per $g \in L^{p'(\theta)}(\Omega, \Sigma, \mu)$.

Se g è una funzione semplice, esiste $G \in \mathcal{F}(B_0, B_1)$ tale che $G(\theta) = g$ e inoltre $\|G\|_{\mathcal{F}} \leq (1 + \epsilon)\|g\|_{p'(\theta)}$.

Ponendo $I(z) = \int F(z)G(z)d\mu$ questa funzione risulta continua e limitata in \bar{S} e analitica in S . Inoltre, se $z \in L_j$, la disuguaglianza di Hölder dà

$$\begin{aligned} |I(z)| &\leq \int |F(z)||G(z)|d\mu \leq \|F(z)\|_{p_j(\theta)} \|G(z)\|_{p'_j(\theta)} \\ &\leq (1+\epsilon)^2 \|f\|_\theta \|g\|_\theta \leq (1+\epsilon)^2 \|f\|_\theta \|g\|_{p'(\theta)}. \end{aligned} \quad (12.2)$$

Dalla disuguaglianza di Hadamard deduciamo

$$|I(\theta)| = \left| \int gf \, d\mu \right| \leq (1+\epsilon)^2 \|f\|_\theta \|g\|_{p'}. \quad 12A.14$$

Questa disuguaglianza vale per ogni ϵ , se g appartiene ad un insieme denso di $L^{p'(\theta)}$, e quindi $f \in L^{p(\theta)}$.

Ne segue $f \in L^{p(\theta)}$ e $\|f\|_\theta = \|f\|_{p(\theta)}$.

♡

L'ultima disuguaglianza di cui diamo la dimostrazione è la disuguaglianza di Young.

Riguarda gruppi localmente compatti metrizzabili e la misura è la misura di Haar, unica a meno di scala. Nelle applicazioni che noi considereremo si tratta generalmente di R^d con la misura di Lebesgue o prodotti finiti di R^d , con la misura prodotto.

Gli stessi teoremi sono utili in altri casi, ad esempio per il gruppo Z^d con la misura di conteggio, o $Z_2 \equiv \{1, 0\}$ con regola di gruppo la addizione modulo due e $\mu(\{1\}) = \mu(\{-1\}) = \frac{1}{2}$.

12A.15 Diseguaglianza di YOUNG

Supponiamo che G sia un gruppo abeliano metrizzabile σ -compatto (è l'unione contabile di compatti), che $1 < p, q < \infty$ e che

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 + \frac{1}{r} > 1.$$

Denotiamo con $*$ il prodotto di convoluzione.

Se $g \in L^p(G)$, $f \in L^q(G)$ allora $f * g \in L^r(G)$ e si ha

$$\|f * g\|_r \leq \|f\|_q \|g\|_p. \quad 12A.15$$

◇

Dimostrazione

Se $f \in L^1(G) + L^{p'}(G)$, l'operazione $T_g : f \rightarrow f * g$ applica L^1 in L^p con norma $\leq \|g\|$.

Per dualità applica anche $L^{p'}$ in L^∞ con la stessa norma.

Prendendo $\theta = \frac{p}{q'} = \frac{q}{r}$

$$\frac{1-\theta}{1} + \frac{\theta}{p'} = \frac{1}{q}, \quad \frac{\theta}{p} + \frac{1-\theta}{\infty} = \frac{1}{q'}$$

e quindi si può utilizzare la formula di interpolazione di Riesz-Thorin con $p_0 = 1$, $p_1 = p'$, $q_0 = p$, $q_1 = \infty$.

♡

Diamo infine una collezione di disuguaglianze di uso frequente.

12A.16 Disuguaglianza di HÖLDER-YOUNG ([BL])

Siano $1 \leq p, q, r \leq \infty$, $p^{-1} + q^{-1} = 1 + r^{-1}$.

Allora

$$\|f * g\|_r \leq \|f\|_q \|g\|_p. \quad 12A.16$$

Inoltre si ha la stessa disuguaglianza se si considerano gli spazi L_w^p, L_w^r .

◇

Nota 12A.3

Ricordiamo qui ancora la definizione di spazio L_w^p (detto spazio *L^p debole*) e la sua topologia.

$$f \in L_w^p(M, \mu) \iff \exists c > 0 : \mu(\{\mathbf{x} : f(\mathbf{x}) > t\}) < c t^{-p}, \quad \forall t > 0,$$

$$\|f\|_p^w \equiv \sup_t [t^p \mu(\{f(\mathbf{x}) > t^{-1}\})^{-p}].$$

Notare che questa *non è una norma* perché non soddisfa la disuguaglianza triangolare.

Si ha $L^p \subset L_w^p$ con inclusione stretta se M non è una collezione finita di atomi.

Se $f \in L_w^p$ vale la disuguaglianza

$$\int_{|t| < N} \mu(\{\mathbf{x} : f(\mathbf{x}) > t\}) t^{p-1} dt \leq C \log N$$

per un'opportuna costante C .

♣

12A.17 Disuguaglianza di YOUNG 2

Siano $p, q, r \geq 1$ tali che $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} + \frac{1}{r} = 2$.

Denotiamo con p' l'esponente duale di p . Allora

$$\left| \int_{R^d} \int_{R^d} f(\mathbf{x}) g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) h(\mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \right| \leq C_p C_q C_r \|f\|_p \|g\|_q \|h\|_r, \quad 12A.17$$

dove

$$C_p^2 = \frac{p^{\frac{1}{p}}}{p'^{\frac{1}{p'}}}.$$

Notare che $C_p C_q C_r \leq 1$.

◇

Si può notare che per $s = \infty$ la disuguaglianza si riduce alla disuguaglianza di Hölder.

Se $p = r = 2$ si ottiene un'altra variante della disuguaglianza di Hölder.

12A.18 Disuguaglianza di HARDY-LITTLEWOOD-SOBOLEV

Siano $1 < p, r < \infty$, $0 < \lambda < d$ e sia $\frac{1}{p} + \frac{1}{r} + \frac{\lambda}{d} = 2$.

Allora vale la seguente disuguaglianza

$$\left| \int \int f(\mathbf{x}) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-\lambda} g(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x} d\mathbf{y} \right| \leq N_{p,r,\lambda} \|f\|_p \|g\|_r \quad 12A.18$$

dove $N_{p,r,\lambda}$ è una costante che per alcuni valori di p, r, λ può essere data esplicitamente.

Ad esempio nel caso $p = r = \frac{2d}{2d-\lambda}$ si ha

$$N_{p,r,\lambda} = \pi^{\frac{\lambda}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2} - \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(d - \frac{\lambda}{2}\right)} \left(\frac{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}{\Gamma(d)} \right)^{\frac{\lambda}{2}-1}$$

dove per $\alpha > 0$ la funzione Γ è definita da $\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty t^{\alpha-1} e^{-t} dt$.

◇

Una generalizzazione di quest'ultima disuguaglianza è la

12A.19 Disuguaglianza (debole) di YOUNG

$$\left| \int \int f(\mathbf{x}) h(\mathbf{x} - \mathbf{y}) g(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x} d\mathbf{y} \right| \leq N_{p,r,\lambda} \|f\|_p \|f\|_r \|h\|_q^\omega \quad 12A.19$$

dove abbiamo indicato con $\|g\|_q^\omega$ la norma debole

$$\|g\|_q^\omega = B_d^{-\frac{1}{q}} \sup_{\alpha > 0} \text{Vol}(\{\mathbf{x} \in R^d, \|h(\mathbf{x})\| > \alpha\})^{\frac{1}{q}}.$$

◇

Altre disuguaglianze coinvolgono la trasformata di Fourier o danno relazioni tra la norma di una funzione e del suo gradiente.

12A.20 Disuguaglianza di HAUSSDORF-YOUNG

Sia $p' \geq 2$. Allora

$$\|\hat{f}\|_p \leq (2\pi)^{\frac{d}{p'}} C_p^d \|f\|_{p'} \quad C_p^2 = p^{\frac{1}{p}} (p')^{-\frac{1}{p'}} \quad 12A.20$$

e l'eguaglianza vale se e sole se la funzione f è una gaussiana. Questa disuguaglianza dimostra che la trasformazione di Fourier è una trasformazione lineare continua da $L^{p'}(R^d)$ a $L^p(R^d)$.

◇

12A.21 Diseguaglianza di SOBOLEV GENERALIZZATA ([Ok71])

Sia $d \geq 3$, $0 \leq b \leq 1$, $p = \frac{2d}{2b+2d-2}$.

Allora

$$K_{n,p} \|\nabla f\|_2 \geq \| |\mathbf{x}|^{-b} f \|_p, \quad 12A.21$$

dove

$$K_{n,p} = \omega_{d-1}^{-\frac{1}{2r}} (d-2)^{\frac{1}{2r-1}} \left(\frac{r-1}{r} \right)^{\frac{r-1}{2r}} \left(\frac{\gamma(2r)}{\Gamma(r+1)\Gamma(r)} \right)^{\frac{1}{2r}},$$

$$r = \frac{p}{p-2} = \frac{d}{2(1-b)}, \quad \omega_{d-1} = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$$

(se $b = 0$ si ha $p = \frac{2d}{d-2} \equiv d^*$).

Se $1 - d/2 \leq b < 0$ la disuguaglianza vale per funzioni della variabile radiale $|\mathbf{x}|$.

◇

La disuguaglianza di Sobolev generalizzata può essere dedotta ([L83]) dalla seguente disuguaglianza di Sobolev in R

$$\|f'\|_2^2 + \|f\|_2^2 \geq M_p^{-1} \|f\|_p^2, \quad M_p = 2^{\frac{1}{r}-2} \left(\frac{r-1}{r} \right)^{\frac{r-1}{r}} \left(\frac{\Gamma(2r)}{\Gamma(r)\Gamma(r+1)} \right)^{\frac{1}{r}} \quad 12A.22$$

dove $r = \frac{p}{p-2}$.

12A.23 Diseguaglianza di NASH

$$u \in H^1 \cap L^1(R^d) \implies \|u\|_2^{2+1/d} \leq C_d \|\nabla u\|_2 \|u\|_2^{2/d}. \quad 12A.25$$

◇

12A.24 Diseguaglianza di SOBOLEV LOGARITMICA

Se $u \in H^1(R^d)$, esiste una costante $a > 0$ indipendente da N tale che

$$\frac{a^2}{\pi} \int |\nabla u|^2 d\mathbf{x} \geq \int |u(\mathbf{x})|^2 \log \left(\frac{|u(\mathbf{x})|^2}{\|u\|_2^2} \right) d\mathbf{x} + C(1 + \log a) \|u\|_2^2. \quad 12A.26$$

◇

Prima di ulteriori disuguaglianze introduciamo alcune altre notazioni.

Definizione 12A.3 (spazi $W^{1,p}$)

Sia Ω un aperto regolare di R^d . Definiamo

$$W^{1,p}(\Omega) \equiv \left\{ u \in L^p(\Omega), \exists g_1, \dots, g_N \in L^p(R^d), \int u \frac{\partial \phi}{\partial x_k} = - \int g_k \phi, \forall \phi \in C_0^\infty(\Omega) \right\}$$

dove C_0^∞ è lo spazio delle funzioni di classe C^∞ che si annullano in un intorno del bordo $\partial\Omega$ (o al di fuori di un compatto se Ω è illimitato).

◇

Si può dimostrare che $W^{1,p}(\Omega)$ è uno spazio riflessivo per $1 < p < \infty$, che è uno spazio di Banach per $1 \leq p \leq \infty$ e che è separabile per $0 \leq p < \infty$.

Sia $\|u\|_{1,p}$ la norma di u come elemento dello spazio di Banach $W^{1,p}(\Omega)$. Allora si ha

$$\|u\|_{1,p} = \|u\|_p + \sum_k \left\| \frac{\partial u}{\partial x_k} \right\|_p$$

dove le derivate sono intese nel senso delle distribuzioni.

Notiamo che si usa spesso la notazione $H^1(\Omega) \equiv W^{1,p}(\Omega)$.

Se Ω è limitato, valgono inoltre le inclusioni compatte seguenti

i)

$W^{1,p}(\Omega)$ è immerso in modo continuo e compatto in $L^q(\Omega)$ per ogni $q \in [d, \infty)$;

ii)

Se $q \in [p, p^*]$ allora $W^{1,p}(\Omega) \subset L^q(\Omega)$;

iii)

$$p < d \implies W^{1,p}(\Omega) \subset_c L^q(\Omega), \quad \forall q \in [1, p^*];$$

iv)

$$p = d \implies W^{1,p}(\Omega) \subset_c L^q(\Omega), \quad \forall q \in [1, \infty);$$

v)

$$p > d \implies W^{1,p}(\Omega) \subset_c C(\bar{\Omega});$$

vi)

Se $\Omega \subset R$ ed è limitato, si ha inoltre

$$W^{1,p}(\Omega) \subset_c L^q(\Omega), \quad 1 \leq q < \infty.$$

Negli spazi $W^{1,p}$ valgono le seguenti disuguaglianze

12A.22 *Disuguaglianza di SOBOLEV-GAGLIARDO-NIRENBERG*

Per un aperto $\Omega \subset R^d$ vale

$$W^{1,p}(\Omega) \subset L^{p^*}(\Omega), \quad \frac{1}{p^*} \equiv \frac{1}{p} - \frac{1}{d}$$

con

$$\|u\|_{p^*} \leq C(d,p) \|\nabla u\|_p.$$

◇

Notare che l'esponente p^* è naturale come si vede ponendo $u_\lambda(\mathbf{x}) \equiv u(\lambda\mathbf{x})$.

◇

12A.26 Disuguaglianza di MORREY

Se $p > d$ si ha $W^{1,p}(\Omega) \subset L^\infty(\Omega)$ e inoltre

$$|u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{y})| \leq C(p,d) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^\alpha \|\nabla u\|_p, \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in R^d, \quad \alpha = 1 - \frac{d}{p}. \quad 12A.28$$

◇

Se Ω è compatto valgono inoltre le seguenti disuguaglianze.

12A.27 Disuguaglianza di POINCARÈ

Se $u \in W_0^{1,p}(\Omega)$, $1 \leq p < \infty$, si ha $\|u\|_p \leq C \|\nabla u\|_p$.

◇

Per concludere richiamiamo una disuguaglianza che abbiamo già presentato e utilizzato nei Capitoli 7 e 10.

12A.28 Disuguaglianza di HARDY

Se $\phi \in L^2(R^3)$ si ha

$$\int_{R^3} \frac{1}{4|\mathbf{x}|^2} |\phi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \leq \int_{R^3} |\nabla \phi|^2 d\mathbf{x}. \quad 12A.27$$

Equivalentemente

$$(\phi, |\mathbf{p}|^2 \phi) \geq \left(\phi, \frac{1}{4|\mathbf{x}|^2} \phi \right). \quad 12A.28$$

◇

La disuguaglianza di Hardy può essere generalizzata al caso in cui sia presente un campo magnetico.

Questa generalizzazione è utilizzata per provvedere stime a-priori utili nello studio delle proprietà dei solidi cristallini in un campo magnetico.

12A.29 Disuguaglianza di HARDY MAGNETICA

Se $d \geq 3$, si ha

$$\int \frac{|f(\mathbf{x})|^2}{|\mathbf{x}|^2} d\mathbf{x} \leq \frac{4}{(d-2)^2} \int |\nabla_A f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}, \quad (\nabla_A f)(\mathbf{x}) \equiv (\nabla + ieA(\mathbf{x}))f(\mathbf{x}),$$

12A.29

quando tutti e due i termini sono definiti.

◇

Dimostrazione

Se $f \in C^\infty$ e $\alpha \in R^+$ si ha

$$0 \leq \int \left| \nabla_A f + \alpha \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|^2} f \right|^2 = \int |\nabla_A f|^2 + \alpha^2 \int \frac{|f|^2}{|\mathbf{x}|^2} d\mathbf{x} + 2\alpha \Re \left[\int \bar{f}(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{x} \cdot \nabla_A f}{|\mathbf{x}|^2} d\mathbf{x} \right].$$

Utilizzando la regola di Leibnitz

$$2\alpha \Re \left[\int \bar{f}(\mathbf{x}) \frac{\mathbf{x} \cdot \nabla_A f}{|\mathbf{x}|^2} d\mathbf{x} \right] = -\alpha \int |f(\mathbf{x})|^2 \operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|^2} \right) d\mathbf{x} = -(d-2)\alpha \int \frac{|f(\mathbf{x})|^2}{|\mathbf{x}|^2} d\mathbf{x}.$$

Allora

$$\int |\nabla_A f(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} \geq [-\alpha^2 + (d-2)\alpha] \int \frac{|f(\mathbf{x})|^2}{|\mathbf{x}|^2} d\mathbf{x}.$$

Notare che se $d \geq 3$ si ha

$$\max_{\alpha \in R^+} [-\alpha^2 + (d-2)\alpha] = \frac{(d-2)^2}{4}.$$

Questo dimostra l'asserto se $f \in C^\infty$. La dimostrazione negli altri casi in cui i due termini della disuguaglianza so entrambi definiti viene fatta con un argomento di densità.

♡

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

[B75] W. Beckner, *Inequalities* Ann. of Mathematics 102 (1975) 159-182.

[BJS64] L. Bers, J.Schechter, *Partial differential equations*, AMS 1964

[BL76] H. J. Brascamp, E. Lieb, Adv. in Math 20 (1976) 151-173.

[G07] D.J.H. Garling, *Inequalities*, Cambridge Uni. Press 2007

[L83] E.Lieb, *Ann. of Math.* 118 (1983) 349-374.

[Ok71] G. Okikiolu, *Aspects of the theory in L^p -spaces*, Academic Press 1971

CAPITOLO 13
POTENZIALI PERIODICI. CELLE DI WIGNER-SEITZ E
DI BRILLOUIN . FUNZIONI DI BLOCH E DI WANNIER.
CAMPI ELETTROMAGNETICI DEBOLI.

In questo capitolo diamo qualche elemento della teoria dell'equazione Schrödinger con potenziali periodici. Questa teoria è di grande interesse in Fisica della Materia, perché riguarda la fisica dei solidi cristallini e delle loro interazioni con campi elettromagnetici esterni.

I dati sperimentali indicano che in buona approssimazione i nuclei nella materia cristallina possono essere considerati puntiformi e sono collocati in punti fissi di una cella di un reticolo in R^3 (reticolo cristallino); la loro posizione e la struttura della cella dipendono dal materiale considerato.

Questo va interpretato nel senso seguente. Essendo la massa dei nuclei molto maggiore della massa dell'elettrone essi *si muovono* più lentamente e le loro funzioni d'onda sono molto più localizzate nello spazio di quelle degli elettroni. Convienne, in una prima approssimazione, riguardare i nuclei come oggetti puntiformi fissi.

I dati sperimentali suggeriscono che, in questa approssimazione e a temperature non troppo elevate, i punti in cui sono localizzati i nuclei costituiscono un reticolo cristallino.

Non esiste finora una teoria completa che renda conto di questo fenomeno, sebbene alcuni tentativi siano stati fatti per riportarlo alla configurazione d'equilibrio di un sistema di molti atomi interagenti tra di loro e con gli elettroni attraverso forze di natura coulombiana.

In questo capitolo iniziamo considerando l'approssimazione in cui i nuclei atomici siano localizzati nei punti di un reticolo regolare; la configurazione periodica permette di definire una *cella elementare* (cella di Wigner-Seitz).

Per semplicità assumeremo che l'interazione tra nucleo ed elettroni e tra gli elettroni sia indipendente dallo spin. Questo implica che la presenza dello spin produce solamente per ciascun elettrone un raddoppiamento degli stati del sistema.

Assumeremo inoltre che l'interazione tra gli elettroni sia trascurabile e trascurabili siano anche le interazioni con il campo elettromagnetico (quantizzato) prodotto dai nuclei e dagli elettroni.

Sotto queste restrittive ipotesi, gli elettroni sono descritti da un'equazione di Schrödinger con potenziale periodico che descrive l'interazione del singolo elet-

trone con il reticolo dei nuclei ed eventualmente con un campo elettromagnetico esterno.

Approssimazioni più fini possono essere considerate, che tengano conto dell'interazione tra gli elettroni e della dinamica dei nuclei. In particolare possiamo notare che la massa dei nuclei è molto maggiore di quella degli elettroni ma non è infinita.

Quindi la funzione d'onda dei nuclei non è concentrata in un punto e i nuclei hanno una dinamica non banale, ma il moto dei nuclei è percepibile solo in una scala di tempi molto più lunga di quella in cui descriviamo il moto degli elettroni.

La variazione della funzione d'onda dei nuclei (e la conseguente variazione del potenziale a cui sono soggetti gli elettroni) potrà essere quindi considerata *adiabatica* .

Indicheremo brevemente in conclusione di questo capitolo i rudimenti di questa *approssimazione adiabatica* o *multiscala* che in questo contesto viene indicata con il nome di *approssimazione di Born-Oppenheimer* .

Notiamo che gli elettroni sono particelle tra loro identiche che soddisfano la statistica di Fermi, e quindi la funzione d'onda di un sistema di N elettroni in R^3 è una funzione a quadrato sommabile $\phi(x_1, \sigma_1; \dots; x_N, \sigma_N)$, $x_k \in R^3$ $\sigma_k = 1, 2$, antisimmetrica rispetto a trasposizione di indici (l'indice σ_k è l'indice di spin che per l'elettrone può avere i valori 1 e 2).

Nell'approssimazione che consideriamo la funzione d'onda del singolo elettrone è descritta da un'equazione di Schrödinger in un potenziale esterno V_{per} . Per trattare un sistema di N elettroni non interagenti tra loro dobbiamo tener conto della proprietà di antisimmetria della funzione d'onda complessiva.

Poiché vorremo trattare il caso di un cristallo macroscopico, il numero di atomi (e quindi di elettroni) è molto grande e la funzione d'onda degli elettroni deve essere antisimmetrizzata rispetto ad un numero molto grande di variabili.

Per evitare una trattazione che risenta eccessivamente delle specifiche dimensioni del solido cristallino che esaminiamo e quindi della forma del suo bordo a livello microscopico, conviene prendere il *limite termodinamico* che qui intendiamo nel senso di limite di volume infinito a densità costante .

In questo limite il numero di elettroni del sistema è infinito, e quindi una formulazione in termini di funzione d'onda degli elettroni del sistema non è più praticabile.

Una possibile soluzione consiste in una descrizione più algebrica in termini di osservabili, che abbiamo visto essere praticabile anche in un sistema con infiniti gradi di libertà, attraverso un formalismo di seconda quantizzazione.

Se siamo interessati alle proprietà dello stato di equilibrio del sistema, che assumiamo essere lo stato di energia minima, possiamo seguire una strategia alternativa, che utilizza le funzioni d'onda (generalizzate) del sistema in un potenziale periodico.

Consideriamo N_{el} elettroni soggetti ad un potenziale periodico V_{per} ; supponiamo che il reticolo di periodicità sia generato dai vettori η_1, \dots, η_d applicati all'origine delle coordinate. Indichiamo con Ω la cella elementare.

Supponiamo che l'interazione con i nuclei non dipenda dallo spin degli elettroni. Consideriamo un cubo $K_N \subset R^d$ di lati $N\eta_k$ centrato nell'origine.

Sia v_N il volume di questo cubo e indichiamo ρv_N il numero di elettroni in esso contenuti. La densità degli elettroni sarà dunque $\rho_N = N_{el}/v_N$ dove N_{el} è il numero di elettroni.

E' facile verificare che lo spettro di $-\Delta + V_{per}$ con condizioni periodiche al bordo ∂K_N è puntuale, con autovalori $\lambda_n(K_N) \leq \lambda_{n+1}(K_N)$ e corrispondenti autostati $\{\phi_n(K_N)\}$.

Poiché gli elettroni hanno spin $\frac{1}{2}$ e l'interazione non dipende dallo spin, gli autovalori $\lambda_{2n-1}(K_N)$ ed $\lambda_{2n}(K_N)$ coincidono.

Per un sistema di elettroni non interagenti l'energia minima è quindi $E_{K_N}(E_{el}) = \sum_{n=1}^{2N_{el}} \lambda_n(K_N)$. A questa energia corrisponde lo stato puro descritto dal determinante di Slater delle prime $2N_{el}$ autofunzioni (ordinate secondo l'ordine dei corrispondenti autovalori).

Chiamiamo E_{K_N} energia di Fermi degli elettroni in questo stato.

Assumiamo che la densità $\rho_N \equiv \frac{N_{el}}{vol(K_N)}$ abbia un limite ρ quando $N \rightarrow \infty$.

Sotto condizioni molto generali si dimostra che esistono i limiti

$$\bar{E} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_{K_N}(N_{el})}{vol(K_N)} \quad E_F = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_N(N_{el})}{N_{el}} = \rho \bar{E}.$$

Chiameremo E_F potenziale di Fermi del sistema infinito.

La dimostrazione, che qui non daremo, utilizza, come nella dimostrazione dell'esistenza del limite termodinamico in meccanica statistica, tecniche di disaccoppiamento di regioni dello spazio e inoltre il fatto che per ogni regione finita regolare Ω gli autovalori corrispondenti a una generica condizione al bordo sono compresi tra i corrispondenti autovalori con condizioni Neumann e di Dirichlet al bordo $\partial\Omega$.

La dimostrazione richiede che le successioni di regioni considerate Ω_N invadano R^d a condizione che contengano cubi di lato che cresce indefinitamente (condizione di van Hove).

Nel caso $V = 0$ l'equazione di Schrödinger si risolve per separazione di variabili e la distribuzione degli autovalori converge debolmente (nel senso delle misure) ad una misura che è assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue.

Questo risultato si estende al caso di potenziali periodici sufficientemente regolari.

Per potenziali periodici sufficientemente regolari lo spettro di energia nella successione K_N con condizione di Neumann al bordo per $N \rightarrow \infty$ tende a coincidere con lo spettro (continuo) σ_{per} di $-\Delta + V_{\text{per}}$ definito su R^d .

Per questo sistema lo spettro σ_{per} è in generale assolutamente continuo e costituito da bande.

In $d = 1$ le bande non si sovrappongono e hanno molteplicità spettrale due.

Ad esempio, in una dimensione, se la cella elementare del reticolo è $[-\pi, \pi]$ e la hamiltoniana è $-\frac{d^2}{dx^2}$ con condizioni periodiche al bordo, gli autovalori sono $\lambda_n = n^2$ e hanno molteplicità due (tranne l'autovalore 0).

In $[-\pi N, \pi N]$ gli autovalori di $-\Delta$ con condizioni periodiche al bordo sono $\lambda_n(N) = \left[\frac{n}{N}\right]^2$.

Lo stato fondamentale di un sistema di N elettroni è rappresentato dal determinante di Slater delle prime N autofunzioni; l'autofunzione di energia massima corrisponde ad energia $F(N) = \left(\frac{N-1}{2N}\right)^2$ (livello di Fermi).

In questo caso, che corrisponde a scegliere $\rho = 1$, si ha $\lim_{N \rightarrow \infty} F(N) = \frac{1}{4}$.

Indicheremo questo numero come *livello di Fermi* del sistema limite.

E' facile vedere in questo caso che lo spettro $\sigma(N)$ tende a coprire in modo omogeneo la semiretta $[0, \infty)$ e quindi tende a coincidere (compresa la molteplicità) con lo spettro di $-\frac{d^2}{dx^2}$ definito sull'intero asse reale.

Questo è un caso particolarmente semplice perché l'equazione di Schrödinger libera può essere risolta per separazione di variabili.

In $d \geq 2$ la molteplicità spettrale non è in generale costante all'interno di una singola banda.

Le autofunzioni ψ del sistema K_N assumono, al bordo di facce opposte del cubo elementare, valori che differiscono di $\phi = \frac{2\pi}{N}k$ dove k dipende da ψ .

Dunque al variare di N una generica autofunzione, ristretta alla cella elementare, corrisponde a condizioni al bordo quasi arbitrarie.

Questa considerazione semi-euristica che abbiamo fatto per il caso $V = 0$ porta a *postulare* che quando N è molto grande il sistema nel caso generale sia ben descritto dalla teoria di Bloch-Floquet per potenziali periodici.

Questo è il motivo per il quale *nel caso di elettroni non interagenti tra loro* lo studio del cristallo infinito viene sostituito con lo studio dell'equazione di Schrödinger con un potenziale periodico.

In particolare ci si aspetta che la teoria di Bloch-Floquet che descriveremo nel seguito dia risultati corretti per quanto riguarda le proprietà di interesse per il sistema macroscopico in esame, sia estensive che intensive, quali conducibilità elettrica e polarizzabilità, e dia una spiegazione di alcuni effetti importanti, quali l'effetto Hall quantistico.

D'altra parte le considerazioni, in gran parte euristiche, connesse con il limite termodinamico sono utilizzate per scegliere i parametri che compaiono nella formulazione di Bloch-Floquet.

Ad esempio nel caso del solido cristallino si fa l'ipotesi che il sistema totale *sia neutro*, cioè che per il sistema ristretto al cubo di lato L la carica degli elettroni presenti sia tale da bilanciare esattamente la carica dei nuclei.

Questo fissa il numero N di elettroni nel sistema e quindi $\rho \equiv \frac{N_{\text{el}}}{L^3}$, la *densità degli elettroni*.

Quando viene preso il limite $L \rightarrow \infty$ la densità ρ viene mantenuta costante.

La scelta del valore numerico per il potenziale di Fermi è un altro esempio di utilizzazione del limite termodinamico per la scelta dei parametri.

13.1 LA TEORIA DI BLOCH-FLOQUET

In questo capitolo considereremo preliminarmente l'equazione di Schrödinger per un singolo elettrone in un potenziale periodico trascurando lo spin; daremo quindi alcuni dettagli della teoria di Bloch-Floquet.

Poiché trascuriamo le interazioni tra elettroni, la generica soluzione dell'equazione Schrödinger per un sistema di N elettroni sarà il prodotto antisimmetrizzato di soluzioni dell'equazione di Schrödinger per il singolo elettrone.

Consideriamo dunque l'equazione di Schrödinger, scritta in opportune unità di misura

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Delta \phi(x, t) + V_{\text{per}}(x) \phi(x, t), \quad x \in R^d$$

dove il potenziale $V_{\text{per}}(x)$ è *periodico*, esiste cioè una base $\{a_i \in R^d\}$, $i = 1, \dots, d$, per la quale vale

$$V_{\text{per}}(x + a_i) = V(x) \quad \forall a_i \quad 13.1$$

Per *base* intendiamo una collezione di vettori indipendenti non nulli tali che ogni elemento x di R^d possa essere scritto come

$$x = \sum_i x_i a_i, \quad x_i \in R.$$

Intenderemo sempre che la base è *minimale*, nel senso che non esiste una base b_i per la quale il potenziale è periodico e per qualche valore dell'indice i vale $a_i = n_i b_i$, $n_i > 1$.

Chiameremo *cella elementare di tassellazione* la cella individuata in R^d dall'origine e dai vettori a_i . Ogni base individua un *reticolo*; con questo termine indichiamo un sottoinsieme Γ di R^d che abbia le seguenti proprietà:

- 1) Γ non ha punti di accumulazione
- 2) Γ è un sottogruppo additivo di R^d .

Una base minimale *non viene individuata univocamente dal reticolo*.
Resta individuata tuttavia una cella elementare \mathcal{W} chiamata cella di Wigner-Seitz (associata al reticolo Γ) e definita nel modo seguente

$$\mathcal{W} \equiv \{x \in R^d : d(x, 0) < d(x, y), \forall y \in \Gamma \setminus \{0\}\} \quad 13.2$$

($d(x, y)$ è la distanza tra i due punti x ed y).
La cella di Wigner-Seitz è in generale un poliedro.

Definiamo anche il *reticolo duale*

$$\Gamma^* \equiv \{k \in R^d : k \cdot a \in 2\pi Z \quad \forall a \in \Gamma\} \quad 13.3$$

{dove, limitatamente a questo capitolo, il simbolo $k \cdot a$ indica il prodotto scalare $(k, a) = \sum_{i=1}^d k_i a_i$. La cella di Wigner-Seitz *del reticolo duale* viene detta *zona di Brillouin* ed è anch'essa univocamente definita. La indicheremo con il simbolo \mathcal{B} .

Nello studio dei potenziali periodici è conveniente considerare lo spazio $L^2(R^d)$ come somma diretta infinita di spazi di Hilbert isomorfi a $L^2(\mathcal{W})$.

Ogni funzione $\phi(x) \in L^2(R^n)$ è infatti equivalente (come elemento in $L^2(R^d)$) alla collezione delle sue restrizioni alle traslate della cella elementare per i vettori del reticolo.

Questo suggerisce di utilizzare un formalismo (di Bloch-Floquet) in cui la somma diretta viene sostituita con un integrale diretto sulla cella duale, nello stesso modo con cui la trasformata di Fourier provvede un isomorfismo tra ℓ^2 e $L^2((0, 2\pi))$.

La dualità sostituisce la somma diretta di spazi di Hilbert isomorfi a $L^2(\mathcal{W})$ con l'integrale diretto dello spazio di Hilbert $L^2(\mathcal{W})$, ossia $L^2(\mathcal{B}, L^2(\mathcal{W}))$.

Questo porta a considerare lo spazio

$$\mathcal{H} = \int_{\mathcal{W}}^{\oplus} L^2(\mathcal{B}) d\mu = \int_{\mathcal{B}}^{\oplus} L^2(\mathcal{W}) d\mu \quad 13.4$$

dove μ è la misura di Lebesgue.

Notiamo che se un operatore autoaggiunto H su \mathcal{H} commuta con un gruppo di operatori unitari $\{U(g)\}$ che realizzano una rappresentazione continua U_G di un gruppo di Lie G (se H è illimitato questo significa che U_G commuta con ogni proiezione spettrale di H) si può scrivere \mathcal{H} come integrale diretto sullo spettro σ di un insieme massimale commutativo dei generatori di U_G di spazi di Hilbert \mathcal{K}_s , $s \in \sigma$, tutti isomorfi ad uno stesso spazio di Hilbert \mathcal{K}

$$\mathcal{H} = \int_{\sigma}^{\oplus} \mathcal{K}_s d\mu$$

dove μ è la misura di Haar sul gruppo.

In questa decomposizione risulta

$$H = \int_{\sigma} H_s d\mu, \quad H_s = K$$

dove K è un operatore autoaggiunto su \mathcal{K} .

Anche se l'operatore non è limitato questa decomposizione ha luogo, poiché abbiamo assunto che U_G commuta con le proiezioni spettrali dell'operatore H . L'interesse negli *integrali continui* indicati in (13.4) sta nei seguenti Teoremi. Premettiamo una definizione

Definizione 13.1

Un operatore limitato A su $\mathcal{H} \equiv \int_M^{\oplus} \mathcal{K}_m d\mu$ è detto essere *decomponibile* (per la decomposizione dello spazio in integrale diretto) se esiste una funzione $A(m)$ a valore operatori in $L^{\infty}(M, d\mu; \mathcal{B}(\mathcal{K}_m))$ tale che per ogni $\phi \in \mathcal{H}$ vale

$$(A\phi)(m) = A(m)\phi(m). \quad 13.5$$

In questo caso scriviamo $A = \int_M^{\oplus} A(m) d\mu(m)$. Gli operatori $A(m)$ vengono detti *le fibre* di A .



Reciprocamente ad ogni funzione $A(m) \in L^{\infty}(M, d\mu; \mathcal{B}(\mathcal{K}_m))$ è associato un unico operatore $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ tale che valga (13.5).

Questo provvede un isomorfismo isometrico tra $L^{\infty}(M, d\mu; \mathcal{B}(\mathcal{K}_m))$ e $\mathcal{B}(\int_M^{\oplus} \mathcal{K}_m d\mu)$. Si può dimostrare che gli operatori decomponibili sono caratterizzati dalla proprietà di commutare con tutti gli operatori decomponibili che su ciascuna fibra agiscono come un multiplo dell'identità.

Poiché gli operatori che introdurremo su ogni fibra sono autoaggiunti ma non limitati in generale, estendiamo la definizione di decomponibilità al caso di operatori autoaggiunti non limitati.

Definizione 13.2

Su uno spazio di misura separabile regolare (M, μ) una funzione A a valori operatori autoaggiunti su uno spazio di Hilbert \mathcal{K}_m verrà detta *misurabile* se e solo se è misurabile la funzione $(A + iT)^{-1}$.

Data una tale funzione, definiamo un operatore A su $\mathcal{H} = \int_M^{\oplus} \mathcal{K}_m d\mu$ con dominio

$$D(A) \equiv \left\{ \phi \in \mathcal{H} : \phi(m) \in D(A(m)) \text{ q.o., } \int_M \|A(m)\phi(m)\|_{\mathcal{K}_m}^2 d\mu < \infty \right\} \quad 13.6$$

ponendo $(A\phi)(m) = A(m)\phi(m)$.

Abbiamo utilizzato in (13.6) la notazione q.o. (quasi ovunque) per indicare che la (13.6) vale per un insieme di m di misura piena in M . Nel seguito, ometteremo questa precisazione.

Utilizzeremo la notazione $A = \int_M^\oplus A(m)d\mu$.

♣

Le proprietà degli operatori decomponibili sono riassunte dal seguente Teorema.

Teorema 13.1

Sia $A = \int_M^\oplus A(m)d\mu$ dove $m \mapsto A(m)$ è μ -misurabile e $A(m)$ è autoaggiunto per (quasi) ogni m .

Allora valgono le seguenti affermazioni

a)

L'operatore A è autoaggiunto.

b)

Un operatore autoaggiunto su \mathcal{H} ha la forma $\int_M^\oplus A(m)d\mu$ se e solo se $(A + iI)^{-1}$ è un operatore limitato decomponibile.

c)

Per ogni funzione di Borel limitata F su R si ha

$$F(A) = \int_M^\oplus F(A(m))d\mu. \tag{13.7}$$

d)

λ è nello spettro di A se e solo se per ogni $\epsilon > 0$ è maggiore di zero la misura dell'insieme $\{m \in M : \sigma(A(m)) \cap (\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon) \neq \emptyset\}$.

e)

λ è un autovalore di A se e solo se è maggiore di zero la misura dell'insieme dei valori di m per i quali λ è un autovalore di $A(m)$.

f)

Se ciascun $A(m)$ ha spettro assolutamente continuo, anche A ha spettro assolutamente continuo.

g)

Supponiamo che B sia rappresentabile come $B = \int_M^\oplus B(m)d\mu$ con $B(m)$ autoaggiunto.

Se B è limitato rispetto ad A con parametro di limite a , allora ciascun $B(m)$ è limitato rispetto a $A(m)$ e il parametro di limite $a(m)$ soddisfa $a(m) \leq a$.

Se $a < 1$ allora $A + B$ definito come

$$\int_M^\oplus [A(m) + B(m)]d\mu \tag{13.8}$$

è essenzialmente autoaggiunto su $D(A)$.

◇

Per la dimostrazione di questo teorema rimandiamo a [RS72].

Notiamo solo che la parte f) del teorema 13.1 afferma che condizione *sufficiente* perché A abbia spettro assolutamente continuo è che ciascun operatore $A(m)$ abbia spettro assolutamente continuo. Questa condizione è *lungi dall'essere necessaria* come dimostra il seguente Teorema.

Teorema 13.2

Sia $M = [0, 1]$ e μ la misura di Lebesgue. Sia $\mathcal{H} = \int_{[0,1]} \mathcal{H}_m d\mu$ dove \mathcal{H}_m per ogni m è uno spazio infinito-dimensionale separabile e sia $A = \int_{[0,1]} A(m) d\mu$ con $A(m)$ autoaggiunto per ogni m .

Supponiamo che

1)

per ciascun valore di m lo spettro di $A(m)$ sia puntuale con una base completa di autovettori $\{\phi_n(m), n = 1, 2, \dots\}$ e autovalori $E_n(m)$

2)

per nessun valore di n la funzione $E_n(m)$ sia costante, che ciascuna funzione $\phi_n(m)$ sia reale analitica (come funzione di m) in $(0,1)$ e continua in $[0,1]$

3)

per ciascun valore di n la funzione $E_n(m)$ sia analitica in m in un intorno di $[0,1]$.

Allora l'operatore A ha spettro assolutamente continuo.

◇

Dimostrazione

Sia

$$\mathcal{H}_n = \{\phi \in \mathcal{H}, \phi(m) = f(m) \phi_n(m)\} \quad f \in L^2(M, d\mu)$$

Gli spazi \mathcal{H}_n sono mutuamente ortogonali per diversi valori dell'indice n .

Inoltre si ha $\mathcal{H} = \oplus \mathcal{H}_n$ e $\mathcal{H}_n \subset D(A)$ e $A\mathcal{H}_n \subset \mathcal{H}_n$.

Questo permette di definire un operatore A_n che agisce in \mathcal{H}_n .

Consideriamo l'applicazione unitaria che per ogni n diagonalizza A_n ; si ha

$$\tilde{A}_n = U_n A_n U_n^{-1} \quad (\tilde{A}_n f)(m) = E_n(m) f(m) \quad f \in L^2([0, 1], dm) \quad 13.9$$

Dimostriamo che ciascun A_n ha spettro assolutamente continuo.

Poiché $E(m)$ è analitica in un intorno di $(0, 1)$ e non è costante, la sua derivata $\frac{dE_n}{dm}$ ha al più un numero finito di zeri, per il teorema di Weierstrass.

Indichiamo questi zeri con m_1, \dots, m_{N-1} e poniamo $m_0 = 0$ $m_N = 1$. Si ha

$$L^2[0, 1] = \oplus_1^N L^2(m_{j-1}, m_j).$$

L'operatore A_n lascia invariante ciascun sommando e vi agisce come indicato in (13.9).

Su ciascun intervallo E_n è strettamente monotona e differenziabile.

Su ciascun intervallo quindi si può definire la funzione differenziabile α mediante $E_n(\alpha(\lambda)) = \lambda$ e risulta

$$d\alpha = \left(\frac{dE_n(m)}{dm} \right)^{-1} d\lambda, \quad m = \alpha(\lambda)$$

Se definiamo l'operatore unitario U su $L^2((m_{j-1}, m_j))$ mediante $(Uf)(\lambda) = \sqrt{\frac{d\alpha}{d\lambda}} f(\alpha(\lambda))$ otteniamo

$$UA_nU^{-1}g(\lambda) = \lambda g(\lambda)$$

Abbiamo costruito così una rappresentazione spettrale per A_n per la quale la misura spettrale è la misura di Lebesgue.

Lo spettro di ciascun operatore A_n è quindi assolutamente continuo e così è lo spettro di A .

♡

Nel caso che abbiamo in esame il gruppo G viene sostituito con un gruppo discreto (il gruppo di periodicità del reticolo) e l'integrale viene sostituito con la somma su spazi di Hilbert tutti isomorfi allo spazio di funzioni a quadrato sommabile sulla cella di Wigner-Seitz \mathcal{W} .

Ma mentre la decomposizione di spazi di Hilbert non presenta problemi, la decomposizione di $-\Delta + V_{\text{per}}$ richiede alcune precisazioni.

Infatti, come abbiamo visto nel Capitolo 9, la restrizione di quest'operatore alle funzioni di classe H^2 aventi supporto in \mathcal{W} non è un operatore simmetrico e la sua restrizione $-\Delta_0 + V$ alle funzioni aventi supporto strettamente contenuto in \mathcal{W} è simmetrico ma non autoaggiunto.

Dalle considerazioni empiriche fatte nel caso $V = 0$ (il problema non è l'operatore limitato V) si può cercare di scrivere

$$H = \int_{\sigma} H_s d\mu$$

dove H_s è una famiglia di operatori autoaggiunti, ciascuno corrispondente ad un'estensione autoaggiunta di $-\Delta_0 + V_{\mathcal{W}}$ dove $V_{\mathcal{W}}$ è la restrizione del potenziale alla cella di Wigner-Seitz.

Notiamo che la decomposizione alternativa $\mathcal{H} = \int_{\mathcal{W}}^{\oplus} L^2(\mathcal{B})$ presenta maggiori difficoltà in presenza di un potenziale V perché il potenziale *non è diagonale in questa rappresentazione*.

Applichiamo ora il teorema 13.2 all'analisi dell'equazione di Schrödinger con potenziali periodici in dimensione d .

Iniziamo con il caso più semplice, $d = 1$.

Consideriamo l'operatore simmetrico positivo $-\frac{d}{dx^2}$ definito sulle funzioni di classe C^2 a supporto strettamente contenuto in $(0, 2\pi)$ e indichiamo con \hat{p}_{θ}^2 la

sua estensione autoaggiunta ottenuta ponendo sulle funzioni nel suo dominio le *condizioni al bordo*

$$\phi(2\pi) = e^{i\theta} \phi(0), \quad \frac{d\phi}{dx}(2\pi) = e^{i\theta} \frac{d\phi}{dx}(0).$$

Dall'analisi di Fourier si deduce che l'operatore $-\Delta$ definito su $L^2(R)$ con dominio di essenziale autoaggiuntezza la funzioni C^∞ a supporto compatto può essere identificato con $\int_{[0,2\pi)} \hat{p}_\theta^2 \frac{d\theta}{2\pi}$.

Per ciascun valore del parametro θ l'operatore di moltiplicazione per la funzione $V(x)$ limitata misurabile in $[0, 2\pi]$ è infinitesimo rispetto a \hat{p}_θ^2 .

Teorema 13.3

Sia $V(x)$ un funzione limitata misurabile su R di periodo 2π . Consideriamo l'operatore su $L^2(0, 2\pi)$ definito da

$$H_\theta = \hat{p}_\theta^2 + V(x)$$

e definiamo

$$\mathcal{H} = \int_{[0,2\pi)}^\oplus \mathcal{K} \frac{d\theta}{2\pi}, \quad \mathcal{K} = L^2(0, 2\pi)$$

Sia $U : L^2(R, dx) \rightarrow \mathcal{H}$ la trasformazione unitaria definita su $\mathcal{S}(R)$ da

$$(Uf)_\theta(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-i\theta n} f(x + 2\pi n) \quad 13.10$$

(per ciascun valore di x questa è una trasformazione di Fourier). Allora si ha

$$U \left(-\frac{d^2}{dx^2} + V \right) U^* = \int_{[0,2\pi)} H_\theta d\theta. \quad 13.11$$

◇

La trasformazione U definita da (13.10) è la *trasformazione di Bloch-Floquet* (nel caso uni-dimensionale, la generalizzeremo in seguito per il caso di dimensione d).

Conviene notare che se $\phi(x) \in L^2(R)$ la serie in (13.10) converge nello spazio $L^2(\mathcal{B}, L^2(\mathcal{W}))$.

Definizione

La funzione $U\phi$ associata univocamente allo stato descritto da ϕ è detta *trasformata di Bloch* di ϕ .

◇

Dimostrazione del Teorema 13.3

Notiamo che, per $f \in \mathcal{S}$ ed essendo V periodico

$$(UVf)_\theta(x) = V(x)(Uf)_\theta(x) = \sum_n e^{-i\theta n} V(x + 2\pi n) f(x + 2\pi n)$$

quindi su \mathcal{S}

$$UVU^{-1} = \int_{[0, 2\pi)} V \frac{d\theta}{2\pi}$$

D'altra parte, sempre su \mathcal{S}

$$-U \frac{d^2}{dx^2} U^{-1} = \int_{[0, 2\pi)} \hat{p}_\theta^2 d\theta$$

come è facile vedere passando in trasformata di Fourier a notando che per $f \in \mathcal{S}$ si ha $\mathcal{F}[\hat{p}_\theta^2 f] = (\frac{\theta}{2\pi} + n)^2 \mathcal{F}f$ (o, in modo analogo, studiando la relazione tra risolventi).

La (13.11) segue allora perché \mathcal{S} è un core per $H + V$.

♡

Come conseguenza dei teoremi 13.2 e 13.3 per analizzare le proprietà spettrali di $-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ con V periodico di periodo 2π sarà sufficiente analizzare $\hat{p}_\theta^2 + V(x)$ per ogni valore di $0 \leq \theta < 2\pi$.

Le sue autofunzioni $\psi(x, \theta)$, $x \in (-\infty, \infty)$, $\theta \in [0, 2\pi]$, verranno dette *Funzioni di Bloch*.

Lemma 13.4

Per ogni valore di θ :

- i) L'operatore \hat{p}_θ^2 ha risolvente compatta.
- ii) \hat{p}^2 è il generatore di un semigruppato di contrazione che migliora la positività.
- iii) la risolvente di \hat{p}_θ^2 è una funzione (a valori operatori) analitica in θ in un intorno di $[0, 2\pi]$.

◇

Dimostrazione

I punti i) e ii) potrebbero essere dimostrati con argomenti astratti. Conviene qui dare una dimostrazione costruttiva che provvede anche una dimostrazione del punto iii).

Sia K l'inverso di $-\frac{d^2}{dx^2} + I$ definito su $L^2(\mathbb{R})$. E' un operatore con nucleo integrale $G(x - y)$ la cui trasformata di Fourier è $\hat{G}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(p^2 + 1)}$.

Sia G_θ l'inverso di $\hat{p}_\theta^2 + I$ definito su $L^2((0, 2\pi))$

Se $f \in C_0^\infty((0, 2\pi))$ sia Gf che $G_\theta f$ risolvono la stessa equazione $-u''(x) + u(x) = f(x)$ in $(0, 2\pi)$ e pertanto la loro differenza v_θ risolve $-v_\theta'' + v_\theta = 0$. Devono esistere quindi costanti a e b tali che $(G_\theta f)(x) - (Gf)(x) = ae^x + be^{-x}$. Tenuto conto che $(G_\theta f)(x)$ deve soddisfare le condizioni al bordo

$$(G_\theta f)(2\pi) = e^{i\theta}(G_\theta f)(0), \quad (G_\theta f)'(2\pi) = e^{i\theta}(G_\theta f)'(0) \quad 13.12$$

non è difficile vedere che

$$G_\theta(x, y) = \frac{1}{2}e^{-|x-y|} + \alpha(\theta)e^{x-y} + \bar{\alpha}(\theta)e^{y-x}, \quad \alpha(\theta) = \frac{1}{2(e^{2\pi-i\theta} - 1)} \quad 13.13$$

Le proprietà i), ii) seguono dalla forma esplicita di G_θ date in (13.13). Infatti il suo nucleo è strettamente positivo per ogni θ . Anche la iii) è soddisfatta perché $\theta \mapsto K_\theta$ è chiaramente analitica (come applicazione da C agli operatori di Hilbert-Schmidt) per ogni θ , $|\Im \theta| < 2\pi$.

♡

Possiamo ora analizzare gli operatori $H_\theta = \hat{p}_\theta^2 + V$.

Teorema 13.5

Supponiamo che il potenziale V sia continuo a tratti e sia periodico di periodo 2π .

Allora

i)

H_θ ha spettro puramente discreto ed è reale analitico in θ

ii)

H_θ e $H_{2\pi-\theta}$ sono (antiunitariamente) equivalenti per coniugazione complessa.

iii)

Per $\theta \in (0, \pi)$ gli autovalori $E_n(\theta)$, $n = 1, 2, \dots$, di H_θ sono non-degeneri.

iv)

Ogni $E_n(\theta)$ è reale analitico in $(0, \pi)$ e continuo in $[0, \pi]$.

v)

Per n dispari (rispettivamente pari) $E_n(\theta)$ è strettamente crescente (rispettivamente decrescente) con θ in $(0, \pi)$. Inoltre

$$E_k(0) \leq E_{k+1}(0) \quad E_k(\pi) \leq E_{k+1}(\pi) \quad k = 1, 2, \dots \quad 13.14$$

vi)

Gli autovettori $\phi_n(\theta)$ possono essere scelti reali analitici in θ per $\theta \in (0, \pi) \cup (\pi, 2\pi)$ e continui in 0 e π (con $\phi_n(0) = \phi_n(2\pi)$).

◇

Dimostrazione

i)

Il punto i) segue dal fatto che l'affermazione è vera per $V = 0$ e dalla teoria delle perturbazioni regolari per operatori di Schrödinger che abbiamo brevemente descritto nel cap. 10.

ii)

Il punto ii) si verifica facilmente per $V = 0$ e rimane valido per V reale limitata rispetto a H_0 .

iii)

Se E è un autovalore di H_θ con $\theta \in (0, \pi)$ significa che $-u'' + Vu = Eu$ ha una soluzione, ma questo può essere vero solamente al più per una delle condizioni al bordo (13.12).

iv)

Consideriamo $E_1(0)$. Esso è un autovalore semplice perché H_0 è il generatore di un semigruppone che preserva la positività. Poiché H_θ è analitico in un intorno di 0 ed $E_1(0)$ non è degenere, esiste un intorno di 0 in cui H_θ ha un minimo autovalore $E_1(\theta)$ non degenere e analitico.

Se π non fosse l'estremo superiore dell'intervallo di analiticità dovrebbe esistere $\theta_0 < \pi$ tale che $E_1(\theta) \rightarrow \infty$ quando $\theta \rightarrow \theta_0$ (notare che H_θ è limitato dal basso perché $V \in L^\infty$).

Pertanto è sufficiente dimostrare che $E_1(\theta)$ rimane finito al variare di θ in $[0, \pi)$. Ma questo è vero poiché $E_1(\theta)$ è il *minimo* autovalore di H_θ .

Questo ragionamento può essere ripetuto per $E_n(\theta)$, $n > 1$. Notare che $E_n(0)$, $n > 1$ può essere degenere (ad esempio lo è se $V = 0$) ma non lo è $E_n(\epsilon)$ per ϵ piccolo e diverso da zero.

v)

Iniziamo con il dimostrare che $\forall \theta \quad E_1(0) \leq E_1(\theta)$. Poiché e^{-tH_0} migliora la positività (vedi Capitolo 19), l'autovettore $\phi_1(0)$ è strettamente positivo e si estende a una funzione periodica $\tilde{\phi}_0$ su tutto R .

Considerando la sua restrizione all'intervallo $(-2\pi n, 2\pi n)$ e chiamando H_k l'operatore $-\frac{d^2}{dx^2} + V$ ristretto alle funzioni periodiche in questo intervallo, si ha che $E_1(0)$ è anche il minimo autovalore di H_k .

Ne segue che qualunque sia n si ha che per ogni $\psi \in C_0^\infty(-2\pi n, 2\pi n)$

$$\left\langle \psi, \left[-\frac{d^2}{dx^2} + V \right] \psi \right\rangle \geq E_1(0) \langle \psi, \psi \rangle$$

poiché al variare di n gli insiemi $C_0^\infty(-2\pi n, 2\pi n)$ coprono densamente $L^2(R)$ ne deduciamo che, quasi ovunque in θ si ha $E_1(\theta) \geq E_1(0)$.

Ma E_i è continuo, quindi la disuguaglianza vale per tutti i valori di θ .

Consideriamo ora l'equazione differenziale

$$-\frac{d^2 u(x)}{dx^2} + V(x)u(x) = Eu(x). \quad 13.15$$

Siano $u_1^E(x)$ e $u_2^E(x)$ le soluzioni con le condizioni al bordo $u_1^E(0) = 1$, $(u_1^E)'(0) = 0$ e $u_2^E(0) = 0$, $(u_2^E)'(0) = 1$ rispettivamente.

Consideriamo la matrice Hessiana $M(E)$ composta dal valore delle due funzioni e delle loro derivate nel punto 2π e definiamo

$$D(E) \equiv \text{Tr } M(E) = u_1^E(2\pi) + (u_2^E)'(2\pi). \quad 13.16$$

Notiamo che $M(E)$ ha determinante 1 poiché il Wronskiano delle due soluzioni u_1 ed u_2 è costante; indichiamo con λ e λ^{-1} i suoi autovalori.

Se $v(x)$ soddisfa (13.15) allora la matrice $M(E)$ dà la relazione lineare tra il vettore $(v(0), v'(0))$ e il vettore $(v(2\pi), v'(2\pi))$.

Ne segue che l'equazione $H_\theta \psi = E\psi$ ha soluzione se e solamente se $e^{i\theta}$ è autovalore di $M(E)$ e quindi se $D(E) = 2 \cos \theta$.

Pertanto vale la relazione

$$\arccos\left[\frac{1}{2}D(E_1(\theta))\right] = \theta \quad 13.17$$

Sappiamo che $D(E) = 2$ per $E = E_1(0)$.

Al crescere di θ tra 0 e π la funzione $D(E)$ varia in modo monotono decrescente tra 2 e -2 .

Il primo valore di E per il quale $D(E) = -2$ è di conseguenza $E_1(\pi)$. Il successivo valore di E per cui $D(E) = -2$ deve essere $E_2(\pi)$.

Nell'intervallo $(E_2(\pi), E_2(0))$ $D(E)$ è crescente e assume il valore 2 in corrispondenza a $E_2(0)$.

Si alternano cioè intervalli di energia in cui $D(E)$ è crescente tra -2 e 2 e intervalli in cui essa è decrescente tra 2 e -2 .

Questi intervalli (bande) sono rispettivamente $[E_{2k+1}(0), E_{2k+1}(\pi)]$ e $[E_{2k}(\pi), E_{2k}(0)]$.

La k^{ma} banda può toccare la $(k+1)^{\text{ma}}$ solo se $E_k(\pi) = E_{k+1}(\pi)$ oppure $E_k(0) = E_{k+1}(0)$ (quindi se il corrispondente autovalore è doppio).

Notare che se $V = 0$ tutti gli autovalori sono doppi e tutte le bande si toccano.

vi)

Che gli autovalori $\phi_n(\theta)$ possano essere scelti analitici in θ in $(0, \pi) \cup (\pi, 2\pi)$ e continui in $(0, 2\pi)$ segue dalla teoria delle perturbazioni regolari di operatori autoaggiunti.

◇

Dall'analisi che abbiamo fatto segue

Teorema 13.6.

Consideriamo l'operatore autoaggiunto $H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ su $L^2(\mathbb{R})$ con $V(x)$ periodico e continuo a tratti. Indichiamo con $E_k(0)$, $k = 1, \dots$, gli autovalori dell'operatore H ristretto alle funzioni in $[0, 2\pi]$ con condizioni periodiche al bordo, e con $E_k(\pi)$ quelli dello stesso operatore differenziale ristretto alle funzioni che soddisfano condizioni antiperiodiche (i valori che assumono in 0 e 2π sono fra loro opposti).

Allora

i)

$$\sigma(H) = \cup_k ([E_{2k+1}(0), E_{2k+1}(\pi)] \cup [E_{2k}(\pi), E_{2k}(0)])$$

ii)

H non ha spettro discreto

iii)

H ha spettro assolutamente continuo

◇

Dimostrazione

Il punto i) segue dal teorema 13.1 poiché $E_n(\theta)$ è continuo per ogni n .

Il punto ii) segue dal teorema 13.2. poiché $E_n(\theta)$ è strettamente monotona e quindi per ogni E_0 l'insieme dei valori di θ per cui $E(\theta)$ è un autovalore consiste al più di due punti.

Il punto iii) segue dai teorema 13.3 e 13.4.

♡

Chiameremo *gap* ogni intervallo che separa due intervalli disgiunti dello spettro. Notiamo che gli estremi dei gap sono dati dalle energie delle soluzioni periodiche e antiperiodiche dell'equazioni di Schrödinger. Gli autovalori corrispondenti a soluzioni con altre condizioni al bordo *sono interni* allo spettro.

Questa caratteristica non è più necessariamente vera nel caso di dimensione maggiore di uno; in questo caso le *autofunzione di bordo* (quelle che corrispondono ai bordi dello spettro) *possono corrispondere a diverse condizioni al bordo della cella di Wigner-Seitz*.

Questo fatto costituisce una difficoltà nell'estendere al caso di dimensione ≥ 2 l'analisi che abbiamo fatto, che si basa su una fibrazione dello spazio di Hilbert che ha come base $L^2(\mathcal{W})$ dove \mathcal{W} è la cella elementare di Wigner-Seitz.

Questa difficoltà suggerisce di utilizzare un'altra fibrazione, che ha come base la cella di Brioullin del reticolo duale.

Prima di analizzare quest'altra fibrazione diamo un esempio concreto dell'analisi che abbiamo fatto studiando *l'equazione di Mathieu* che corrisponde al potenziale $V(x) = \mu \cos x$.

Lemma 13.7

Nel caso della hamiltoniana

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + \mu \cos x, \quad \mu \neq 0$$

tutti i *gap* sono aperti.

◇

Dimostrazione

Siano H_p (rispettivamente H_a) gli operatori autoaggiunti su $L^2(0, 2\pi)$ definiti come restrizione dell'operatore differenziale $H = -\frac{d^2}{dx^2} + \mu \cos x$ a funzioni che soddisfano condizioni al bordo di periodicità (rispettivamente di antiperiodicità).

Dobbiamo dimostrare che H_p e H_a non hanno autovalori doppi.

Iniziamo con il determinare gli autovalori di H_p . In trasformata di Fourier l'operatore H_p^0 (uguale a $-d^2/dx^2$ ristretto alle funzioni periodiche) assume la forma

$$H_p \phi_n = n^2 \phi_n, \quad \phi_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{inx}$$

quindi l'autovalore E corrisponde alla relazione in ℓ^2

$$(n^2 - E)a_n + \frac{\mu}{2}(a_{n+1} + a_{n-1}) = 0 \quad \sum_n |a_n|^2 = 1. \quad 13.18$$

Dimostriamo che la soluzione, se esiste per un dato E , è unica.

Supponiamo infatti che vi siano due soluzioni distinte corrispondenti ad uno stesso valore di E .

Sia $\{b_n\}$ un'altra soluzione. Moltiplicando le due equazioni rispettivamente per b_n e per a_n e sottraendo si ottiene, usando l'ipotesi $\mu \neq 0$,

$$c_n \equiv a_{n+1}b_n - a_nb_{n+1} = a_nb_{n-1} - a_{n-1}b_n = c_{n-1}. \quad 13.19$$

Ma entrambi i vettori $\{a_n\}$ e $\{b_n\}$ sono in ℓ^2 . Ne risulta $c_n = 0 \quad \forall n$ e quindi

$$a_{n+1}b_n = a_nb_{n+1}. \quad 13.20$$

Notiamo ora che se due consecutive costanti a_n sono nulle, la soluzione di (13.18) è nulla (questo è dovuto alla specifica forma del potenziale).

Quindi almeno una tra a_n e a_{n+1} deve essere non nulla, e lo stesso vale per le b_n .

Se E è doppiamente degenere, poiché il potenziale $V(x)$ è pari possiamo assumere che una soluzione sia pari e l'altra dispari.

Se quella data da $\{b_n\}$ è dispari, avremo $b_0 = 0$. Quindi $b_1 \neq 0$. Corrispondentemente, quella data da $\{a_n\}$ sarà pari, quindi $a_n = a_{-n}$.

D'altra parte la (13.18) per $n = 0$ da' $-Ea_0 + \mu a_1 = 0$.

Poiché a_0 ed a_1 non possono essere entrambe nulle, segue che $a_0 b_1 \neq 0$. Ma $a_1 b_0 = 0$ e questo viola (13.19).

La contraddizione che abbiamo ottenuto dimostra che l'autovalore non può essere doppio; in altre parole, per il potenziale di Mathieu tutti i gap sono aperti.

♡

Studiamo ora il caso di dimensioni maggiori di uno.

In questo caso non è in generale vero che le autofunzioni relative agli estremi delle bande (che sono detti *edge states*) soddisfino ad una particolare simmetria nello spazio delle configurazioni.

E' quindi conveniente adottare una descrizione duale, che corrisponde ad una decomposizione dello spazio di Hilbert in fibre associate alla trasformata di Fourier (quasi-momenti).

Cominciamo anche questa volta con il caso di una dimensione.

Supponiamo che $V(x) \in C^\infty(R)$ così che l'operatore differenziale $H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ è un'applicazione di \mathcal{S} in se.

Prendendo trasformate di Fourier su ha

$$\widehat{(Hf)}(p) = p^2 \hat{f}(p) + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \hat{V}(p-p') \hat{f}(p') dp' \quad 13.21$$

Se $V(x)$ è periodico di periodo 2π si ha

$$V(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}_n e^{inx}$$

con serie uniformemente convergente. Corrispondentemente la (13.21) si scrive

$$\widehat{(Hf)}(p) = p^2 \hat{f}(p) + \sum_{-\infty}^{\infty} \hat{V}_n \hat{f}(p-n).$$

Da questo segue il seguente teorema

Teorema 13.8

Sia $\mathcal{H}' = \ell^2(Z)$ e costruiamo $\mathcal{H} = \int_{[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]}^{\oplus} \mathcal{H}' dq$.

Per $q \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ definiamo

$$(H_q g)_m = (q+m)^2 g_m + \sum_{-\infty}^{\infty} \hat{V}_n g_{m-n} \quad g \in \mathcal{H}' \quad 13.22$$

Allora, se $H \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ in $L^2(R)$ si ha, con U la trasformazione di Fourier

$$UHU^{-1} = \int_{(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]}^{\oplus} H_q dq, \quad [(Uf)(q)]_m = \hat{f}(q+m)$$



Nota 13.1

L'espressione (13.22) definisce un operatore attraverso il suo nucleo integrale. In questo caso particolare l'operatore assume la forma di un operatore differenziale *in un'altra rappresentazione*.

Ma se consideriamo la restrizione di quest'operatore ad un suo sottospazio spettrale e *successivamente* eseguiamo la trasformazione di Fourier *otteniamo in generale un operatore pseudodifferenziale*. Per questo motivo la teoria matematica degli operatori di Schrödinger con potenziali periodici (teoria della materia cristallina) utilizza estensivamente la teoria degli operatori pseudo-differenziali.



Nota 13.2

Abbiamo visto che l'operatore $H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ dove $V(x)$ è periodico di periodo 2π e continuo a tratti, è un operatore autoaggiunto e il suo spettro $\sigma(H)$ consiste in un numero finito o infinito di intervalli dell'asse reale $I_k \equiv [\lambda_k, \lambda_{k+1}]$, detti *bande*, intervallati da intervalli aperti, detti *gaps*.

Le autofunzioni generalizzate $\phi_E(x)$ relative all'autovalore $E \in I_k$ nel caso unidimensionale che abbiamo finora studiato sono funzioni continue che soddisfano al bordo dell'intervallo $[0, 2\pi]$ condizioni del tipo

$$\phi_E(2\pi) = \omega(E)\phi_E(0)$$

dove $\omega(E)$ è un funzione continua con $|\omega(E)| = 1, \forall E$.

Ai bordi delle bande la funzione $\omega(E)$ può assumere solamente i valori 1 oppure -1. Notiamo che le autofunzioni $\phi_E(x)$ sono definite per ciascun $E \in I_k$ a meno di una fase; questa fase può, nel caso unidimensionale, essere scelta funzione continua di E .

La funzione $\phi_E(x)$ definita su $[0, 2\pi]$, normalizzata ad uno, può essere continuata all'intero asse reale come funzione limitata $\tilde{\phi}_E$ rimanendo un'autofunzione (generalizzata) dell'operatore H .

Indichiamo con $\tilde{\phi}_E^N$ la restrizione di $\tilde{\phi}_E$ all'intervallo $[-N\pi, N\pi]$.

Vale naturalmente $(\phi_E^N, H\phi_E^N) = 2N(\phi, H\phi)$; passando al limite $N \rightarrow \infty$ la quantità $(\phi, H\phi)$ è *l'energia dello stato $\tilde{\phi}$ per unità di lunghezza* (misurata in multipli di 2π).

Questa considerazione elementare è utile quando si considera un sistema di elettroni distribuiti con densità costante in un potenziale periodico; con questa notazione intenderemo un sistema che formalizzeremo con un limite $N \rightarrow \infty$ nello stesso modo in cui si procede nel fare il *limite termodinamico* in Meccanica Statistica.

Ricordiamo che lo spettro di H è assolutamente continuo. Nel caso unidimensionale per potenziali sufficientemente regolari, le $\phi_E(x)$ sono continuabili come funzioni di z in un intorno dell'asse reale.

Se la misura spettrale $\sigma(\lambda)$ è analitica, per teoremi classici di Paley-Wiener [PW34] (in analogia con la trasformata di Fourier) per ogni funzione g a supporto compatto la funzione

$$G_n(x) = \int g(\lambda)\phi_\lambda(x)\frac{d\sigma(\lambda)}{d\lambda}d\lambda \tag{13.23}$$

converge a zero esponenzialmente per $|x| \rightarrow \infty$, e l'esponente dipende dal supporto di g .

Ne segue che è possibile, partendo dalle funzioni di Bloch relative alla hamiltoniana H e mediante un processo di ortogonalizzazione, costruire un sistema ortonormale completo di funzioni $\xi_n(x) \in L^2(R^3)$ ciascuna delle quali converge a zero esponenzialmente al di fuori della cella di Wigner- Seitz (ma la rapidità di convergenza dipende in generale dall'indice n .)

Questa collezione di funzioni prende il nome di *funzioni di Wannier* .

L'esistenza delle funzioni di Wannier permette di studiare osservabili (perturbazioni) che abbiano supporto in una regione piccola nello spazio della configurazioni, dell'ordine di una cella di Wigner-Seitz.

Nel caso di dimensione ≥ 2 , la costruzione di funzioni di Wannier che decrescano esponenzialmente non è sempre possibile per un motivo che illustreremo tra poco.



Dalle considerazioni fatte finora risulta che si considerano potenziali periodici nel caso di dimensione maggiori di uno è conveniente utilizzare la fibrazione nello spazio degli impulsi.

Prima di fare questo, dobbiamo dare una generalizzazione al caso di potenziali periodici delle stime di controllo degli operatori moltiplicazione per un potenziale mediante operatori differenziali, in particolare il laplaciano.

I criteri che abbiamo dato in precedenza per potenziali in L^p o di tipo Rollnik non sono applicabili al caso periodico, perché un potenziale periodico non è in L^p .

Utilizzando la periodicità (quindi in ultima analisi le fibrazioni che abbiamo introdotto) è tuttavia sufficiente avere *stime locali* .

Definizione 13.2

Una funzione V su R^d è detta essere *uniformemente localmente in L^p* se e solo se esiste una costante positiva M tale che $\int_C |V(x)|^p d^d x \leq M$ per ogni cubo C di lato uno.



Con questa definizione la teoria delle perturbazioni precedentemente sviluppata si estende a perturbazioni uniformemente localmente limitate (nel senso di Kato) rispetto al laplaciano.

Teorema 13.9

Sia $p \leq 2$ per $d \leq 3$, $p > 2$ per $d = 4$ e $p > \frac{d}{2}$ per $d \geq 5$.

La moltiplicazione per ogni funzione V che sia localmente uniformemente in $L^p(\mathbb{R}^n)$ è un operatore in $L^2(\mathbb{R}^n)$ limitato rispetto al laplaciano con limitatore zero.

◇

Dimostrazione

Se $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = \frac{1}{2}$ sappiamo che per ogni $\epsilon > 0$ esiste A_ϵ tale che

$$\|f\|_q^2 \leq \epsilon \|\Delta f\|_2^2 + A_\epsilon \|f\|_2^2 \quad 13.24$$

Per ogni cubo C definiamo

$$\|f\|_{r,C} \equiv \left[\int_C \|f(x)\|^r d^d x \right]^{\frac{1}{r}}$$

Sia ora C un cubo di lato unitario e C_3 il cubo di lato 3 e stesso centro di C . Utilizziamo un procedimento standard di localizzazione.

Sia η un funzione di classe C^∞ con supporto strettamente contenuto in C_3 e che valga 1 su C .

Utilizzando (13.24) otteniamo

$$\begin{aligned} \|f\|_{q,C}^2 &\leq \|\eta f\|_q^2 \leq \epsilon \|\Delta(\eta f)\|_2^2 + A_\epsilon \|\eta f\|_2^2 \\ &\leq 3\epsilon \|\Delta f\|_{2,C_3}^2 + B \|\nabla f\|_{2,C_3}^2 + D \|f\|_{2,C_3}^2 \end{aligned} \quad 13.25$$

dove abbiamo utilizzato le due identità

$$\Delta(\eta f) = f \Delta \eta + \eta \Delta f + 2\nabla \eta \cdot \nabla f, \quad (a + b + c)^2 \leq 3(a^2 + b^2 + c^2)$$

Le costanti B e D non dipendono da C .

Sia ora $\xi \in Z^d$ e sia C_ξ sia il cubo di lato uno centrato in ξ e $C_{\xi,3}$ il cubo di lato 3 centrato in ξ .

Per ipotesi

$$\|V\| \equiv \sup_{\xi} \|V\|_{p,C_\xi} < \infty$$

Abbiamo dunque, per $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} \|V f\|_2^2 &= \sum_{\xi} \|V f\|_{2,C_\xi}^2 \leq \sum_{\xi} \|V\|_{p,C_\xi}^2 \|f\|_{q,C_\xi}^2 \leq \\ &\leq \|V\|^2 \sum_{\xi} (3\epsilon \|\Delta f\|_{2,C_{\xi,3}}^2 + B \|\nabla f\|_{2,C_{\xi,3}}^2 + D \|f\|_{2,C_{\xi,3}}^2) \end{aligned}$$

$$\leq \|V\|^2 3^d \left[4\epsilon \|\Delta f\|_2^2 + \left(D + \frac{B}{4\epsilon}\right) \|f\|_2^2 \right] \quad 13.26$$

(notare che, tranne che per un insieme di misura zero, ogni x appartiene a esattamente 3^d dei $C_{\xi,3}$) e abbiamo utilizzato la disuguaglianza di Plancherel

$$\|\nabla f\|_2^2 \leq \delta \|\Delta f\|_2^2 + \frac{1}{4\delta} \|f\|_2^2$$

che a sua volta è una conseguenza della disuguaglianza numerica $a \leq \delta a^2 + \frac{1}{4\delta}$. ♡

Diamo qualche dettaglio della decomposizione integrale di un operatore di Schrödinger in R^d con potenziale periodico.

Se il reticolo Γ di periodicità ha una base $\gamma_1, \dots, \gamma_d \in R^d$ il reticolo duale è definito dalla *base duale* $\gamma_1^*, \dots, \gamma_d^* \in R^d$ (definita da $(\gamma_i, \gamma_j^*) = 2\pi\delta_{i,j}$).

Il dominio centrato fondamentale di Γ^*

$$\mathcal{K} = \left\{ \sum_{i=1}^d t_i \gamma_i^* \mid 0 \leq t_i \leq 1 \right\} \quad 13.28$$

è identificabile con la zona di Brillouin.

Generalizziamo ora al caso $d > 1$ l'analisi della decomposizione nello spazio dei momenti che abbiamo fatto in modo esplicito nel caso $d = 1$.

Con stime analoghe a quelle fatte per il caso $d = 1$ e utilizzando il Teorema 13.18 si dimostra che detta \mathcal{Q} la cella elementare data da

$$\mathcal{Q} = \left\{ x : x = \sum_{i=1}^d t_i \gamma_i, 0 \leq t_i \leq 1 \right\}$$

se $V \in L^p(\mathcal{Q})$ dove $p \leq 2$ se $d \leq 3$, $p > 2$ se $d = 4$ e $p > \frac{d}{2}$ se $d \leq 5$, allora $-\Delta + V$ è unitariamente equivalente a

$$\frac{1}{2\pi} \int_{[0,2\pi)^d}^{\oplus} H_\theta d^d\theta, \quad H_\theta = H_\theta^0 + V$$

dove, per quasi tutti i valori di θ , H_θ^0 è l'operatore $-\Delta$ su $L^2(\mathcal{Q})$ con condizioni al bordo

$$\phi(x + a_j) = e^{i\theta_j} \phi(x), \quad \frac{\partial \phi}{\partial x_j}(x + a_j) = e^{i\theta_j} \frac{\partial \phi}{\partial x_j}(x). \quad 13.29$$

Per ogni valore di θ , il potenziale V è infinitesimo nel senso di Kato rispetto a H_θ^0 .

Come conseguenza, ciascun H_θ ha risolvente compatta e quindi ha un sistema completo di autofunzioni $\phi_m(\theta, x)$ che possono essere estese a tutto R^d utilizzando (13.29), e un corrispondente sistema di autovalori $E_m(\theta)$.

E' possibile dimostrare che le funzioni $E_n(\theta)$ sono misurabili e che le corrispondenti autofunzioni possono essere scelte misurabili.

Anche la decomposizione nello spazio dei momenti è fatta in modo analogo a quello visto nel caso $d = 1$.

In questa rappresentazione l'operatore H è equivalente a $\int_{\mathcal{K}}^{\oplus} H_k dk$ dove H_k è definito su $\ell_2(Z^d)$ da (per semplicità di notazione poniamo $\alpha_j = \gamma_j^*$)

$$(H_k g)_m = (H_k^0 g)_m + \sum_{l \in Z^d} \tilde{V}_l g_{m-l}, \quad (H_k^0 g)_m = (k + \sum m_j \alpha_j)^2 g_m \quad 13.30$$

con dominio $\mathcal{D} = \{g \in \ell_2(Z^d) : \sum_{m \in Z^d} m^2 |g_m|^2 < \infty\}$.

In (13.30) $m \in Z^d$ e \tilde{V}_m sono i coefficienti di V come funzione su \mathcal{Q} . Esplicitamente si ha

$$\tilde{V}_m = (\text{vol } \mathcal{Q})^{-1} \int_{\mathcal{Q}} e^{-i \sum_{j=1}^d m_j \alpha_j \cdot x} V(x) d^d x \quad 13.31$$

e la relazione inversa è

$$V(x) = \sum_{l \in Z^d} \tilde{V}_l e^{i \sum_{j=1}^d l_j \alpha_j \cdot x}.$$

Notare che questa ultima somma è uniformemente convergente poiché V è uniformemente localmente in L_{loc}^2 .

L'equazione (13.30) può essere utilizzata per estendere la risolvente di H_k a $k \in C^d$ e la famiglia di operatori così ottenuta è una famiglia intera in $k \in C^d$. Vedremo che questo è utile per la costruzione delle funzioni di Wannier a decadimento esponenziale all'infinito.

Dimostriamo ora che l'operatore $-\Delta + V$ ha spettro assolutamente continuo.

Dal Teorema 13.9 deduciamo che, poiché V è infinitesimo rispetto agli H_k^0 , è sufficiente studiare la possibilità di continuare analiticamente gli autovalori e le autofunzioni di H_k^0 .

Indichiamo con $E_m(k)$ gli autovalori che dalla (13.30) risultano essere

$$E_m(k) = (k + \sum m_j \alpha_j)^2$$

Per applicare il Teorema 13.2 basterà scegliere una base $\alpha_j, j = 1, \dots, d$ tale che il primo elemento sia nella direzione del primo vettore γ_1 del reticolo nello spazio delle configurazioni

$$k = s_1 \gamma_1 + s_2 \alpha_2 + \dots + s_d \alpha_d$$

Dalla forma (13.30) per H_k^0

$$H_k^0 = \int_{s_{\perp} \in \mathcal{N}} ds_2 \dots ds_d \int_{s_1 \in \mathcal{M}_{s_{\perp}}} ds_1 [H_k(s_1 \gamma_1 + \dots + s_d \alpha_d)] \quad 13.32$$

dove $s_{\perp} = \{s_2, \dots, s_d\}$ e \mathcal{N} e $\mathcal{M}_{s_{\perp}}$ sono scelti in modo tale da coprire tutto il dominio di integrazione.

Potremo allora considerare gli autovalori di H_k come funzioni di s_1, s_{\perp} continue in tutte le variabili e analitiche in s_1 in un intorno di $\mathcal{M}_{s_{\perp}}$.

Infatti con questa scelta della base (notare che la base scelta *dipende da k*) si ha

$$E_m(s, s_{\perp}) = (1 + s_1)a_1^2 + \sum_{p \geq 2} (k \cdot s_p)^2 \quad 13.33$$

Per per ciascun valore di m questa funzione di s è continuabile ad una funzione analitica in $z \in C$ e continua in s_{\perp} ; si può vedere facilmente che anche gli autovettori sono funzioni analitiche in z e continue in s_{\perp} .

Inoltre si può vedere che se $\beta > \frac{d}{2}$ e $\beta \geq d - 1$ la serie

$$f_{\beta}(y) = \sum_{m \in \mathbb{Z}^d} |E_m(x + iy, s_{\perp}) + 1|^{-\beta} \quad 13.34$$

converge, uniformemente in s_{\perp} , e se $\beta > d - 1$ si ha $\lim_{y \rightarrow \pm\infty} f_{\beta}(y) = 0$.

Queste stime provvedono analiticità al di fuori dell'asse reale di un'opportuna potenza della risolvente di H_k^0 , e quindi della risolvente di H_k .

Dalla formula esplicita si vede che per nessun valore di m la funzione $s \rightarrow E_m(s, s_{\perp})$ è costante.

Da queste stime si può dedurre, utilizzando il Teorema 13.2, il seguente Teorema

Teorema 13.10

Se $\tilde{V} \in \ell_{\beta}$, con $\beta < \frac{d-1}{d-2}$ se $d \geq 3$ e $\beta = 2$ se $d = 2$, l'operatore $-\Delta + V$ ha spettro assolutamente continuo.

◇

Conviene ora introdurre come nel caso unidimensionale per ogni $\phi \in \mathcal{S}$ la trasformazione di Bloch-Floquet

$$(U\phi)(k, x) = \frac{1}{\text{vol}\mathcal{B}^{1/2}} \sum_{\gamma \in \Gamma} e^{-i(x+\gamma) \cdot k} \phi(x + \gamma), \quad x, k \in R^d. \quad 13.35$$

Abbiamo aggiunto nella definizione il fattore $e^{-i k x}$ per semplificare, nel seguito, alcune espressioni. Se $\phi(x) \in L^2(R^d)$ la serie (13.35) converge nello spazio $L^2(\mathcal{B}, L^2(\mathcal{W}))$

Si verifica facilmente che

$$(U\phi)(k, x + \gamma) = (U\phi)(k, x) \quad (U\phi)(k + \gamma^*, x) = e^{-ix \cdot \gamma^*} (U\phi)(k, x). \quad 13.36$$

Definizione

La funzione $U\phi$ associata univocamente mediante (13.39) allo stato descritto da $\phi(x)$ viene indicata con in nome *trasformata di Bloch* (associata a ϕ).

◇

Ne segue che per qualunque $k \in R^d$ la funzione $(U\phi)(k, \cdot)$ è una funzione Γ -periodica e quindi può essere riguardata come funzione di classe L^2 su $T^d \equiv R^d/\Gamma$ cioè sul toro d -dimensionale.

Notare che il toro T^d può essere anche realizzato come cella unitaria con lati identificati dall'azione di Γ .

Il vettore $k \in R^d$ viene detto *quasi-momento* (notare l'analogia con la trasformazione di Fourier).

La funzione $(U\phi)(k, x)$ è *quasi-periodica* nella variabile x e quindi può essere scritta nella forma

$$(U\phi)(k, x) = e^{ik \cdot x} v_k(x) \quad 13.37$$

dove v_k è per ciascun valore di k una funzione periodica in x .

Inoltre se $\phi_\gamma(x) = \phi(x + \gamma)$, $\gamma \in \Gamma$ allora

$$(U\phi_\gamma)(k, x) = e^{-ik \cdot \gamma} (U\phi)(k, x) \quad 13.38$$

Conviene notare che le funzioni di Bloch (13.37) e la trasformazione di Bloch-Floquet giocano un ruolo analogo alle onde piane e alla trasformazione di Fourier nel caso di potenziali che vanno a zero all'infinito.

Valgono in questo formalismo teoremi analoghi ai classici teoremi di Plancherel e di Paley-Wiener per la trasformazione di Fourier [PW34].

Introduciamo lo spazio L_a^2 delle funzioni localmente $L^2(R^d)$ e che decadono all'infinito in modo sufficientemente rapido

$$\phi \in L_a^2 \Rightarrow \sup_{\gamma \in \Gamma} e^{a\gamma} \|\phi\|_{L^2(W+\gamma)} < \infty.$$

Notiamo che quando utilizzeremo per una funzione ψ la dicitura *decadimento esponenziale* intenderemo sempre che esiste $a > 0$ per il quale $\psi \in L_a^2$.

Se \mathcal{H} è uno spazio di Hilbert e $\Omega \subset C^d$ utilizziamo la notazione $\mathcal{A}(\Omega, \mathcal{H})$ lo spazio delle funzioni a valori in \mathcal{H} analitiche in Ω (con la topologia della convergenza uniforme sui compatti).

Si hanno allora i seguenti risultati (vedere, ad esempio, [K93])

Teorema 13.10

1)

Se $\phi \in L^2(R^d)$ la serie (13.35) converge nello spazio $L^2(T^*, L^2(W))$ e vale l'identità (analoga al teorema di Plancherel)

$$\|\phi\|_{L^2(R^d)}^2 = \frac{1}{\text{vol}(\mathcal{B})} \int_{\mathcal{B}} \|U(\phi)(k, \cdot)\|_{L^2(W)}^2 dk = \frac{1}{\text{vol}(T^*)} \int_{T^*} \|(U\phi)(z, \cdot)\|_{L^2(W)}^2 dz \quad 13.39$$

dove dk è la misura di Lebesgue su R^d e dz è la misura di Haar su T^* .

2)

Per ogni $0 < a < \infty$ l'applicazione $\phi \mapsto U\phi$ è un isomorfismo topologico tra $L_a^2(R^d)$ e $\mathcal{A}(\Omega_a, L^2(\mathcal{W}))$ dove Ω_a è la striscia $\{z \in C^d : |\Im z| \leq a\}$. Questo è l'analogo dei teoremi di Paley- Wiener.

3)

Vale la formula d'inversione

$$\phi(x) = \frac{1}{\text{vol}(T^*)^{1/2}} \int_{T^*} e^{ik \cdot x} (U\phi)(k, x) dk. \quad 13.40$$

◇

Se $H = -\Delta + V(x)$ con V periodico, la trasformazione di Bloch-Floquet riduce H rispetto a T^* . Se indichiamo con $H(k)$ l'operatore H ristretto alle funzioni che hanno fissato quasi-momento $k \in T^*$ (un operatore autoaggiunto con risolvete compatta se $V \in L^\infty$), e ordiniamo in ordine crescente gli autovalori di $H(k)$

$$\lambda_1(k) \leq \lambda_2(k) \leq \dots$$

si dimostra facilmente che

a)

Le funzioni λ_k sono continue, Γ^* -periodiche, analitiche a tratti.

b)

Lo spettro di H è

$$\sigma(H) = \cup_m I_m$$

dove I_m è l'insieme delle $\lambda_m(k)$.

Una descrizione dettagliata delle *funzioni di banda* λ_k e delle corrispondenti *onde di Bloch* (o *funzioni di Bloch*) $\psi_m(k, x)$ (soluzioni di $H(k)\psi_m(k, \cdot) = \lambda_m(k)\psi_m(k, \cdot)$) può essere trovata su [W78]

Abbiamo notato che le funzioni di Bloch per l'operatore $-\Delta + V$, V periodico, sono l'analogo delle autofunzioni generalizzate nel caso di potenziali che decrescono all'infinito.

Se $V = 0$ si tratta di onde piane, e la base duale (in trasformata di Fourier) sono le misure di Dirac.

Considerazioni analoghe nel caso dei potenziali periodici portano alla definizione di *funzioni di Wannier*.

Sebbene le funzioni di Bloch siano uno strumento utile per determinare proprietà elettroniche di un cristallo, risulta molto difficile la *visualizzazione* di alcune di queste proprietà, quali quelle che si riferiscono a legami chimici e altre *correlazioni locali*.

Per confronto ricordiamo che le funzioni che corrispondono alle funzioni di Bloch in assenza del potenziale sono le onde piane. In questo caso per studiare le

proprietà *locali* conviene utilizzare le coordinate di posizione, cioè introdurre la trasformata di Fourier.

Analogamente per studiare le proprietà locali nei cristalli conviene utilizzare funzioni di Wannier, e sceglierle il più localizzate possibile.

Per esempio nella moderna teoria della polarizzazione gioca un ruolo cruciale la modificazione per l'azione di un campo elettrico delle funzioni di Wannier localizzate alla superficie di un cristallo .

Poiché, come vedremo, le funzioni di Wannier si esprimono come integrali con peso rispetto a k delle funzioni di Bloch $\phi_m(k, x)$, la possibilità di una loro localizzazione, almeno approssimata, in una regione di dimensioni confrontabili con la cella di Wigner-Seitz dipende sia dal peso che viene scelto che dalla loro regolarità nella variabile k .

Sia $\phi_m(k, x) \in L^2(T^*, L^2(\mathcal{W}))$ una funzione di Bloch relativa alla funzione di banda $\lambda_m(k)$; notiamo che anche se l'autovalore $\lambda_m(k)$ è semplice, come funzione di x la funzione $\phi_m(k, x)$ è definita solo a meno di un fattore di fase che dipende da k .

Questa libertà di scelta sarà utile nel determinare proprietà della funzioni di Wannier.

Definizione 13.3

Definiamo *funzione di Wannier* $w_m(x)$ associata alla funzione di Bloch $\phi_m(k, x)$ la funzione

$$w_m(x) = \frac{1}{\text{vol}(\mathcal{B}^{1/2})} \int_{T^*} e^{ik \cdot x} \phi_m(k, x) dk, \quad x \in R^d. \quad 13.41$$

◇

Dalla definizione segue che la funzione di Bloch $\phi_m(k, x)$ è la trasformata di Bloch-Floquet di w_m

$$\phi_m(k, x) = \sum_{\gamma \in \Gamma} e^{-ik \cdot (\gamma + x)} w_m(x + \gamma) \quad 13.42$$

Segue anche

$$w_m(x + \gamma) = \frac{1}{\text{vol}(\mathcal{B})^{1/2}} \int_{\mathcal{B}} e^{ik \cdot \gamma} \phi_m(k, x) dk \quad 13.43$$

Si può facilmente verificare che le funzioni di Wannier appartengono a $L^2(R^d)$, che

$$\int_{R^d} |w_m(x)|^2 dx = \frac{1}{\text{vol}(\mathcal{B})} \int_{\mathcal{B}} |\phi_m(k, x)|^2 dk dx \quad 13.44$$

e che le funzioni di Wannier $w_m(x)$ e $w_m(x + \gamma)$ sono ortogonali se le funzioni $\phi_m(k, x)$ sono scelte avere norma in $L^2(W)$ indipendente da k .

La proprietà più importante della funzioni di Wannier è la loro *localizzabilità*.

Dal Teorema 13.10 si vede che il comportamento di $\phi_m(k, x)$ come funzione di k si riflette in proprietà locali della corrispondente funzione di Wannier.

In particolare si ha

a)

Se $\sum_{\gamma \in \Gamma} \|w_m\|_{L^2(\mathcal{W}+\gamma)} < \infty$ allora $\phi_m(k, x)$ è una funzione continua su T^* a valori in $L^2(\mathcal{W})$

b)

$\|w_m\|_{L^2(\mathcal{W}+\gamma)}$ decade per $\gamma \rightarrow \infty$ più rapidamente di ogni potenza di $|\gamma|^{-1}$ se e solo se $\phi_m(k, \cdot)$ è di classe C^∞ come funzione su T^* a valori in $L^2(\mathcal{W})$.

c)

$\|w_m\|_{L^2(\mathcal{W}+\gamma)}$ decade esponenzialmente se e solo se $\phi_m(k, \cdot)$ è analitica come funzione su T^* a valori in $L^2(\mathcal{W})$.

Da questo segue che nel caso in cui *due bande si attraversano* (l'autovalore $\lambda_m(k)$ diventa degenere per qualche valore di k) ci possono essere delle difficoltà nella continuazione (come funzione regolare) dell'autovalore e soprattutto della corrispondente autofunzione.

In questo caso è più conveniente utilizzare funzioni di Wannier *associate ad una banda* (anzichè ad un singolo autovalore).

Un sistema di Wannier $\{w_1, \dots, w_m\}$ associato ad una banda B composta da funzioni di Bloch è per definizione una famiglia ortogonale di funzioni che hanno la proprietà che le loro traslate w_{i,γ_k} per i generatori γ_k della cella di Wigner-Seitz sono mutuamente ortogonali

$$\langle w_{i,\gamma}, w_{k,\gamma'} \rangle = \delta_{i,k} \delta_{\gamma,\gamma'}$$

e il proiettore sulla banda B si può scrivere come

$$P_B = \sum_{i=1}^m \sum_{\gamma \in \Gamma} |w_{i,\gamma}\rangle \langle w_{i,\gamma}|$$

dove m è il numero di elementi nella banda.

E' importante sapere sotto quali condizioni è possibile trovare un sistema di Wannier composto da funzioni localizzate esponenzialmente.

Se $d = 1$ è sempre possibile scegliere funzioni di Bloch che sono analitiche (nei quasi momenti) e quindi trovare funzioni di Wannier che sono localizzate esponenzialmente [Ko59].

Per $d \geq 2$ e $m = 1$ l'esistenza di funzioni di Wannier localizzate esponenzialmente è stata dimostrata da Nenciu [Ne83] sotto l'ipotesi di simmetria per inversione del tempo (coniugazione complessa e riflessione rispetto al centro della cella elementare).

Una dimostrazione alternativa (e più costruttiva) è contenuta in [HS99].

Una semplificazione viene dal fatto [Gr57] che l'esistenza di funzioni di Bloch continue è equivalente all'esistenza di funzioni di Bloch *analitiche* (spesso a questo ci si riferisce parlando di *principio di Oka*). Questo significa che l'esistenza di funzioni di Bloch continue implica, attraverso teoremi di tipo Paley-Wiener, l'esistenza di funzioni di Wannier localizzate esponenzialmente.

Per $m \geq 2$ Thouless [Th84] ha notato che vi sono *ostruzioni di natura topologica* all'esistenza di funzioni di Wannier localizzate esponenzialmente.

Tali funzioni non possono esistere se non si annulla la prima classe di Chern c_1 del fibrato che ha come base la cella di Brillouin, identificata con il toro T^* , e come fibra lo spazio vettoriale generato dalle funzioni di Bloch (la condizione è necessaria *ma non sufficiente*).

Ricordiamo brevemente la definizione delle classi di Chern (o numeri di Chern) [Ch46]. Per una breve introduzione si può consultare [Jo05].

I rappresentanti delle classi di Chern $\{c_n\}$ di un fibrato vettoriale \mathcal{V} di rango complesso m con base una varietà liscia \mathcal{M} sono dati dai *polinomi caratteristici* della forma di curvatura Ω di \mathcal{V} definiti come coefficienti della serie formale in potenze di t della funzione

$$\det \left(I - i \frac{it\Omega}{2\pi} \right) = \sum_k c_k(\mathcal{V}) t^k, \quad \Omega \equiv d\omega + \frac{1}{2}\omega \wedge \omega$$

dove abbiamo indicato con ω una 1-forma di connessione su \mathcal{M} .

Le classi di Chern sono classi di comologia, che non variano se alla forma si aggiunge un differenziale esatto.

Questo implica che esse non dipendono dalla scelta di una connessione su \mathcal{M} .

Se il fibrato è banale (diffeomorfo a $\mathcal{M} \times \mathcal{V}$) si ha $c_k = 0 \forall k > 0$ (il reciproco non è vero in generale).

Un caso speciale importante è quello in cui \mathcal{V} è un fibrato di rette ($m = 1$). In questo caso la sola classe di Chern non nulla è c_1 .

Poiché l'esistenza di funzioni di Wannier localizzate esponenzialmente è equivalente al fatto che il fibrato di Bloch sia banale, la condizione $c_1 = 0$ è necessaria (ma in generale non sufficiente) per la loro esistenza.

Simon [Si83] e Nenciu [Ne83] hanno notato che una condizione che assicura $c_1 = 0$ è la presenza di simmetria per inversione temporale. Si noti che la presenza di un campo magnetico distrugge questa simmetria.

Utilizzando questo risultato Panati [Pa07] ha dimostrato che il fibrato di Bloch è banale (è isomorfo a un fibrato prodotto della spazio base per lo spazio delle fibre) in assenza di campo magnetico per ogni valore di m se $d \leq 3$.

Ricordiamo che m è numero di funzioni di Bloch nella fibra e d è la dimensione dello spazio.

Questo risultato copre la dimensione fisica ($d = 3$) ma ad esempio non il caso in cui sia presente un campo esterno periodico nel tempo, caso in cui la cella elementare ha dimensione 4.

La limitazione nelle dimensioni dello spazio base è connessa con la classificazione dei fibrati vettoriali [Pe59]; si ha $c_j = 0$ se $2j > d$.

Nota 13.2

I risultati che abbiamo citato sono validi in assenza di campo magnetico. La presenza di un campo magnetico modifica la topologia del fibrato di Bloch e lo rende *in generale non banale*.

Tuttavia se il campo magnetico è sufficientemente debole si può far uso della teoria delle perturbazioni regolari per dimostrare [Ne91] che il fibrato è banale se lo è in assenza di campo magnetico (poiché i numeri di Chern sono numeri interi, una piccola perturbazione non li può alterare).

Nel caso di campi magnetici forti i risultati conosciuti sono pochi.

Nel limite in cui il campo magnetico è molto grande (e costante) un'analisi dello spettro è stata fatta da Landau e poi da Hofstadter.



Iniziamo con una discussione del caso in cui un autovalore rimane isolato per ogni valore di $k \in \mathcal{B}$.

Dobbiamo trovare una sezione analitica (o differenziabile) del fibrato di dimensione complessa uno su T^* delle soluzioni di $(H(k) - \lambda_m(k)I)u = 0$ in $L^2(\mathcal{W})$.

Se tale sezione esiste, il fibrato è *banale* (isomorfo al prodotto topologico $T^* \times C$). L'ostruzione a che questo avvenga è puramente topologica.

Per vedere questo, notiamo che se l'autovalore $\lambda_m(k)$ rimane isolato per ogni valore di k la teoria delle perturbazioni regolari garantisce che esso si può estendere ad un piccolo intorno di T^* in C^d come funzione analitica e quindi l'intero fibrato può essere esteso come fibrato analitico Λ_m^a

$$\Lambda_m^a = \cup_z \ker (H_k - \lambda_j(k)), \quad z = e^{ik}, \quad |\Im k| < a. \quad 13.45$$

Proposizione 13.12

Il fibrato Λ_m su T^* è topologicamente banale se e solo se il fibrato analitico Λ_m^a è banale come fibrato analitico (l'isomorfismo con il fibrato prodotto può essere realizzato con trasformazioni analitiche)



La dimostrazione di questa proposizione segue da un teorema di Grauert ([G57])

Dobbiamo quindi solo analizzare le possibili ostruzioni topologiche; se queste non esistono, è possibile scegliere le funzioni di Bloch in modo che formino un fibrato analitico.

Abbiamo visto che questo implica che le funzioni di Wannier possono essere scelte avere un decadimento esponenziale e quindi possono essere utilizzate per descrivere proprietà *locali* del cristallo.

Le ostruzioni topologiche sono frequenti in geometria. Ad esempio è un'ostruzione topologica che impedisce di avere un segmento orientato su un anello di Moebius o un campo vettoriale senza zeri che sia tangente ad una sfera in dimensione tre.

Nello studio di potenziali periodici la possibilità di un'ostruzione topologica è dovuta al fatto che la cella elementare non è topologicamente banale (è diffeomorfa a un toro).

Nel caso delle funzioni di Bloch l'ostruzione topologica all'esistenza di funzioni di Wannier localizzate è assente nel caso in cui l'autovalore $\lambda_m(k)$ al variare di k è semplice e non interseca altri autovalori. Si ha infatti

Teorema 13.13 (Nenciu)

Se $\lambda_m(k)$ è una famiglia analitica che non interseca alcun altro autovalore di $H(k)$ allora il fibrato Λ_k^g per piccoli valori di $\Im k$ è banale in senso analitico.

Esiste quindi un sistema ortonormale completo di funzioni di Wannier $w_m(x)$ che decadono esponenzialmente e tali che per ogni $\gamma \in \Gamma$ le funzioni $w_{m,\gamma} \equiv w_m(x - \gamma)$ sono mutuamente ortogonali.

◇

Per la dimostrazione si può vedere [Ne83].

Il teorema, con la stessa dimostrazione, vale per hamiltoniane più generali che siano operatori autoaggiunti L strettamente ellittici periodici a coefficienti reali (questo esclude ad esempio la presenza di campo magnetico).

Notiamo che, se i coefficienti sono reali, e se $\phi_\lambda(k, x)$ è un'autofunzione di H all'autovalore (reale) λ con quasi-momento k , allora $\bar{\phi}_\lambda(k, x)$ è un'autofunzione allo stesso valore di energia e con quasi-momento $-k$ (in terminologia fisica, questo corrisponde a una trasformazione che inverte l'asse dei tempi).

La dimostrazione di Nenciu utilizza in modo essenziale questa proprietà.

Nel caso in cui esista una collezione di $m > 1$ bande che sia separata dal resto dello spettro ma al suo interno ammetta intersezioni, indichiamo con S l'unione di queste bande.

L'intero spazio di Hilbert si decompone in una somma diretta, invariante per evoluzione temporale, $\mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_S^\perp$ dove \mathcal{H}_S è l'unione dei sottospazi che corrispondono alle bande contenute in S .

Una funzione $\psi \in \mathcal{H}_S$ corrisponde sotto la trasformazione di Bloch-Floquet, a una famiglia di funzioni, parametrizzate da $k \in B$, che per ciascun k appartengono al sottospazio spettrale $\mathcal{H}_{S,k}$ dell'operatore di Floquet corrispondente a S .

Corrispondentemente definiamo *funzione di Wannier generalizzata* ogni funzione in R^d che può essere rappresentata nella forma

$$w(x) = \frac{1}{\text{vol}(\mathcal{B})} \int_{\mathcal{B}} e^{ik \cdot x} \phi(k, x) dk \quad 13.46$$

dove $\phi(k, \cdot) \in \mathcal{H}_{S,k}$.

Possiamo chiederci se esista una famiglia di m funzioni di Wannier generalizzate w_j , $j = 1, \dots, m$, ciascuna con decadimento esponenziale, tali che insieme alle loro traslate sul reticolo Γ formino un sistema ortogonale completo nel sottospazio \mathcal{H}_S .

E' naturale considerare, invece delle autofunzioni di Bloch (o equivalentemente il loro proiettori) i proiettori sull'insieme di autofunzioni associate alla banda S

$$P_S(k) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_k} (\zeta I - H_k)^{-1} d\zeta \quad 13.47$$

dove per ogni valore di k , C_k è un circuito chiuso che racchiude gli autovalori che appartengono a S . In (13.47) possiamo estendere k a un piccolo intorno complesso di R^d .

Procedendo come nel caso $m = 1$, possiamo costruire adesso il fibrato vettoriale (di dimensione m) su un intorno complesso Ω_a di R^d

$$\Lambda_S = \cup_{z \in \Omega_a} P_S(z)(L^2(\mathcal{W})) \quad 13.48$$

Con queste notazioni e queste ipotesi si ottiene

Teorema 13.14

Condizione necessaria e sufficiente per l'esistenza di m funzioni di Wannier generalizzate che insieme alle loro traslate sul reticolo Γ formino un sistema ortonormale completo in \mathcal{H}_S e che siano esponenzialmente localizzate, è che il fibrato Λ_S sia topologicamente banale.

◇

Per la dimostrazione si può vedere il libro di P. Kuchment citato in bibliografia generale.

L'estensione del teorema di Nenciu a casi più generali presenta nuovi problemi. E' elementare la dimostrazione che il fibrato è topologicamente (e quindi analiticamente) banale se esiste una famiglia di m funzioni di Wannier generalizzate $w_n(x)$ che insieme alle loro traslate sul reticolo formano un sistema ortonormale completo e che soddisfano

$$\sum_{\gamma \in \Gamma} \|w_n\|_{L^2(W+\gamma)} < \infty$$

Sotto quest'ipotesi quindi esiste un insieme completo di funzioni di Wannier con decadimento esponenziale.

Nota 13.3.

Il reciproco non è necessariamente vero. Recentemente G. Panati [P07] ha dimostrato che la banalità del fibrato di Bloch in dimensione $d \leq 3$ sotto l'ipotesi che la hamiltoniana sia un operatore ellittico autoaggiunto con coefficienti reali (e quindi invariante per riflessione temporale).

Quest'ultima condizione è necessaria; la condizione $d \leq 3$ è utilizzata nella dimostrazione attraverso proprietà delle rappresentazioni di $O(3)$.

P. Kuchment ha dimostrato che se m è il numero di bande contenute in S e S è separato dal resto dello spettro, esiste sempre un numero $M \geq m$ tale che esistono M funzioni di Wannier che decadono esponenzialmente e che, insieme alle loro traslate per Γ formano un sistema completo di funzioni in \mathcal{H}_S (nel senso che l'insieme delle loro combinazioni lineari finite è denso in \mathcal{K}_S).

Questo è dovuto essenzialmente al fatto che, per un teorema di Whitney, è sempre possibile immergere in modo analitico una superficie di dimensione m in R^M qualunque sia il suo grado topologico pur di prendere M abbastanza grande.

Nel nostro caso, questo risultato viene utilizzato per ogni punto $k \in \mathcal{B}$ e il risultato viene raccordato con continuità su tutto \mathcal{B} . ♣

Consideriamo ora un modello di solido nell'ambito delle approssimazione fatte; questo modello va sotto il nome di *modello a un elettrone* perché considera gli elettroni come non interagenti.

Il reticolo degli atomi verrà considerato riempire tutto R^3 e quindi infinito è il numero di atomi e quindi di elettroni (consideriamo un sistema neutro).

Converrà introdurre la nozione di *densità degli stati* e tener conto del fatto che gli elettroni soddisfano la statistica di Fermi. Questo porterà a definire la *superficie di Fermi*.

Sia \mathcal{B} la cella di Brillouin e per $k \in \mathcal{B}$ siano $E_n(k)$ gli autovalori di H_k ordinati in ordine crescente.

La *misura di densità di stati* ρ è la misura su R definita da

$$\mu(E) \equiv \rho((-\infty, E]) = \frac{2}{\nu(\mathcal{B})} \sum_n \nu(\{k \in \mathcal{B} : E_n(k) \leq E\}) \quad 13.49$$

dove abbiamo indicato con ν la misura di Lebesgue.

Poiché $\lim_{n \rightarrow \infty} E_n(k) = +\infty$ uniformemente in \mathcal{B} risulta che $\rho(-\infty, E] < \infty$ e da un'analisi più accurata segue che ρ è assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue. Chiameremo *densità degli stati* la derivata di Radon-Nikodym $\frac{d\rho}{dE}$.

Nella teoria dello stato solido il sistema è un cristallo di dimensioni macroscopiche; poiché si considerano effetti che non sono legati alla taglia specifica (purché

macroscopica) gli effetti di bordo vengono assunti trascurabili ed è pertanto conveniente modellizzare il sistema come un reticolo infinito.

Questo richiede un controllo del processo di limite.

Se \mathcal{W} è la cella di Wigner-Seitz, sia \mathcal{W}_N , $N \in \mathbb{Z}$ la cella di volume $N^3\nu(\mathcal{W})$ ottenuta dilatando in modo omogeneo di un fattore N le dimensioni lineari (consideriamo un solido in dimensione 3). Sia H_m l'operatore $-\Delta_P + V$ in $L^2(\mathcal{W}_N)$ definito con condizioni periodiche al bordo. Sia P_N la proiezione spettrale di H_N e definiamo

$$\rho_N(-\infty, E] = 2 \frac{\dim P_N(-\infty, E]}{N^3} \quad 13.50$$

(notare che il fattore 2 proviene dal fatto che l'elettrone ha spin $\frac{1}{2}$ e d'altra parte la hamiltoniana non dipende dallo spin, quindi tutti i livelli sono doppiamente degeneri).

Si ha il seguente teorema che connette la densità degli stati dei sistemi descritti dalle hamiltoniane H_k con una densità degli stati associata al sistema infinito. Notare la sostanziale identità con il procedimento di *limite termodinamico* che fa passare da quantità riferite ai sistemi microscopici a quantità riferite a sistemi macroscopici.

Teorema 13. 15

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \rho_N = \rho$$

◇

Cenni di dimostrazione

Il punto cruciale nella dimostrazione sta nel dimostrare che ogni funzione su \mathcal{W}_N con condizioni periodiche al bordo ristretto alle celle elementari contenute in \mathcal{W}_N definisce N^3 funzioni sulle singole celle con condizioni al bordo tali che la differenza di fase è un multiplo di $e^{i\frac{2\pi}{N}}$.

Se $\mathcal{K} = \left\{ \sum_{i=1}^3 t_i \alpha_i, 0 \leq t_i \leq 1 \right\}$, rispetto alla decomposizione dello spazio di Hilbert $L^2(\mathcal{W}_N) = \oplus_{\beta_1, \beta_2, \beta_3=0}^{N-1} L^2(\mathcal{W})$ la hamiltoniana H_m ha la forma

$$H_N = \sum_{\beta_1, \beta_2, \beta_3=0}^{N-1} H \left(\frac{\beta_1}{N} \alpha_1 + \frac{\beta_2}{N} \alpha_2 + \frac{\beta_3}{N} \alpha_3 \right) \quad 13.51$$

dove abbiamo indicato con $H(k)$ le fibre dell'operatore H che abbiamo costruito nel volume infinito. Conseguentemente

$$\rho_N(-\infty, E] = \frac{2}{N^3} N^o \{n; \beta_i \in \{0, 1, \dots, N-1\} : E_N \left(\sum_j \frac{\beta_j \alpha_j}{N} \right) \leq E\} \quad 13.52$$

Poiché la funzione E è continua, questa espressione converge a $\rho(\infty, E]$ per $m \rightarrow \infty$.

◇

Se il cristallo si trova in equilibrio a temperatura zero (così che il suo stato d'equilibrio corrisponde a numero di occupazione uno per tutti i livelli d'energia sotto una soglia) il *livello di Fermi* E_F corrisponde al massimo numero E_F tale che $E > E_F$ implica $\rho(E) = 0$.

Corrispondentemente si dice *superficie di Fermi* il sottoinsieme delle k della zona di Brillouin tale che $E(k) = E(F)$.

In questo schema descrittivo, un materiale cristallino è interpretato come isolante se il livello di Fermi si colloca in un gap tra due bande, mentre è interpretato come conduttore se il livello di Fermi sta all'interno di una banda, che viene detta *banda di conduzione*.

Questo interpretazione è coerente con i dati sperimentali, ma la sua giustificazione *microscopica* si ritiene ora che risieda nella struttura dell'autofunzione dello stato di massima energia tra quelli occupati (stato al livello di Fermi) e nella sua deformazione in presenza di un piccolo campo elettrico esterno (la deformazione viene calcolata al primo ordine della teoria delle perturbazioni).

Nota 13.4

Questa struttura è stata analizzata in qualche dettaglio da W.Kohn [Ko64]; per modelli interpretativi più recenti si può vedere ad esempio [VK93], [Re94], [RS99], [SWM00].

Tali modelli ascrivono la polarizzazione elettrica e la conduzione al fatto che la struttura dell'autofunzione dello stato fondamentale di un sistema di elettroni sia diversa nel caso di conduttori rispetto al caso di isolanti.

Nel caso di isolanti sono presenti nella decomposizione in onde di Bloch più stati e questo comporta la possibilità di utilizzare una base di Wannier localizzata.

Ne segue che la deformazione prodotta dal campo elettrico nel caso degli isolanti è localizzata essenzialmente in un intorno del bordo mentre nel caso dei conduttori è estesa a tutto il materiale.

Nel caso dei conduttori la modificazione dà origine a fenomeni di trasporto e alla corrente elettrica; analiticamente questo si riflette nel fatto che il tensore di localizzazione (il valor medio nello stato fondamentale del prodotto $x_k x_h$) diverge nel limite termodinamico nel caso di conduttori mentre converge ad un limite finito nel caso dei materiali isolanti.

Una trattazione analoga può essere fatta per il fenomeno della polarizzazione elettrica. Alla diversa struttura di localizzazione delle funzioni di Wannier, sia all'interno che vicino alla superficie viene attribuita la magnetizzazione orbitale dei solidi cristallini isolanti (vedere ad esempio [TCVR05]).

Si può notare che in questo caso è necessario far uso della base costituita dalle funzioni di Wannier perché il vettore $x \times \dot{x}$ è mal definito nella base di Bloch.

Questa interessante analisi tuttavia non è stata ancor sviluppata sufficientemente dal punto di vista matematico.



Consideriamo ora brevemente il caso in cui il cristallo sia sottoposto ad un campo magnetico. Trattiamo innanzitutto il caso in cui il campo magnetico M è uniforme.

Nell'ipotesi che l'interazione tra elettroni sia trascurabile il moto di un elettrone in un reticolo cristallino $\Gamma \in R^3$ è descritto dalla hamiltoniana, in unità $\hbar = 2m = \frac{e}{2} = 1$

$$H_0 = (-i\nabla_x + M \times x)^2 + V(x) \quad x \in R^3 \quad 13.53$$

dove $V(x)$ è un potenziale reale periodico rispetto a Γ . Assumeremo sempre che la funzione V sia regolare (ad esempio di classe C^∞).

Indichiamo con e_1, e_2, e_3 la base che genera Γ e con $\{e_i^*\}$ la base duale (che genera la cella di Brillouin \mathcal{B}) così che $(e_i, e_j^*) = 2\pi\delta_{i,j}$.

L'operatore H_0 è autoaggiunto e commuta con le *traslazioni magnetiche* T_γ (introdotte da Zak) che abbiamo descritto brevemente nell'appendice del Capitolo 3, date da

$$(T_\gamma f)(x) = e^{i(M \times x, \gamma)} f(x - \gamma). \quad 13.54$$

Assumiamo che per ogni scelta di i, j si abbia $(M, e_j \times e_i) \in 4\pi Z$ (il flusso del campo magnetico attraverso ogni faccia del reticolo è un multiplo di 4π).

Sotto quest'ipotesi $\mathcal{G} \equiv \{T_\gamma, \gamma \in \Gamma\}$ è un gruppo abeliano e possiamo ridurre H_0 sui caratteri di \mathcal{G} ponendo

$$\mathcal{D}_k \equiv \{\phi \in H_{loc}^2(R^3), T_\gamma \phi = e^{-i(k, \gamma)} \phi, \gamma \in \Gamma \quad k \in \mathcal{G}^*\} \quad 13.55$$

Utilizzando la decomposizione di $L^2(R^3)$ come integrale diretto su \mathcal{G}^* si vede che l'operatore $H_0(k)$ che appare nella decomposizione è un operatore autoaggiunto con risolvente compatta.

Denotiamo con $E_1(k) \leq E_2(k) \leq \dots$ i suoi autovalori; lo spettro di H_0 sarà dunque

$$\cup_{k \in \mathcal{G}^*} \cup_{m=1}^{\infty} E_m(k). \quad 13.56$$

Notiamo che per tutti i valori di m si ha

$$\gamma^* \in \Gamma^* \implies E_m(k + \gamma^*) = E_m(k). \quad 13.57$$

Dalla teoria delle perturbazioni regolari si ha che $E_m(k)$ è una funzione continua in k e analitica nell'intorno dei punti k per i quali vale la disuguaglianza stretta

$$E_{m-1}(k) < E_m(k) < E_{m+1}(k) \quad 13.58$$

La regione $E_m(k)$ al variare di $k \in \mathcal{G}^*$ è la m^{ma} *banda magnetica*.

Nel seguito sarà conveniente utilizzare su ciascuna fibra anzichè $H_0(k)$ l'operatore

$$\tilde{H}_0(k) = e^{-ikx} H_0(k) e^{ikx} = (-i\nabla_x + M \times x + k)^2 \quad 13.59$$

con dominio

$$\mathcal{D}(\tilde{\mathcal{H}}_\epsilon(\|\)) = \{\phi \in H_{loc}^2(\mathbb{R}^3), T_\gamma \phi = \phi, \gamma \in \Gamma\}$$

Considereremo \mathcal{D} come sottospazio di $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Analizziamo il caso in cui al solido cristallino, soggetto al campo magnetico uniforme, sia applicato anche un campo elettrico *lentamente variabile nello spazio* e diretto nel piano $\Pi_{\hat{M}}$ perpendicolare al versore \hat{M} . Questo dà luogo ad un corrente nel piano $\Pi_{\hat{M}}$ (effetto Hall).

Consideriamo sempre l'approssimazione in cui gli elettroni non interagiscono fra loro.

La hamiltoniana H_ϵ del sistema sarà

$$H_\epsilon = (-i\nabla + M \times x + A(\epsilon x))^2 + V(x) + W(\epsilon x) \quad 13.60$$

dove W, A_1, A_2, A_3 sono funzioni lisce limitate con tutte le loro derivate.

Per la nostra analisi adottiamo un metodo multiscale, e introduciamo una variabile indipendente y . Alla fini dell'analisi formale porremo $y = \epsilon x$.

Introduciamo conseguentemente un nuova hamiltoniana

$$\tilde{H}_\epsilon(x, y) = (-i\nabla_x - i\epsilon\nabla_y + M \times x + A(y))^2 + V(x) + W(y) \quad 13.61$$

Ad ogni funzione $\phi(x, y)$ su $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ associamo la funzione $w(x) \equiv \phi(x, \epsilon x)$.

Il *metodo adiabatico* si fonda sulla seguente identità

$$(\tilde{H}_\epsilon) \phi(x, \epsilon x) = (H_\epsilon w)(x) \quad 13.62$$

Questa identità permette di risolvere l'equazione di Schrödinger per H_ϵ uniformemente in ϵ risolvendo l'equazione per \tilde{H}_ϵ uniformemente in y, ϵ .

A questo fine faremo le seguenti ipotesi

a)

La banda magnetica m^{ma} che desideriamo analizzare è isolata (soddisfa cioè (13.58)) per ogni valore di k .

b)

Per ogni $\gamma^* \in \Gamma^*$ risulta

$$\phi(k + \gamma^*, x) = e^{i(\gamma^* \cdot x)} \phi(k, x). \quad 13.63$$

c)

Il flusso del campo magnetico M attraverso ogni faccia della cella elementare è un multiplo intero di 4π .

Nota 13.5

Le ipotesi fatte hanno le conseguenze seguenti.

- Sotto l'ipotesi *a*) possiamo scegliere le autofunzioni $\phi_m(x, k)$ associate a $E_m(k)$ come funzioni analitiche in k a valori in \mathcal{D} .

- Il ruolo dell'ipotesi *b*) è quello di garantire che il fibrato di dimensione complessa 1 sul toro R^3/Γ^* dato dalla funzione di Bloch (a valori complessi) $\phi(x, k)$ sia banale (riconducibile con una trasformazione continua ad un fibrato prodotto).

Notiamo che in generale si ha

$$\phi(x, k + \gamma^*) = e^{i(\gamma^* \cdot x + \theta(k, \gamma^*))} \phi(x, k)$$

dove $\theta(\gamma^*, k)$ è una funzione a valore reale determinata dalla struttura del fibrato.

Poiché il gruppo di gauge è abeliano, si ha

$$\theta(k, \sum_i m_i e_i^*) = \sum_i m_i \theta(k, e_i^*) \equiv c_2 \quad 13.64$$

La costante c_2 rappresenta la seconda classe di Chern del fibrato.

Il ruolo dell'ipotesi *c*) è di rendere nulla la costante c_2 .

Notare che, come abbiamo visto nel Capitolo 7, l'introduzione del campo magnetico altera l'algebra di Weyl introducendo una 2-forma e potrebbe quindi alterare la seconda classe di Chern.

Se questo termine non è nullo, la derivata rispetto a k della funzione $\phi(x, k)$ non è ovunque limitata nella cella elementare, e non sono soddisfatte le condizioni di regolarità che utilizzeremo in seguito nell'analisi multiscale.



Nota 13.6

La condizione *c*) può essere sostituita con la condizione *c'*)

Il flusso del campo magnetico attraverso ogni faccia della cella elementare è un multiplo razionale di 4π . Infatti, poiché le considerazioni che abbiamo fatto si riferiscono al limite in cui il sistema copre l'intero reticolo, possiamo considerare una cella elementare i cui lati siano multipli della cella di Wigner-Seitz per un fattore N arbitrario.

Se è soddisfatta *c'*), scegliendo opportunamente N il flusso del campo magnetico attraverso ogni faccia della nuova cella soddisfa *c*).



Sotto le ipotesi *a*), *b*), *c*) è possibile utilizzare il metodo adiabatico (multiscale), che prevede uno sviluppo della hamiltoniana in serie asintotica in ϵ , e quindi per iterazione descrive il moto dell'elettrone.

Si ha infatti

Teorema 13.16 [Te03]

Per ogni intero N esistono operatori $P_N : L^2(R^3) \rightarrow L^2(\mathcal{W} \times R^3)$ che sono approssimativamente isometrici (cioè $P_N^* P_N = I + O(\epsilon^{N+1})$) e possono essere scritti nella forma $P_N = F_0 + \epsilon F_1 + \dots + \epsilon^N F_N$ con F_n limitati per ogni n . Esiste inoltre una hamiltoniana *effettiva*

$$H_{eff}^N = h_0 + \epsilon h_1 + \epsilon^2 h_2 + \dots + \epsilon^N h_N \quad 13.65$$

tali che risulti, per ogni $u_x \in S(R^3)$; $x \in \Omega$

$$\tilde{H}_\epsilon(P_N(x, y, \epsilon D_y, \epsilon)u_x - P_N(x, y, \epsilon D_y \epsilon)H_{eff}^N(y, D_y)u_x(y)) = O(\epsilon^{N+1})$$

Inoltre se poniamo $\Pi_N = P_N P_N^*$ risulta che Π_N è una proiezione approssimata $\Pi_N^* = \Pi_N$, $\Pi_N^2 = \Pi_N + O(\epsilon^{N+1})$ ed è tale che

$$\Pi_N \tilde{H}_\epsilon \phi = \tilde{H}_\epsilon \Pi_N \phi + O(\epsilon^{N+1}) \quad 13.66$$

per $\phi \in \mathcal{S}$. ◇

Nota 13.7

Le hamiltoniane effettive *non dipendono da* $x \in \mathcal{W}$ (ma da x dipendono gli operatori P_N). La funzione d'onda dell'elettrone è $\phi(x) = u_x(\epsilon x)$. Notiamo anche che all'ordine zero si ha

$$h_0(y, k) = E_m(k + A(y)) + W(y) \quad 13.67$$

La formula (13.67) prende in nome di *sostituzione di Peierls*; notare che il termine $E_m(k + A(y))$ che *sostituisce* l'energia cinetica è un operatore pseudo-differenziale (la sua trasformata di Fourier non è un polinomio).



Cenni di dimostrazione del Teorema 13.16

Definiamo come prima $\tilde{H}_\epsilon(k)$

$$\tilde{H}_\epsilon(k) \equiv e^{-ik \cdot x} \tilde{H}_\epsilon e^{ik \cdot x} = (i\nabla_x - i\epsilon \nabla_y + M \times x + A(y) + k)^2 + V(x) + W(y) \quad 13.68$$

e notiamo che

$$\tilde{H}_\epsilon P_N(x, y, \epsilon D_y, \epsilon)u = \left(\frac{1}{2\pi\epsilon}\right)^3 \int e^{i\frac{(k, (y-z))}{\epsilon}} \tilde{H}_\epsilon(k) P_N(x, y, k, \epsilon)u(z) dk$$

Sviluppando in ϵ si ottiene

$$\tilde{H}_\epsilon(k) = \tilde{H}_0(k) + \epsilon \tilde{H}_1(k) + \epsilon^2 \tilde{H}_2(k) + \dots$$

dove

$$\tilde{H}_0(k) = H_0(k + A(y)) + W(y) \quad \tilde{H}_2(k) = -\Delta_y$$

$$\tilde{H}_1(k) = -2i[-i\nabla_x + M \times x + k + A(y)] \cdot \nabla_y - i\nabla_y \cdot A(y) \quad 13.69$$

A questo punto la dimostrazione di (13.66) e (13.67) viene effettuata per iterazione, e questo procedimento provvede anche la costruzione esplicita dei simboli F_0, F_1, \dots e delle hamiltoniane h_0, h_1, \dots

Nel corso della dimostrazione utilizziamo l'alternativa di Fredholm; il termine arbitrario viene scelto in modo tale da soddisfare (13.66).

Diamo solo il primo passo di questo procedimento.

Poniamo

$$h_0(y, k) = E_m(k + A(y)) + W(y), \quad F_0(x, y, k) = \phi(x, k + A(y))$$

Tenendo conto dei termini fino al prim'ordine incluso dobbiamo avere

$$(\tilde{H}_0(k) - h_0)F_1 = -i \frac{\partial F_0}{\partial k} \cdot \frac{\partial h_0}{\partial y} - (\tilde{H}_1(k) - h_1)F_0 \quad 13.70$$

Per l'alternativa di Fredholm condizione necessaria per avere una soluzione unica della (13.70) è che il termine a destra nella (13.70) sia ortogonale al nucleo dell'operatore (pseudodifferenziale) $\tilde{H}_0(k) - h_0$ che indichiamo con n_K^0 .

Questo porta a scegliere $h_1(y, k)$ e dà $F_1(x, y, k)$ a meno di un elemento del nucleo. Il conseguente risultato per F_1 è

$$F_1(x, y, k) = (\tilde{H}_0(k) - h_0)^{-1} \left[-i \frac{\partial F_0}{\partial k} \frac{\partial h_0}{\partial y} + h_1 F_0 - \tilde{H}_1(k) F_0 \right] + a_1(y, k) n_K^0 \quad 13.71$$

dove $a_1(y, k)$ è una funzione indeterminata. Questa funzione viene determinata dalla condizione $\Pi_N \Pi_N^* = I + O(\epsilon^{N+1})$.

Qui diamo solo l'espressione per H_1

$$h_1(y, k) = \frac{1}{2i} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial F_1(k + A(y))}{\partial k} \right] - (L \cdot \nabla \times A(y) - i \langle \phi(\cdot, k + A(y)), \dot{\phi}(\cdot, k + A(y)) \rangle) \quad 13.72$$

dove

$$E_1(k) \equiv \langle F_0(\cdot, y, k), \tilde{H}_1(k) F_0(\cdot, y, k) \rangle$$

$$L = \Im \left[\left\langle M(y, k) \frac{\partial \phi}{\partial k_2}, \frac{\partial \phi}{\partial k_3} \right\rangle, \left\langle M(y, k) \frac{\partial \phi}{\partial k_3}, \frac{\partial \phi}{\partial k_1} \right\rangle, \left\langle M(y, k) \frac{\partial \phi}{\partial k_1}, \frac{\partial \phi}{\partial k_2} \right\rangle \right] \quad 13.73$$

$$M(y, k) = \tilde{H}_0(k) - h_0(y, k)$$

$$\dot{\phi}(x, k + A(y)) = \frac{\partial \phi(x, k + A(y))}{\partial y} \cdot \dot{y} + \frac{\partial \phi(x, k + A(y))}{\partial k} \cdot \dot{k}$$

$$\dot{y} = \frac{\partial (E_m(k + A(y)) + W(y))}{\partial k}, \quad \dot{k} = - \frac{\partial (E_m(k + A(y)) + W(y))}{\partial y}$$

Si può notare che il termine $i \langle \phi(\cdot, k + A(y)), \dot{\phi}(\cdot, k + A(y)) \rangle$ è precisamente il termine che genera la fase geometrica di Berry, che abbiamo brevemente discusso in appendice al Capitolo 3.

♡

Conviene anche notare la forma che questo risultato assume in rappresentazione di Heisenberg.

Per un osservabile $B(y, \epsilon D_y)$ l'evoluzione è data da

$$i\epsilon \frac{dB}{ds} = [H_{\text{eff}}, B] \quad 13.74$$

(il coefficiente ϵ origina dalla differenza della scala dei tempi tipico dell'approssimazione adiabatica).

Il simbolo $b(y, \xi)$ dell'operatore B nella sua dipendenza dal tempo segue le traiettorie del sistema classico

$$\dot{y} = \frac{\partial H_{\text{eff}}}{\partial \xi}, \quad \dot{\xi} = \frac{\partial H_{\text{eff}}}{\partial y},$$

con $y \in R^3$, $\xi \in \Omega$.

Nota 13.8

Si possono ancora modificare gli operatori Π_N con l'aggiunta di termini che differiscono da Π_N per un operatore limitato di norma $O(\epsilon^{N+1})$ in modo tale da ottenere *proiettori* π_N (gli operatori essendo limitati, la serie formale che si ottiene converge per ϵ abbastanza piccolo).

La serie formale che definisce H_N può essere modificata in modo tale che il gruppo generato da \hat{H}_{eff}^N lasci invariante Π_N (il corrispondente spazio è così un *sottospazio invariante*).

Come sempre nella teoria delle perturbazioni regolari, il proiettore viene modificato all'ordine uno in ϵ ma l'energia viene modificata solo all'ordine due.

Pertanto h_1 ha la forma (13.72).

♣

Un'analisi della teoria delle perturbazioni per interazione con un piccolo campo magnetico si trova in [Ne02].

Per una presentazione del metodo adiabatico, con particolare riferimento all'operatore di Schrödinger in potenziali periodici e in presenza di deboli campi elettromagnetici esterni si può utilmente consultare il libro di S.Teufel [Te03].

APPENDICE 13A: OSTRUZIONI TOPOLOGICHE PER CAMPI MAGNETICI COSTANTI

Descriviamo brevemente in questa Appendice gli effetti topologici che entrano, nella descrizione degli stati di un elettrone costretto a muoversi nel piano Π ,

sottoposto ad un ad un potenziale V periodico e sotto l'azione di un campo magnetico uniforme B perpendicolare al piano Π .

L'equazione di Schoedinger stazionaria per il sistema è

$$H\phi \equiv \left(\frac{1}{2m}(p - eA)^2 + U(x) \right) \phi = E\phi \quad p = -i\hbar\nabla \quad 13A.1$$

dove A è un potenziale vettore tale che risulti $\text{rot}A = B$.

Per semplicità consideriamo il caso in cui il reticolo di Bravais bidimensionale Γ è generato da due vettori $a, b \in R^2$; sia $\lambda = na + mb$, $n, m \in Z$ un vettore nel reticolo.

Definiamo (vedere Capitolo 3) l'operatore di traslazione magnetica

$$T_\lambda(B) = T_\lambda e^{-i\frac{e}{2\hbar}(B \wedge x) \cdot \lambda} \quad x \in R^2 \quad 13A.2$$

dove T_λ è l'operatore di traslazione nel reticolo di Bravais Γ .

Si ha

$$T_\lambda T_\sigma = e^{2\pi i \Phi} T_\sigma T_\lambda \quad 13A.3$$

dove abbiamo indicato con $\Phi = \frac{eB}{h} ab$ il flusso del campo magnetico attraverso la cella elementare.

Consideriamo il caso Φ razionale, $\Phi = \frac{p}{q}$ dove gli interi p e q sono relativamente primi e $p < q$.

Considerando un nuovo reticolo di Bravais Γ_B definito da vettori $R' = n(qa) + b$, e corrispondentemente una nuova cella elementare (la *cella elementare magnetica per il campo razionale B*) si possono diagonalizzare simultaneamente la hamiltoniana e le traslazioni magnetiche \hat{T}_B relative al nuovo reticolo Γ_B .

Gli autovettori di \hat{T}_{qa} e di \hat{T}_b sono rispettivamente $e^{ik_1 qa}$ e $e^{ik_2 b}$ dove k_i sono *quasi-momenti* con range $0 \leq k_1 \leq \frac{2\pi}{qa}$ e $0 \leq k_2 \leq \frac{2\pi}{b}$

Le corrispondenti autofunzioni possono essere scritte in forma di Bloch.

$$\psi_{k_1, k_2}^\alpha(x, y) = e^{i(k_1 x + k_2 y)} u_{k_1, k_2}^\alpha(x, y). \quad 13A.4$$

Nella (13A.4) α è un indice di banda e le funzioni $u_{k_1, k_2}^\alpha(x, y)$ soddisfano

$$u_{k_1, k_2}^\alpha(x + qa, y) = e^{-i\frac{\pi p y}{b}} u_{k_1, k_2}^\alpha(x, y) \quad u_{k_1, k_2}^\alpha(x, y + b) = e^{i\pi\frac{px}{qa}} u_{k_1, k_2}^\alpha(x, y) \quad 13A.5$$

Gli autovalori $E(k_1, k_2)$ variano con continuità rispetto a k_1, k_2 e l'insieme di valori presi al variare in una cella di Brillouin formano un *sottobanda magnetica*.

Per una trasformazione di gauge $A \rightarrow A + \nabla\phi$ si ha $\psi \rightarrow e^{-i\frac{e\phi}{\hbar}}$; ne segue che ha significato fisico solamente il cambiamento della fase della funzione d'onda sull'intero contorno della cella elementare magnetica.

Questo cambiamento di fase risulta essere $2\pi p$.

Ponendo

$$u_{k_1, k_2}^\alpha(x, y) = |u_{k_1, k_2}^\alpha(x, y)| e^{i\theta_{k_1, k_2}(x, y)}$$

si ottiene

$$p = \frac{1}{2\pi} \int dl \frac{d\theta_{k_1, k_2}(x, y)}{dl}$$

dove l'integrale è eseguito in senso orario lungo il contorno della cella elementare magnetica.

L'intero p è una *proprietà topologica della funzione di Bloch*.

Notiamo che la funzione di Bloch nella cella magnetica elementare ha un'altra proprietà topologica relativa alla conduttanza di Hall; non tratteremo qui la connessione tra queste due proprietà.

Abbiamo considerato la funzione di Bloch $u_{k_1, k_2}(x, y)$ ma, poiché le funzioni d'onda sono definite dagli stati a meno di una fase, è conveniente considerare un fibrato principale $U(1)$ sulla cella magnetica (che ricordiamo ha la topologia di un toro T^2).

Un fibrato principale $U(1)$ su T^2 è definito da funzioni di transizione tra domini che si sovrappongono parzialmente. Ciascuno di questi domini è topologicamente banale (contraibile).

Il toro bidimensionale può essere ricoperto da quattro tali domini che possono essere scelti corrispondere ad intorni W_j , $j = 1, \dots, 4$, dei quattro vertici nella rappresentazione del toro T^2 come quadrato (omettendo le identificazioni ai bordi).

In ciascuno di questi domini la funzione di Bloch può essere scelta continua (e anche C^∞).

Assumiamo che la funzione di Bloch che consideriamo non si annulli nella regioni di sovrapposizione (questo può essere sempre ottenuto perché i suoi zeri sono punti isolati).

In ciascuno dei quattro domini il fibrato principale che stiamo considerando è pertanto banale (isomorfo a $W_j \times U(1)$).

Poiché i W_j sono contraibili è possibile scegliere la fase così da avere che

$$e^{i\theta_j(k_1, k_2)} \equiv \frac{u_{k_1, k_2}(x, y)}{|u_{k_1, k_2}(x, y)|} \quad 13A.6$$

è liscia in ciascun W_j (tranne eventualmente negli zeri di $u_{k_1, k_2}(x, y)$).

Ma in generale non è possibile continuare queste funzioni in modo da avere *continuità globale* per θ_j , avere cioè una convenzione di fase continua su tutto W_j .

Indichiamo con $U_{i, j}$ le *funzioni di transizione* nelle regioni di sovrapposizione $W_j \cap W_i$

$$U_{i, j} \equiv e^{i(\theta_j(k_1, k_2) - \theta_i(k_1, k_2))} \equiv e^{iF_{j, i}(k_1, k_2)} \quad 13A.7$$

Il fibrato principale è completamente caratterizzato da queste funzioni di transizione.

Per trascrivere il formalismo utilizzando la forma differenziali ricordiamo che si possono scrivere le uno-forme di connessione ω (i cui coefficienti in una base scelta provvedono la funzioni di transizione) come

$$\omega = g^{-1}Ag + g^{-1}dg = A + id\xi, \quad A \equiv a_\mu(k_1, k_2)dk_\mu \quad a(k_1, k_2) = (u_{k_1, k_2}, \frac{\partial}{\partial k_\mu} u_{k_1, k_2})$$

13A.8

dove $g \equiv e^{i\xi} \in U(1)$.

E' facile vedere che questa scelta provvede un forma di connessione. E' sufficiente notare che ω è invariante per la trasformazione di gauge

$$u'_{k_1, k_2}(x, y) = e^{if(k_1, k_2)} u_{k_1, k_2}(x, y)$$

dove $f(k_1, k_2)$ è un'arbitraria funzione liscia.

La curvatura di questa connessione è

$$F = dA = \frac{\partial a_\mu}{\partial k_\nu} dk_\nu \wedge dk_\mu$$

13A.9

Per definizione la sua *prima forma di Chern* è $\frac{i}{2\pi}F$. L'integrale su T^2 è il *primo numero di Chern*.

$$c_1 = \frac{i}{2\pi} \int_{T^2} F = \frac{i}{2\pi} \int_{T^2} \frac{\partial a_\mu}{\partial k_\nu} dk_\nu \wedge dk_\mu$$

13A.10

Questo numero è sempre un intero e dipende solo dalle proprietà topologiche del fibrato principale costruito con la funzioni di Bloch in ciascun intorno W_j , $j = 1, \dots, 4$.

Se non è nullo costituisce un'ostruzione alla possibilità di costruire funzioni di Bloch che siano continue sull'intero toro T^2 .

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [Ch46] S.S. Chern, *Characteristic classes of Hermitian Manifolds.*, Annals of Mathematics 47 (1946) 85-121
- [Gr57] H. Grauert, Math. Annalen 133, (1957), 139-159
- [HS89] B.Helffer, J.Sjostrand, *Equation de Schrödinger avec champ magnetique et equation de Harper*, Lecture notes in Physics, vol. 345, 118-197 Springer 1989
- [Jo05] J.Jost, *Riemannian Geometry and Geometric Analysis* ,, Springer Verl. 2005
- [Ko64] W.Kohn, *Theory of insulating state*, Phys. Rev. 13A (1964)

-
- [KU93] P.Kuchment, *Floquet Theory for Partial Differential Operators*, Birkhauser, Basel 1993
- [Ne83] G. Nenciu, *Comm. Math. Phys.* 91 (1983) pg 81-85.
- [Ne02] G. Nenciu, *Journal of Mathematical Physics* 43 (2002) 1273-1298
- [Pa07] G.Panati, *Annales Institut Henry Poincaré* 8 (2007) 995-1011
- [PW34] R. Paley, N. Wiener, *Fourier Transformations in complex domains*, AMS New York 1934
- [RS87] M.Reed, B.Simon, *Methods of Mathematical Physics* vol 4, Theorem XIII, 85.
- [Re94] R.Resta, *Rev. Mod. Phys.* 66 (1994) 899-914
- [RS99] R.Resta, S.Sorella *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 370-378
- [SWM00] I.Souza, T.Wilkems, R.M.Martin *Phys. Rev. B* 62 (2000) 1666-1680
- [TCVR05] T.Thonhauser, D.Ceresoli, D.Vanderbilt, R.Resta, *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005) 137205-11
- [Te03] S. Teufel, *Adiabatic Perturbation Theory in Quantum Mechanics*, Lecture Notes in Mathematics 1821, Springer Verlag, 2003.
- [VK93] Vanderbilt, R.D. King-Smith, *Phys. Rev. B* 48, (1993) 4442-4456
- [Wi78] C.Wilcox, *Theory of Bloch waves*, *J. Analyse Mathématique*, 33 (1978) pg 146-167

CAPITOLO 14
 FORMULA DI LIE-TROTTER E FEYNMAN-KAC.
 PROCESSO DI WIENER.

14.1 FORMULA DI LIE-TROTTER

Siano A e B matrici $N \times N$. La formula di Lie per il prodotto di esponenziali afferma che

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} \right)^n$$

Questa formula è di facile verifica mediante lo sviluppo degli esponenziali.

Un modo più elegante per dimostrarla consiste nel sostituire A con tA e B con tB , notare che l'identità è vera per $t = 0$ e dimostrare che la derivata del termine a sinistra e la derivata del termine a destra soddisfano la stessa equazione con la stessa condizione a $t = 0$.

È anche facile estendere questa formula al caso in cui A e B siano operatori chiusi e limitati in uno spazio di Hilbert o su uno spazio di Banach, con la stessa dimostrazione.

Trotter ha dato una estensione al caso in cui A , B e la chiusura di $A + B$ sono generatori di semigrupp di classe C^0 .

Qui consideriamo due casi, in ordine crescente di difficoltà, per operatori su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} .

Teorema 14.1

Siano A e B operatori autoaggiunti e sia $A+B$ autoaggiunto con $D(A+B) = D(A) \cap D(B)$ denso in \mathcal{H} . Allora vale

i)

$$e^{-it(A+B)} = s - \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-i\frac{tA}{n}} e^{-i\frac{tB}{n}})^n \quad t \in \mathbb{R} \quad 14.1$$

uniformemente per t in un compatto di \mathbb{R} .

Se inoltre A e B sono limitati inferiormente, vale

ii)

$$e^{-t(A+B)} = s - \lim_{n \rightarrow \infty} \left[e^{-\frac{tA}{n}} e^{-\frac{tB}{n}} \right]^n \quad t \in \mathbb{R}^+ \quad 14.2$$

La convergenza è uniforme per t in ogni compatto di \mathbb{R}^+ .

◇

Dimostrazione

Dimostriamo il punto i). La dimostrazione del punto ii) è analoga, tenendo presente che, se A e B sono autoaggiunti e limitati dal basso e se t appartiene ad ogni compatto di R^+ , gli operatori e^{-tA} , e^{-tB} , $e^{-t(A+B)}$ sono limitati uniformemente in t .

Siccome gli operatori e^{-itA} ed e^{-itB} sono limitati, è sufficiente dimostrare la (14.1) su un insieme denso, che scegliamo essere $D(A) \cap D(B)$.

Per ϕ in \mathcal{H} e per ogni $s > 0$ vale l'identità

$$\frac{1}{s} (e^{-isA} e^{-isB} - I) \phi = \frac{1}{s} (e^{-isA} - I) \phi + \frac{1}{s} e^{-isA} (e^{-isB} - I) \phi$$

Poiché $\phi \in D(A) \cap D(B)$ il termine a destra converge, quando $s \rightarrow 0$, a $-i(A+B)\phi$.

Inoltre

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{s} (e^{-is(A+B)} - I) \phi = -i(A+B)\phi$$

Pertanto si ha per $s \rightarrow 0$

$$\frac{1}{s} (e^{-isA} e^{-isB} - e^{-is(A+B)}) \phi \rightarrow 0 \quad \phi \in D(A) \cap D(B) \quad 14.3$$

D'altra parte

$$[e^{-iAt/n} e^{-itB/n}]^n - e^{-it(A+B)} \phi =$$

$$\sum_{k=0}^{n-1} [e^{-iAt/n} e^{-itB/n}]^k [e^{-iAt/n} e^{-itB/n} - e^{-it(A+B)/n}] e^{-it(n-k-1)(A+B)/n} \phi$$

Moltiplicando e dividendo per t si ottiene

$$\left\| [e^{-itA/n} e^{-itB/n}]^n \phi - e^{-it(A+B)} \phi \right\|_2 \leq$$

$$|t| \max_{k=0, \dots, (n-1)} (t/n)^{-1} \left\| [e^{-iAt/n} e^{-itB/n} - e^{-it(A+B)/n}] \phi((n-k-1)t/n) \right\|_2$$

con $\phi(r) \equiv e^{-ir(A+B)} \phi$.

L'applicazione $r \rightarrow \phi(r)$ è continua da $[0, t]$ allo spazio di Banach $D(A) \cap D(B)$ con la norma del grafico dell'operatore $A+B$, quindi $\{\phi(r) | r < t\}$ è limitato, quindi compatto nell'insieme chiuso $D(A+B)$ (con la norma del grafico). La convergenza puntuale assicurata dalla 14.3 si estende quindi a convergenza uniforme su tutto l'insieme $\phi(r) \equiv e^{-ir(A+B)} \phi, r < t$. La formula risulta quindi provata in $D(A) \cap D(B)$.

Poiché l'insieme $D(A) \cap D(B)$ è denso in \mathcal{H} e gli operatori considerati sono equilimitati il Teorema 14.1 è dimostrato.

♡

Nota 14.1

La convergenza per compattezza non provvede alcuna stima dell'errore che si compie fermandosi all'ordine n_0 nell'operazione di limite.



Notiamo che nella dimostrazione del Teorema 14.1 *abbiamo fatto uso essenziale* dell'ipotesi $D(A+B) = D(A) \cap D(B)$ (quindi $D(A) \cap D(B)$ è un insieme chiuso nella norma del grafico).

In generale si ha solo che $D(A) \cap D(B)$ è un sottoinsieme aperto di $D(A+B)$. Quindi l'insieme $\{\phi(r) \mid |r| < |t|\}$ è in generale un insieme aperto e l'argomento di compattezza non può essere utilizzato.

Le conclusioni del Teorema 14.1 valgono anche nel caso in cui l'operatore $A+B$ sia *essenzialmente autoaggiunto* su $D(A) \cap D(B)$, ma la dimostrazione diventa molto più laboriosa.

Teorema 14.2

Siano A e B operatori autoaggiunti, e sia $A+B$ essenzialmente autoaggiunto su $D(A) \cap D(B)$. Allora vale

i)

$$e^{-it(A+B)} = s - \lim (e^{-i\frac{tA}{n}} e^{-i\frac{tB}{n}})^n \quad t \in R, \quad 14.5$$

uniformemente sui compatti di R .

Se inoltre A e B sono limitati inferiormente, vale

ii)

$$e^{-t(A+B)} = s - \lim (e^{-\frac{tA}{n}} e^{-\frac{tB}{n}})^n \quad t \in R^+ \quad 14.6$$

con convergenza uniforme in ogni compatto di R^+ .



Dimostrazione

Anche in questo caso dimostreremo solamente il punto i). La dimostrazione del punto ii) è analoga.

La dimostrazione verrà fatta in una successione di passi.

Passo 1

Sia $\{C_1, C_2, \dots, C_n\}$ una successione di operatori limitati con $\Im C_n < 0$, e sia C un operatore autoaggiunto tale che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} C_n \phi = C \phi$$

per ϕ in un dominio \tilde{D} denso in $D(C)$ nella norma del grafico.

Sotto queste condizioni si ha

$$s - \lim_{n \rightarrow \infty} (C_n - z)^{-1} = (C - z)^{-1} \quad 14.7$$

per $\Im z > 0$

◇

Dimostrazione

Notiamo che se $\Im z > 0$ la successione $C_n - z$ ha un inverso limitato uniformemente in n ed è quindi sufficiente dimostrare

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (C_n - z)^{-1} \phi = (C - z)^{-1} \phi$$

per ϕ in un insieme denso di \mathcal{H} , che sceglieremo essere $(C - z)D(C)$.

Posto $\phi = (C - z)\psi$ si ha

$$\begin{aligned} \|[(C_n - z)^{-1} - (C - z)^{-1}]\phi\|_2 &= \|(C_n - z)^{-1}(C_n - z)\psi + (C_n - z)^{-1}(C - C_n)\psi - \psi\|_2 \\ &= \|(C_n - z)^{-1}(C - C_n)\psi\|_2 \leq (\Im z)^{-1} \|(C - C_n)\psi\|_2 \rightarrow_{n \rightarrow \infty} 0 \end{aligned}$$

♡

Passo 2

Sotto le ipotesi del passo 1, vale

$$s - \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-itC_n} = e^{-itC} \tag{14.8}$$

uniformemente sui compatti in R^+ .

◇

Dimostrazione

Fissato $\psi \in \mathcal{H}$ notiamo che il sottospazio generato da ψ mediante funzioni limitate di C_n e C è separabile.

Pertanto possiamo assumere che \mathcal{H} sia separabile.

Se $t \geq 0$ si ha $|e^{-itC_n}| \leq 1$. Questo segue da

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |e^{-itC_n} \phi|^2 &= (e^{-itC_n} \phi, \frac{t}{i}(C_n - C_n^*)e^{-itC_n} \phi) = \\ &= |t| (e^{-itC_n} \phi, \Im(C_n)e^{-itC_n} \phi) \leq 0 \end{aligned} \tag{14.9}$$

Pertanto è sufficiente dimostrare il passo 2 per $\phi \in \tilde{D}$.

Diamo la dimostrazione per assurdo.

Supponiamo che per $\phi \in \tilde{D}$ non valga

$$\lim_{n \rightarrow \infty} e^{-itC_n} \phi = e^{-itC} \phi$$

Allora esistono successioni crescenti $\{n'\}$, $t(n') > 0$ tali che

$$\left| e^{-it(n')C_{n'}} \phi - e^{-it(n')C} \phi \right| \geq \delta > 0$$

Questo implica che esiste una successione $\{n', l_{n'} \in \mathcal{H} \mid |l_{n'}| = 1\}$ tale che

$$|(l'_{n'}, e^{-it(n')C_{n'}} \phi) - (l'_{n'}, e^{-it(n')C} \phi)| \geq \delta$$

Poiché la sfera unitaria in \mathcal{H} è debolmente compatta, esiste una sottosuccessione, che indicheremo ancora con $\{n'\}$, tale che $l_{n'} \rightarrow l$, $|l| \leq 1$ e

$$|(l_{n'}, e^{-it(n')C_{n'}} \phi) - (l, e^{-it(n')C} \phi)| \geq \delta$$

per n sufficientemente grande.

Poiché

$$\{(l_{n'}, e^{-itC_{n'}} \phi)\}$$

è una successione equilimitata in $t \geq 0$ per il lemma di Ascoli-Arzelà esiste un'altra sottosuccessione, che indichiamo sempre con $\{n'\}$, tale che

$$(l_{n'}, e^{-it(n')C} \phi) \rightarrow F(t)$$

uniformemente sui compatti di $t > 0$, dove $F(t)$ è una funzione continua in t .

Pertanto

$$|F(t(n')) - (l, e^{-it(n')C} \phi)| \geq \delta$$

Poiché queste funzioni sono continue, la relazione vale in tutto un intorno di $t(n')$.

Consideriamo ora la trasformata di Laplace di $F(t)$.

Dal teorema di convergenza dominata di Lebesgue e dal risultato del Passo 1

$$\begin{aligned} \int_0^\infty F(z) e^{itz} dt &= \lim_{k \rightarrow \infty} \int_0^\infty (l_{n'}, e^{-it(n')C_{n'}} \phi) e^{izt} dz = \\ (-i) \lim_{n \rightarrow \infty} (l_{n'}, (C_{n'} - z)^{-1} \phi) &= -i(l, (C - z)\phi) \quad \Im z > 0 \end{aligned} \quad 14.10$$

Pertanto le trasformate di Laplace di $F(t)$ e di $(l, e^{-itC} \phi)$ coincidono, contro l'ipotesi fatta.

♡

Passo 3

Sia T un operatore di contrazione ($|T| \leq 1$).

Allora

$$t \rightarrow e^{t(T-1)}$$

è un semigruppato di contrazione. Inoltre

$$\|(e^{n(T-1)} - T^n)\phi\| \leq \sqrt{n} \|(T - I)\phi\|, \quad n \geq 1 \quad \forall \phi \in H \quad 14.11$$

◇

Dimostrazione

Poiché T è limitato, $e^{t(T-I)}$ è continuo. È una contrazione perché

$$\|e^{t(T-I)}\| = e^{-t} \left\| \sum_n \frac{t^n T^n}{n!} \right\| \leq e^{-t} e^{t\|T\|} \leq 1 \quad 14.12$$

Inoltre si ha

$$e^{n(T-I)} - T^n = e^n \sum_0^\infty \frac{n^k}{k!} (T^k - T^n)$$

e quindi, utilizzando $\|(T^j - I)\phi\| = \|\sum T^k (T - I)\phi\| \leq j\|(T - I)\phi\|$

$$\|(e^{n(T-I)} - T^n)\phi\| \leq e^{-n} \left[\sum_0^\infty \frac{n^k}{k!} |n - k| \right] \|(T - I)\phi\| \quad 14.13$$

D'altra parte

$$e^{-n} \sum \frac{n^k}{k!} |n - k| \leq e^{-n} \left(\sum \frac{n^k}{k!} \right)^{\frac{1}{2}} = e^{-n/2} (n^2 e^k - (2n-1)ne^n + n^2 e^n)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{n} \quad 14.14$$

♡

Dopo questi passi possiamo completare la dimostrazione del Teorema 14.2.

Sia

$$F(t) = e^{-itA} e^{-itB}, \quad t > 0$$

$$C_n = i \left(\frac{t}{n} \right)^{-1} \left(F \left(\frac{t}{n} \right) - I \right), \quad C = A + B \quad 14.15$$

Allora per $\phi \in D(A) \cap D(B)$

$$C_n \phi = i \left(\frac{t}{n} \right)^{-1} \left[e^{-i\frac{tA}{n}} e^{-i\frac{tB}{n}} - I \right] \phi =$$

$$ie^{-i\frac{tA}{n}} \left[\left(\frac{t}{n} \right)^{-1} (e^{-i\frac{tB}{n}} - I) \phi + i \left(\frac{t}{n} \right)^{-1} (e^{-i\frac{tA}{n}} - I) \phi \right]$$

$$\rightarrow (A + B)\phi = C\phi, \quad n \rightarrow \infty$$

Dai Passi 1 e 2 si ottiene

$$s - \lim_{n \rightarrow \infty} e^{n(F(\frac{t}{n}) - I)} = s - \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-itC_n} = e^{-itC}$$

D'altra parte, per il Passo 3,

$$\left\| \left[e^{n(F(\frac{t}{n}) - I)} - F \left(\frac{t}{n} \right)^n \right] \phi \right\|_2 \leq \sqrt{n} \left\| \left(F \left(\frac{t}{n} \right) - I \right) \phi \right\|_2 = \frac{t}{\sqrt{n}} \|C_n \phi\|_2 \quad 14.16$$

Combinando questi risultati

$$\begin{aligned} \left\| \left[e^{-it(A+B)} - e^{-it\frac{A}{n}} e^{-it\frac{B}{n}} \right] \phi \right\|_2 &= \left\| \left[e^{-itC} - F \left(\frac{t}{n} \right)^n \right] \phi \right\|_2 \\ &\leq \left\| (e^{-itC} - e^{-itC_n}) \phi \right\|_2 + \frac{t}{\sqrt{n}} \|C_n \phi\|_2 \end{aligned}$$

Questa espressione tende a zero quando $n \rightarrow \infty$.

Questo completa la dimostrazione del teorema 14.2.

♡

Va notato anche qui che non si hanno stime dell'errore che si compie fermandosi ad n finito perché i passi 1 e 2 utilizzano risultati di compattezza e pertanto non provvedono tali stime.

Utilizzeremo ora la formula di Trotter-Kato per ottenere (formalmente) la formula di Feynman dell'integrale sui cammini.

Come vedremo in seguito, l'espressione che otterremo è *solamente formale*, perché una teoria dell'integrazione non esiste sullo spazio dei cammini per i quali hanno significato le espressioni che otterremo nel limite.

Vedremo successivamente come porre rimedio a questo stato di cose definendo opportunamente un nuovo spazio di misura.

Consideriamo per il momento un potenziale $V(x)$ che sia una funzione continua e limitata, e indichiamo con H_0 l'operatore $-\frac{1}{2}\Delta$.

Abbiamo visto nel capitolo 10 che l'operatore $H_0 + V(x)$ è autoaggiunto e ha dominio $D(H_0)$.

La forma esplicita del nucleo di e^{-itH_0} è

$$G_0(x-y; t) = (2i\pi t)^{-d/2} e^{-\frac{|x-y|^2}{4it}} \tag{14.17}$$

Segue dal teorema 14.2 che per ogni $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ esiste in $L^2(\mathbb{R}^d)$ il limite forte

$$(e^{-itH} \phi)(x) = s\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{2i\pi t}{N} \right)^{-\frac{Nd}{2}} \int e^{-iS_N(x_1, \dots, x_N, t)} \phi_0(x_N) dx_1 \dots dx_N \tag{14.18}$$

dove

$$S_N(x, x_1, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N \frac{|x_{i-1} - x_i|^2}{2\frac{t}{N}} + \sum_{i=1}^N V(x_i) \frac{t}{N} \quad x_0 \equiv x \tag{14.19}$$

Abbiamo utilizzato la notazione

$$\int_{\mathbb{R}^d} G(x) d^N x = \lim_{R \rightarrow \infty} \int \dots \int_{|x_i| \leq R} G(x) d^N x.$$

Poniamo $x_k = x(t_k)$ e consideriamo le N -ple $(x_1, t_1), \dots, (x_N, t_N)$, $t_n = \frac{nt}{N}$ come cammini rettilinei a tratti.

Possiamo interpretare $S_N(x_1, \dots, x_N, t)$ come integrale dell'azione corrispondente al caso libero sul cammino considerato e il suo integrale su x_1, \dots, x_N come integrale su questa classe di cammini.

Notiamo infatti che

$$\frac{|x_{i-1} - x_i|^2}{2\left(\frac{t}{N}\right)} = \frac{|x_{i-1} - x_i|^2}{2\left(\frac{t}{N}\right)^2} \frac{t}{N}$$

e che $\frac{|x_{i-1} - x_i|^2}{2\left(\frac{t}{N}\right)^2}$ è l'energia cinetica associata all'unica soluzione delle equazioni del moto libero che corrisponde al dato iniziale x_{i-1}, t_{i-1} e al dato finale x_i, t_i . Quindi, per $V = 0$, la funzione S_N è l'integrale dell'azione classica per il moto libero lungo la traiettoria considerata e per $V \neq 0$ differisce da questo per un termine additivo che si configura come una modificazione impulsiva che ha luogo ai tempi t_1, \dots, t_N .

Saremmo dunque portati a interpretare il limite a destra in (14.18) come integrale dell'azione su una classe limite di cammini.

Se questa interpretazione sia possibile, quale possa essere questa classe di traiettorie e quale sia la misura che deve essere utilizzata nell'integrazione sono domande a cui *non è possibile rispondere con un'analisi formale*.

Notiamo che i cammini utilizzati nel caso $N < +\infty$ sono continui e differenziabili a tratti ma che l'insieme dei punti in cui la derivata a destra differisce dalla derivata a sinistra diventa denso in $[0, t]$ quando $N \rightarrow \infty$.

Non è pertanto ovvio che i cammini limite possano essere scelti differenziabili o quantomeno che esista una misura limite tale che i cammini assolutamente continui formino un insieme misurabile (così che risulti definito l'integrale del quadrato della velocità).

Consideriamo solo il caso $d = 1$ e denotiamo con Γ_1 la classe di funzioni (cammini) assolutamente continue.

Procedendo in modo formale, per ciascun cammino $\gamma \in \Gamma_1$ identifichiamo la variabile x_k con il valore che la coordinata assume al tempo $\frac{tk}{N}$ su γ .

Per ciascuna traiettoria in Γ_1 con $\gamma(t) = x$, $\gamma(0) = x'$ abbiamo *formalmente* (se il limite esiste) da (4.18)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} -iS_N(x', x_1, \dots, x_{N-1}, x, t) dx_1 \dots dx_{N-1} = -iS(\gamma_{x,x',t})$$

$$S(\gamma_{x,x',t}) = \int_0^t \left[\frac{1}{2} |\dot{x}(s)|^2 + V(x(s)) \right]_{x(\cdot) \in \gamma} ds$$

(notare che per cammini differenziabili $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{x(t)}{t} = \dot{x}$)

Notiamo che $S(\gamma_{x,x'};t)$ è l'azione classica valutata tra il tempo 0 ed il tempo t lungo la traiettoria $\gamma_{x,x'};t$. Indicando con $d\gamma$ il un prodotto (formale) continuo di copie della misura di Lebesgue potremmo quindi scrivere il nucleo integrale $(e^{itH})(x,x')$ come integrale su traiettorie γ assolutamente continue nell'intervallo $[0,t]$

$$e^{-itH}(x,x') = C \int_{\gamma \in \Gamma_1, \gamma(0)=x', \gamma(t)=x} e^{-iS(\gamma_{x,x'};t)} d\gamma \quad 14.20$$

dove C è una costante di normalizzazione.

La scrittura (14.20) è *puramente formale*. Il coefficiente $\left(\frac{2i\pi t}{N}\right)^{-\frac{N}{2}}$ in (14.18) diverge quando $N \rightarrow \infty$ e la misura $d\gamma$ resta imprecisata (la misura di Lebesgue su R non è una misura di probabilità e quindi la misura definita formalmente su R^∞ come prodotto diretto continuo della misura di Lebesgue *non è una misura regolare*).

Pertanto, mentre il limite indicato esiste certamente come nucleo integrale di un operatore, grazie al teorema di Lie-Trotter, l'interpretazione del limite come integrale su una classe di traiettorie è mal definita e, se non presa con le dovute precauzioni, è fonte di errori.

La difficoltà maggiore sta nella definizione di una misura limite; il termine $e^{-iS_N(x_1, \dots, x_{N-1})}$ è fortemente oscillante (nella classe di traiettorie considerata) e per ottenere un limite bisogna far ricorso alla teoria della fase stazionaria in spazi a dimensione crescente.

Un'idea naturale consiste nell'utilizzare teoremi di fase stazionaria per il caso libero, in cui le integrazioni sono gaussiane (ma con argomento immaginario) e trattare il caso $V \neq 0$ con metodi di punto fisso.

Si può dimostrare [A04] che per alcune classi di potenziali, in particolare per quelli che sono trasformata di Fourier di una misura, è possibile dare significato al limite indicato a destra nell'equazione (14.18) come limite di integrali oscillanti.

Questo permette di interpretare l'integrale (14.20) nel senso di integrali di Fresnel nell'ambito di una teoria di fase stazionaria in uno spazio di dimensione infinito.

In ogni caso, *non trattandosi di una teoria della misura*, non valgono i teoremi di convergenza dominata di Lebesgue ed è difficile dare stime e confrontare i risultati per diverse scelte del potenziale V senza utilizzare l'espressione in termini di nuclei di operatori.

Per completezza riproduciamo qui, in forma più estesa, i commenti che abbiamo fatto nell'Appendice C al Capitolo 8.

Se $t - s$ è sufficientemente piccolo (dati x e y) *l'integrale di Azione*

$$S(t, s; x, y) = \int_s^t L\left(\tau, x(\tau), \frac{dx(\tau)}{d\tau}\right) d\tau$$

(con $L(t, q, q')$ lagrangiana del sistema) è stazionario in corrispondenza all'orbita classica (in generale unica) che congiunge y ad x in un tempo $t - s$.

Si può dimostrare [M51], [F80] che, se il potenziale è sufficientemente regolare, il propagatore (soluzione fondamentale) $U(t, s)$ soddisfa, per ciascuna funzione $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$

$$U(t, s)\phi(x) = \int_{\mathbb{R}^d} \lim_{\delta \rightarrow 0} I(\delta; t, s; x, y)\phi(y)dy$$

dove il limite è inteso nel senso delle distribuzioni, $\{t_j\}$ provvede una partizione dell'intervallo $[s, t]$ in parti uguali di lunghezza $\delta = \frac{t-s}{N}$ e

$$I(\delta; t, s; x, y) = \prod_{j=1}^{N-1} \left[\frac{-i}{2\pi(t_j - t_{j-1})} \right]^{\frac{d}{2}} \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} \prod_i^{N-1} a(t_j, t_{j-1}; x_j, x_{j-1}) \\ \exp\{-iS(t_j, t_{j-1}; x_j, x_{j-1})\} \prod_1^{N-1} dx_j$$

La funzione a è definita da

$$a(t, s; x(t), x(s)) = \exp^{-\frac{1}{2} \int_s^t (\tau-s) \Delta_x \omega(\tau, s; x(\tau), y) d\tau}$$

con ω definito da

$$S(t, s; x, y) = \frac{1}{2} \frac{|x-y|^2}{t-s} + (t-s)\omega(t, s; x, y)$$

Questa espressione è ottenuta utilizzando il teorema della fase stazionaria e con una stima dei termini residui.

Notiamo che in ciascun intervallo l'azione S è l'integrale della lagrangiana sulla traiettoria classica corrispondente al potenziale V , ma le traiettorie in intervalli consecutivi non si congiungono in modo differenziabile perché abbiamo scelto condizioni di Dirichlet agli estremi.

L'insieme dei punti di non differenziabilità diventa denso quando $N \rightarrow \infty$ e al tempo stesso la misura limite non esiste.

Tuttavia l'espressione ottenuta ha il vantaggio, rispetto alla (14.18), che per N finito in ciascun intervallo di differenziabilità *viene utilizzata la soluzione dell'equazione classica con potenziale V anziché il moto libero.*

Per questo motivo l'approccio descritto qui sopra, sviluppato soprattutto da Fujiwara [F80] è stato utilizzato con successo nello studio dell'approssimazione semi-classica nel regime di scattering [Y79].

In questo regime, come abbiamo osservato in casi semplici nel Capitolo 3 e preciseremo ulteriormente nei Capitoli 17 e 18, l'evoluzione quantistica della funzione d'onda ha legami più stretti con le soluzioni della dinamica classica e pertanto il metodo delle partizioni di Fujiwara può non risultare così singolare.

Va notato che lo studio del limite semiclassico in regime di scattering può essere fatto anche mediante lo studio della proprietà del nucleo integrale della risolvante $\frac{1}{H-z}$, $\Im z \neq 0$ (anzichè del nucleo di e^{-tH} come viene fatto in questo Capitolo) come integrale su una classe di traiettorie. Questo procedimento porta a dimostrare una *formula di traccia* (Gutzwiller) ma l'argomento esula dagli scopi di questo Capitolo.

Nota 14.2

Esiste una generalizzazione del concetto di integrale che rende possibile, per una conveniente classe di potenziali, la costruzione di funzioni generalizzate (dette talvolta *integrandi di Feynman*) con metodi perturbativi. Questa generalizzazione va sotto il nome di *teoria del rumore bianco* (*white noise analysis*) che è *formalmente* la derivata del moto browniano. La misura μ associata al rumore bianco è introdotta per dualità dalla funzione caratteristica

$$C(f) = e^{-\frac{1}{2}\|f\|_2^2}, \quad f \in \mathcal{S}$$

che viene interpretata come

$$C(f) = \int_{\mathcal{S}'} e^{i(\omega, f)} d\mu(\omega)$$

dove μ è un'opportuna misura su \mathcal{S}' .

Utilizzando lo spazio $L^2(\mathcal{S}', \mu)$ una versione (non la versione introdotta da Wiener) del moto Browniano $B(t, \omega)$ è data da

$$B(t, \omega) = \int_0^t \omega(s) ds.$$

In questo senso il rumore bianco appare come la derivata (distribuzionale) del moto browniano.

Una versione non formale del processo "rumore bianco" [K96] conduce a definire le *distribuzioni di Hida* che diventano così i candidati naturali per essere integrandi di Feynman.

Con questa generalizzazione si può, sotto opportune ipotesi sul potenziale V , fare una continuazione a valori reali del tempo t del nucleo integrale del semigruppone e^{-tH} (cioè considerare il nucleo integrale del gruppo ad un parametro e^{itH}) e analizzare la possibilità di scrivere per una classe di potenziali il gruppo $e^{it(-\Delta+V)}$ come integrale oscillante di tipo Feynman su uno spazio di traiettorie *nello spazio delle fasi classico*.

Noi non discuteremo più oltre questo procedimento. Dettagli possono essere trovati su [HK93], [BK95].



Nota 14.3

Una versione alternativa di integrali oscillanti è stata introdotta in [AH77] come generalizzazione dell'integrale di Fresnel $\int_R e^{\frac{i}{2}x^2} dx$.

Questi integrali possono essere interpretati come integrali di Feynman per un'opportuna classe di potenziali (quelli che sono somma di un termine quadratico positivo e di una funzione che è la trasformata di Fourier a una misura di variazione limitata).

Gli integrali così introdotti non possono essere interpretati come integrali rispetto a una misura complessa (la cui variazione totale sarebbe infinita).

Essi devono essere interpretati come integrali di Riemann impropri, la cui convergenza è dovuta alle oscillazioni dell'integrando, nel senso dell'integrale di Fresnel in R^1

$$\int_R e^{\frac{i}{2}x^2} dx = \sqrt{2\pi}i$$

La teoria iniziata in [AH77] tende a una generalizzazione di questo procedimento per uno spazio di dimensione infinita, provvedendo sotto opportune condizioni un *integrale di Fresnel infinito-dimensionale*.

Se f è la trasformata di Fourier di una misura a valori complessi a variazione limitata su uno spazio di Hilbert separabile \mathcal{H} , la definizione in [AH77] è data per dualità,

$$\int_{\mathcal{H}} f(x) e^{\frac{i}{2\hbar} \|x\|^2} dx \equiv \int_{\mathcal{H}} e^{\frac{i\hbar}{2} \|x\|^2} d\mu_f$$

L'integrale a destra è assolutamente convergente e ben definito come integrale di Lebesgue.

In [AK77] viene dimostrato che in questo modo per potenziali che sono la trasformata di Fourier di una misura a variazione limitata è possibile interpretare l'integrale di Feynman come integrale di Fresnel infinito dimensionale sullo spazio di Hilbert (detto spazio di Cameron) dei cammini con prodotto scalare

$$\langle \gamma_1, \gamma_2 \rangle = \int_0^t \dot{\gamma}_1(s) \dot{\gamma}_2(s) ds$$

dove $\dot{\gamma}$ è la derivata distribuzionale del cammino γ .

Viene anche descritta un'applicazione allo studio del limite semiclassico.

Per un'esposizione dettagliata di questo procedimento rimandiamo a [AH77] e a [M09].



14.2 MISURA DI WIENER

Una formulazione che introduce una misura sulle traiettorie continue (e che può ammettere, in casi favorevoli, un'estensione a dimensione infinita) può essere

ottenuta se si utilizza la formula di Trotter-Kato (14.2) relativa a semigrupp di contrazione .

Questo è dovuto al fatto che il nucleo integrale di e^{-tH_0} ha proprietà di regolarizzazione ed è di tipo positivo.

Questo permette di interpretarlo come *funzione di transizione* per un processo stocastico (il moto Browniano).

La soluzione $u(t, x)$, $x \in R^d$ dell'equazione del calore

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta u, \quad u_{t=0} = u_0$$

per dati iniziali positivi è strettamente positiva per $t \geq 0$ ed è data da

$$u(t, x) = (2\pi t)^{-\frac{d}{2}} \int e^{-\frac{(x-y)^2}{2t}} u(0, y) dy.$$

Wiener ha dimostrato che $u(t, x)$ può essere rappresentato come valor medio del dato iniziale rispetto ad una misura (misura di Wiener) sulle traiettorie *continue* che partono in y al tempo 0 e che si trovano in x al tempo t .

Questa misura individua il *moto Browniano*, un *processo stocastico* che ora descriveremo.

Notiamo che il fatto che le traiettorie considerate siano continue è rilevante perché permette di dare significato a espressioni quali $V(x(t))$.

Variando il processo stocastico in modo opportuno si possono ugualmente rappresentare le soluzioni di $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta u - Vu$ almeno sotto opportune ipotesi sul potenziale $V(x)$.

Da questo si possono anche dedurre proprietà di regolarità della risolvente di $-\Delta + V$.

Tratteremo brevemente questo caso alla fine di questo Capitolo e torneremo in Appendice 14.A e nel Capitolo 19 sul problema della costruzione di misure su spazi di traiettorie (o su distribuzioni nel caso di processi che si svolgono su R^d , $d \geq 2$) mediante semigrupp che preservano la positività.

Dedichiamo una parte di questo capitolo a una breve introduzione alla teoria dei processi stocastici, di cui avremo bisogno per una trattazione, anche elementare, della formula di Feynmann-Kac.

Alcuni elementi di teoria della probabilità, in particolare la determinazioni di *stime a-priori*, verranno dati nell'Appendice 14.A.

Nell'appendice 14.B descriveremo due derivazioni alternative del moto browniano; la prima è la presentazione originale di Wiener, l'altra è la derivazione del moto browniano come limite della passeggiata aleatoria, nello spirito dell'analisi del moto browniano fatta da Einstein.

14.3 VARIABILI CASUALI GAUSSIANE, PROCESSI STOCASTICI

Ricordiamo che una *variabile casuale* (random variable) è una funzione misurabile f su uno spazio di misura di probabilità $(\Omega, \mathcal{M}, \mu)$. Ω è l'insieme dei possibili "eventi elementari", \mathcal{M} è la famiglia dei sottoinsiemi di Ω misurabili (ricordiamo che deve avere la struttura di una σ -algebra, cioè di essere chiusa per unioni e intersezioni numerabili di insiemi) e μ è una misura di probabilità ($\mu(\Omega) = 1$) definita sulla σ -algebra μ .

Se la funzione f è μ -integrabile indichiamo con $E_\mu(f) = \int f d\mu$ la sua media e con $V(f)$ la sua *varianza* definita come $V_\mu(f) = E_\mu(f^2) - (E_\mu(f))^2$.

Notare che $V_\mu(f) \geq 0$.

La variabile casuale f è detta *variabile casuale gaussiana* se la *densità di probabilità* con cui f è distribuita è la distribuzione di Gauss

$$(\sqrt{b\pi})^{-1/2} e^{-\frac{(x-a)^2}{2b}} dx, \quad a \in R, \quad b > 0 \tag{14.21}$$

ovvero se la misura degli insiemi di livello $\{\omega | f(\omega) \leq t\}$ è data da

$$(\sqrt{b\pi})^{-1/2} \int_{-\infty}^t e^{-\frac{(x-a)^2}{2b}} dx, \quad a \in R, \quad b > 0$$

La media (aspettazione) della variabile casuale f è allora data da

$$E(f) = (\sqrt{b\pi})^{-1/2} \int x e^{-\frac{(x-a)^2}{2b}} dx = a$$

e la sua varianza è $\text{Var} f = b$.

Notare che la distribuzione di una variabile gaussiana è *completamente determinata dai due parametri reali* a e b , la sua media e la sua varianza.

Noi *identificheremo sempre* due variabili casuali che abbiano la stessa distribuzione indipendentemente dallo spazio di probabilità $(\Omega, \mathcal{M}, \mu)$ in cui vengono realizzate come funzioni.

Due funzioni misurabili f e g su di uno spazio di misura $(\Omega, \mathcal{M}, \mu)$ rappresentano variabili casuali *indipendenti* se per ogni coppia di insiemi misurabili I e J di R si ha

$$\mu\{\omega | f(\omega) \in I, g(\omega) \in J\} = \mu\{\omega | f(\omega) \in I\} \mu\{\omega | g(\omega) \in J\} \tag{14.22}$$

Nello stesso modo si definisce l'indipendenza di N funzioni misurabili quando si considerano N -ple di funzioni misurabili su uno spazio di misura $(\Omega, \mathcal{M}, \mu)$.

Nel caso di variabili gaussiane f, g , con media nulla (ci si può ricondurre a questo caso sottraendo un'opportuna funzione costante) essere indipendenti è equivalente a soddisfare la condizione

$$E(fg) = 0 \tag{14.23}$$

Nel caso di N variabili gaussiane di media zero, l'essere indipendenti è equivalente al verificarsi di (14.23) per ogni coppia di variabili.

Ricordiamo qui brevemente la definizione di processo stocastico. Una definizione più completa verrà data nel capitolo 19, nel quale tratteremo le forme di Dirichlet.

Definizione 14.1 (processo stocastico in R^d)

Dato uno spazio di misura Ω con insiemi misurabili \mathcal{M} e misura μ la famiglia di variabili casuali ξ_t , $t \geq 0$ definisce un processo stocastico a valori in R^d se

a)

L'applicazione

$$\xi_t : \Omega \rightarrow R^d$$

è μ misurabile $\forall t \in [0, \infty)$

b)

$$\forall \omega \in \Omega, \quad \forall t \in R^+ \quad \xi_t(\omega) \in R^d$$

c)

l'applicazione $(t, \omega) \rightarrow \xi_t(\omega)$ è congiuntamente misurabile (su R^+ si prende la misura indotta dai boreliani).



Notiamo che un processo stocastico può essere definito su qualsiasi spazio topologico X considerato come spazio di misura (anzichè su R^d), ad esempio su uno spazio di funzioni o di distribuzioni.

Questo è importante ad esempio nella trattazione di sistemi a infiniti gradi di libertà.

La σ -algebra naturale è costituita dagli insiemi di Borel di X .

Si fa spesso l'ipotesi che la misura sia di Radon, cioè *localmente finita* (per ogni $x \in X$ esiste un intorno U_x tale che $\mu(U_x) < \infty$) e *stretta (tight)*, per ogni insieme di Borel B vale

$$\mu(B) = \sup_K \{\mu(K), K \subset B\}$$

(K sono gli insiemi compatti.)

In particolare la misura di Gauss in R^d è una misura di Radon.

I processi che analizzeremo sono tutti *processi di Markov*.

Un processo stocastico è detto essere un *Processo di Markov se non ha memoria*

.

La definizione precisa è la seguente.

Sia $T \geq -\infty$. Supponiamo che la famiglia ξ_t sia definita per ogni $t \geq T$.

Indichiamo con $\mathcal{F}_{\leq t}$ la σ -algebra generata dalle variabili casuali ξ_s , $T \leq s \leq t$ e con $\mathcal{F}_{\geq t_1}$, $t_1 \geq t$, la σ -algebra generata dalle variabili casuali ξ_s , $s \geq t_1$

(*generata* significa che è la più piccola σ -algebra che contiene gli insiemi di livello delle variabili casuali indicate) .

Diremo che la collezione di σ -algebre \mathcal{F} costituisce una *filtrazione*.

Ricordiamo che data una σ -algebra \mathcal{F} di funzioni misurabili in uno spazio di probabilità $(\Omega, \mathcal{M}, \mu)$, una sotto σ -algebra \mathcal{G} e una funzione f su Ω integrabile rispetto alla misura μ , il *condizionamento* di f rispetto a \mathcal{G} (indicato con $C_{\mathcal{G}}(f)$) è quella (unica) funzione $f_1 \in \mathcal{G}$ tale che per tutte le g limitate in \mathcal{G} vale

$$\int_{\Omega} f_1 g d\mu = \int_{\Omega} f g d\mu$$

Definizione 14.2 (processo di Markov)

Un processo stocastico $\{\xi_t\}$, $t \in [0, +\infty)$ è detto essere un *processo di Markov* (o equivalentemente possedere la proprietà di Markov) se, per ogni coppia $T \leq \tau < t$ vale la seguente relazione

$$C_{\mathcal{F}_{\leq \tau}}(\xi_t) = C_{\mathcal{F}_{\tau}}(\xi_t), \quad C_{\mathcal{F}_{\leq t}}(\xi_t) = \xi(t)$$

In altre parole, la dipendenza di ξ_t da $\mathcal{F}_{\leq \tau}$ può essere espressa come dipendenza solo dalla σ -algebra generata da ξ_{τ} (il futuro dipende dal passato solamente attraverso il presente).

◇

Se la famiglia $\{\xi_t\}$ è associata ad una evoluzione in uno spazio di Banach, la proprietà di essere markoviana si traduce nella proprietà dell'evoluzione di formare un semigrupp.

Si può notare che l'evoluzione descritta da un sistema hamiltoniano classico in R^{2d} è markoviana (le soluzioni sono univocamente determinate dal dato iniziale) se si pone $\Omega \equiv R^{2d}$, μ la misura di Lebesgue e \mathcal{M} i boreliani di R^{2d} .

Nota 14.4

Un processo stocastico è *individuato dalle distribuzioni congiunte* di qualunque collezione *finita* delle variabili casuali ξ_t . Le *diverse realizzazioni* differiscono tra loro per la scelta dello spazio Ω e degli insiemi misurabili \mathcal{M} .

La scelta di una specifica rappresentazione del processo è spesso legata alla opportunità di introdurre, come ulteriori funzioni misurabili, specifiche espressioni che compaiono come *limiti deboli* di funzioni misurabili delle ξ_t .

L'esistenza di tali limiti *dipende in generale dallo spazio di probabilità scelto* .

Ad esempio l'esistenza del limite $\lim_{t \rightarrow s} \frac{\xi_t - \xi_s}{|t - s|^p}$, $p < \frac{1}{2}$ dipende dalla scelta di una rappresentazione in cui le funzioni Hölder-continue di ordine p costituiscono un insieme di misura piena.

♣

Introduciamo ora un modo generale per costruire processi stocastici, in particolare quelli di Markov, mettendoli in connessione con la teoria dei semigrupp che preservano la positività .

Una discussione più approfondita verrà fatta nel Capitolo 19.

Per il momento, il nostro interesse principale risiede nella connessione tra processi stocastici e operatori di Schrödinger ed in particolare nella formula di Feynman-Kac.

Iniziamo discutendo un caso particolare, il moto Browniano.

Indichiamo con

$$K_t^0(q, q') = (4\pi t)^{-\frac{d}{2}} e^{-\frac{|q-q'|^2}{4t}} \quad q, q' \in R^d \quad t > 0$$

il nucleo integrale dell'operatore $e^{t\Delta}$.

La soluzione dell'equazione del calore

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_1^3 \frac{\partial_k^2 u}{\partial q_k^2}$$

con dato iniziale $u_0(q) \in L^\infty$ è data da

$$u_t(q) = \int K_t^0(q, q') u_0(q') dq', \quad t > 0 \quad 14.24$$

È facile verificare che il nucleo $K_t(q, q')$ ha le proprietà seguenti

a)

$$K_t^0(q, q') > 0 \quad \forall q, q' \quad t > 0.$$

b)

$$\int K_t^0(q, q') dq' = 1 \quad \forall t \geq 0.$$

c)

$$K_{t+s}^0(q, q') = \int K_t^0(q, r) K_s^0(r, q') dr \quad t, s > 0.$$

La proprietà c) riflette il fatto che l'equazione è autonoma e quindi le sue soluzioni danno luogo ad un semigrupp.

Definiamo ora una misura *sulle funzioni continue* $x(t)$, $t \in [0, T]$ tali che $x(0) = q$, $x(T) = q'$.

Indicheremo con il simbolo $\mu_{q, q', T}^W$ questa misura; essa sarà chiamata *misura di Wiener condizionata a* $(q, q'; [0, T])$. Da essa ricaveremo la misura di Wiener sulle traiettorie nell'intervallo $[0, T]$ con $x(0) = 0$ per traslazione e integrazione sul punto finale mediante un'opportuna misura su R^3 .

La massa totale della misura $\mu_{q, q', T}^W$ è $K_T^0(q, q')$.

Per definizione sono misurabili i sottoinsiemi di funzioni continue definiti da

$$\{x(s) : x(0) = q_0, x(T) = q, x(t_k) \in I_k, k = 1, \dots, N\} \equiv M(\{t_k\}, I_k) \quad 14.25$$

dove t_k sono punti arbitrari in $(0, T)$ con $t_k < t_{k+1}$ e I_k sono insiemi misurabili in R^3 .

Questi sottoinsiemi sono detti *cilindrici* perché la funzione caratteristica di $M(\{t_k\}, I_k)$ appartiene alla σ -algebra delle funzioni misurabili delle variabili casuali $\xi_{t_1}, \dots, \xi_{t_N}$.

Questa σ -algebra dipende quindi solo da una parte delle coordinate ed è individuata pertanto da un insieme che ha la struttura di un cilindro.

La misura dell'insieme $M(\{t_k\}, I_k)$ è *per definizione*

$$\mu^W(M(\{t_k\}, I_k)) = \int_{I_1} dq_1 \dots \int_{I_N} dq_N K_{t_1}^0(q_0, q_1) K_{t_2-t_1}^0(q_1, q_2) \dots K_{t-t_N}^0(q_N, q) \quad 14.26$$

Si ha allora

Teorema 14.3 (Wiener)

La misura $\mu_{q, q'T}^W$ così definita è contabilmente additiva sulla collezione degli insiemi cilindrici e ha un'estensione *unica* ad una misura completamente additiva sugli insiemi di Borel dello spazio delle funzioni continue $q(s)$, $0 \leq s \leq T$ tali che $q(0) = q_0$, $q(T) = q$.

◇

Nota 14.5

L'esistenza e unicità è conseguenza del seguente teorema di Kolmogorof che ha un ruolo fondamentale nella misura; ne diamo una dimostrazione nell'appendice A.

♣

Premettiamo alcune definizioni

Sia I un insieme infinito (non necessariamente numerabile) di indici, e per ogni $\alpha \in I$ sia X_α uno spazio metrico localmente compatto e separabile.

Sia F un sottoinsieme *finito* di I e poniamo

$$X_F \equiv \otimes_{\alpha \in F} X_\alpha \quad 14.27$$

con la topologia prodotto.

Indichiamo con \mathcal{B}_F i boreliani di X_F e indichiamo con \mathcal{F} la collezione di sottoinsiemi finiti di I .

Se $F, G \in \mathcal{F}$ con $F \subset G$ consideriamo la naturale proiezione di X_G su X_F che indicheremo con π_F^G .

Allora $(\pi_F^G)^{-1}$ applica \mathcal{B}_F in \mathcal{B}_G^F (abbiamo indicato con \mathcal{B}_G^F i boreliani di G che sono cilindrici rispetto ad F) e provvede una *probabilità condizionata*.

Data questa struttura possiamo enunciare il seguente Teorema

Teorema 14.4 (Kolmogorov)

Supponiamo che su ciascun X_F esista una misura completamente additiva di massa 1, che indicheremo con μ_F , con la proprietà

$$\mu_F(A) = \mu_G((\pi_F^G)^{-1}(A)) \quad 14.28$$

(questa è una condizione di *compatibilità*).

Allora esiste uno spazio di probabilità $\{X, \mathcal{B}_X, \mu\}$, con misura di probabilità completamente additiva μ_X e una proiezione naturale π_F di X su X_F tale che $\mu_F = \mu(\pi_F^{-1})$.

◇

Nel caso specifico della misura di Wiener, l'insieme I è l'intervallo $[0, T]$.

Nota 14.6

Lo spazio X con le proprietà descritte *non è unico*. La non unicità dipende dalle diverse scelte dell'applicazione π_F^{-1} .

In particolare nel caso del moto browniano Wiener ha dimostrato che è *possibile* scegliere X coincidente con le funzioni continue in $[0, T]$ (daremo una dimostrazione nell'appendice B a questo Capitolo).

In generale, come vedremo in seguito, la scelta naturale per lo spazio X che verrebbe fatta utilizzando la rappresentazione con semigruppì è uno spazio di distribuzioni.

Se per ciascun sottoinsieme finito di I la misura che costruiamo è una misura prodotto di misure di probabilità definite su ciascuna delle componenti del sottoinsieme, la misura di probabilità descritta dal teorema di Kolmogorov può essere scelta come misura prodotto.

♣

In generale, nel teorema di Kolmogorov, non è garantita la misurabilità di un determinato sottoinsieme di X che non sia in X_F .

Ad esempio nel caso della misura di Wiener condizionata è garantita la misurabilità degli insiemi di funzioni continue in $M(\{t_k\}, I_k)$ ma non dell'insieme delle funzioni continue ortogonali ad una data funzione continua.

Per garantire la misurabilità di insiemi preassegnati e che non sono cilindrici occorre specificare più precisamente la scelta di π_F^{-1} .

Se $X_\alpha = R$ e $I = [0, T]$ ad esempio, si può far uso di risultati di compattezza e convergenza nella teoria delle funzioni di variabile reale per dimostrare il seguente *criterio*

Criterio di Wiener

Sia

$$\mathcal{W} \equiv \{C([0, T], R^d), x(0) = x_0, x(T) = x\} \quad 14.29$$

L'insieme \mathcal{W} ha misura di Wiener condizionata uno se per ogni insieme numerabile $N \in [0, T]$ è uguale ad uno la misura delle funzioni la cui valutazione nei punti di N è *uniformemente continua*.

◇

In particolare, una condizione *sufficiente* è data dal seguente

Teorema 14.5

Se un processo stocastico $\xi(s)$ a valori in R soddisfa per qualche $\alpha, \beta > 0$, $0 < C < \infty$

$$E(|\xi_s - \xi_t|^\beta) \leq C|t - s|^{1+\alpha} \quad 14.30$$

per $0 \leq s \leq t \leq 1$, allora esiste una misura su $C[0, 1]$ ed un corrispondente processo che ha le stesse distribuzioni finito-dimensionali di ξ_s .

◇

Dimostrazione

La dimostrazione è costruttiva e consiste nello scegliere approssimazioni successive del processo di valutazione a tempi fissati, e dimostrare poi che la convergenza uniforme è quasi certa.

Notiamo che per qualunque valore di $0 \leq s \leq 1$ il valore di $\xi_t(\omega) \equiv x(t) \in R^d$ risulta definito per ogni ω .

Il problema è dimostrare l'esistenza di una realizzazione del processo per la quale con probabilità uno $x(t)$ può essere scelto continuo .

Al passo n per ciascun ω scegliamo $x_n(t)$ essere uguale a $\xi_t(\omega) = x(t)$ per $t = \frac{j}{2^n}$.

Per gli altri tempi scegliamo $x(t)$ per interpolazione lineare

$$x_n(t) = 2^n \left(t - \frac{j}{2^n} \right) x \left(\frac{j+1}{2^n} \right) + 2^n \left(\frac{j+1}{2^n} - t \right) x \left(\frac{j}{2^n} \right)$$

per $t \in \left[\frac{j}{2^n}, \frac{j+1}{2^n} \right)$.

Possiamo stimare la differenza

$$\begin{aligned} \sup_{0 \leq t \leq 1} |x_{n+1}(t) - x_n(t)| &= \sup_{1 \leq j \leq 2^n} \sup_{\frac{j-1}{2^n} \leq t \leq \frac{j}{2^n}} |x_{n+1}(t) - x_n(t)| \\ &= \sup_{1 \leq j \leq 2^n} \left| x_{n+1} \left(\frac{2j-1}{2^{n+1}} \right) - x_n \left(\frac{2j-1}{2^{n+1}} \right) \right| \\ &\leq \sup_{1 \leq j \leq 2^n} \max \left[\left| x \left(\frac{j-1}{2^n} \right) - x \left(\frac{2j-1}{2^{n+1}} \right) \right|, \left| x \left(\frac{2j-1}{2^{n+1}} \right) - x_n \left(\frac{j}{2^n} \right) \right| \right] \end{aligned}$$

Ne segue che per ogni γ positivo

$$P \left[\sup_{0 \leq t \leq 1} |x_{n+1}(t) - x_n(t)| \geq 2^{-\gamma n} \right] \leq$$

$$2^{n+1} \sup_j P \left[\left| x \left(\frac{j}{2^{j+1}} \right) - x \left(\frac{j+1}{2^{j+1}} \right) \right| \leq C 2^{n+1} 2^{-(n+1)(1+\alpha)} 2^{n\gamma(1+\beta)} \right]$$

Nell'ultima diseuguaglianza abbiamo fatto uso dell'ipotesi (14.30). Scegliendo γ in modo tale che $1 + (1 + \beta)\gamma < 1 + \alpha$ otteniamo

$$\sum_n P \left[\sup_{0 \leq t \leq 1} |x_{n+1}(t) - x_n(t)| \geq 2^{-n\gamma} \right] < \infty$$

Facciamo ora uso del Lemma di Borel-Cantelli (vedi appendice A) per concludere che con probabilità uno esiste nella topologia uniforme il limite

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n(t) \equiv x^*(t)$$

Dal lemma di compattezza di Ascoli-Arzelà ne segue che $x^*(t)$ è una funzione continua.

Per costruzione si ha con probabilità uno $x(t) = x^*(t)$ sui punti diadici.

Entrambi i processi ξ e ξ^* sono continui in probabilità; ne segue che essi hanno le stesse distribuzioni finite dimensionali e vale $P[\xi(t) = \xi^*(t)] = 1$ per ogni $0 \leq t \leq 1$.

♡

Nota 14.6

Facendo uso delle norme di Hölder anzichè della norma dell'estremo superiore si dimostra che c'è una realizzazione del processo ξ^* che ha come supporto funzioni che soddisfano una condizione di Hölder con esponente δ se $\delta < \frac{\alpha}{\beta}$.

In questo modo si giunge a dimostrare che per γ si può scegliere un qualunque numero minore di $\frac{1}{4}$.

Considerando disuguaglianze relative a momenti di ordine maggiore di due si possono ottenere realizzazioni in spazi di funzioni che soddisfano condizioni di Hölder di ordine più elevato. Per esempio nel caso del moto browniano si ha

$$\mu^W [|\xi(t) - \xi(s)|^{2n}] = c_n ([\xi(t) - \xi(s)]^2)^n = c_n |t - s|^n$$

e il procedimento cui abbiamo accennato provvede spazi di traiettorie con qualunque esponente di Hölder più piccolo di $\frac{n-1}{2n}$ per qualunque n finito.

Ne segue che il moto browniano può essere realizzato in spazi di funzioni Hölder continue con esponente minore di $\frac{1}{2}$.

♣

Nota 14.7

La condizione (14.30) può essere espressa nel seguente modo

$$\int |y - x|^2 P_{s,t}(dx \wedge dy) \leq C |t - s|^{1+\alpha} \tag{14.31}$$

Se (14.31) è verificata il processo di Wiener può essere realizzato sulle funzioni continue.

In questo caso è possibile definire il processo come *processo di valutazione* ponendo $\xi_t(\omega) = \omega(t)$, $\omega \in \mathcal{W}$.

Nel seguito utilizzeremo questa realizzazione; ad esempio intenderemo con $V(\xi(t))$ la variabile stocastica (misurabile se $V(x)$ ha sufficienti proprietà di regolarità) $V(\omega(t))$.



Vogliamo ora estendere lo spazio di misura considerando traiettorie nell'intervallo $[0, T]$ con la condizione $x(0) = 0$ ma senza alcuna condizione sul valore di x_T .

Per questo poniamo $x_0 = 0$ e definiamo sullo spazio delle traiettorie continue nell'intervallo $[0, T]$ con $x(0) = 0$ una misura μ_T^W definita sugli insiemi cilindrici come in precedenza ma adesso considerando x_T come una variabile casuale distribuita secondo la misura di Lebesgue.

La misura μ_T^W è ancora gaussiana (la misura di Lebesgue è un caso particolare di misura gaussiana); la chiameremo *misura di Wiener* nell'intervallo $[0, T]$ e chiameremo *Processo di Wiener* su $[0, T]$ il processo stocastico (di valutazione) corrispondente.

Si verifica per un calcolo esplicito che, indicando con E_T l'integrale rispetto alla misura μ_T^W , si ha

$$\begin{aligned} \forall 0 \leq t \leq T \quad E_T(\xi_t) &= 0 & E_T(\xi_t^2) &= (2\pi t)^{-3/2} \int q^2 e^{-\frac{q^2}{2t}} dq = t \\ E_T(\xi_t \xi_s) &= (2\pi t)^{-\frac{3}{2}} \int q' e^{-\frac{(q-q')^2}{2(t-s)}} q e^{-\frac{q^2}{2s}} dq' dq = s \quad s \leq t \end{aligned} \quad 14.32$$

Dunque

$$E_T(\xi_t, \xi_s) = \min(t, s) \quad E_T((\xi_t - \xi_s)^2) = t - s \quad 0 \leq t, s \leq T \quad 14.33$$

Inoltre si possono verificare per calcolo diretto

$$\begin{aligned} E_T((\xi_t - \xi_\tau)(\xi_\sigma - \xi_s)) &= 0, \quad 0 \leq s < \sigma < \tau \leq T \\ E_T((\xi_t - \xi_\tau)^2(\xi_\sigma - \xi_s)^2) &= (t - \tau)(\sigma - s) \quad 0 \leq s < \sigma < \tau < t \leq T \end{aligned} \quad 14.34$$

Da queste identità segue che le variabili casuali $(\xi_t - \xi_\tau)$ e $(\xi_\sigma - \xi_s)$ sono variabili indipendenti se i segmenti (a, b) e (c, d) sono disgiunti.

Dunque il processo di Wiener è a *incrementi indipendenti* su intervalli temporali disgiunti.

Notare per contrasto che il processo condizionato a essere portato da traiettorie in cui entrambi i punti estremi siano fissati (*ponte browniano*) non ha incrementi indipendenti.

Nota 14.8

Siano $A_k(\xi_{t_k})$ $k = 1, \dots, N$ funzioni misurabili. Utilizziamo il simbolo E_T^{x, x_0} per indicare l'aspettazione rispetto alla misura di Wiener μ_T condizionata a $q(0) = x_0, q(T) = x$.

Si ha

$$E_T^{x, x_0} (\Pi_1^N A_k(\xi_{t_k})) = (e^{-t_1 H_0} A_1 e^{-(t_2 - t_1) H_0} A_2 \dots e^{(t_n - t_{n-1}) H_0} A_N e^{-(T - t_n) H_0})(x, x_0) \quad 14.35$$

dove A_k è l'operatore di moltiplicazione per la funzione $A_k(x)$.



Sarà conveniente nel seguito considerare traiettorie definite nell'intervallo $[-T, T]$ con $x(-T) = x$ e $x(T) = x'$.

In modo analogo a quanto fatto finora, si ha, indicando con $\mu_{[-T, T]}^{x, x'}$ la misura di Wiener condizionata a $x(-T) = x$ e $x(T) = x'$

$$E_{\mu_{[-T, T]}^{x, x'}} (\Pi_k A(\xi_{t_k})) = (e^{-(t_1 - T) H_0} A_1 e^{-(t_2 - t_1) H_0} A_2 \dots e^{-(t_{N_1} - t_N) H_0} A_N e^{-(T - t_N) H_0})(x, x') \quad 14.37$$



Nota 14.9

Abbiamo già notato che la costruzione dello spazio di misura X e della corrispondente misura non è unica; in particolare segue dal teorema 14.5 che il processo di Wiener può essere rappresentato anche nello spazio funzioni continue di classe Hölder α , con $0 < \alpha < \frac{1}{2}$.

La realizzazione così ottenuta rappresenta ancora il processo di Wiener Poiché le distribuzioni congiunte di un insieme finito di variabili $\{\xi_n(t)\}$ sono le stesse. È interessante notare che il processo non può essere rappresentato sullo spazio della funzioni Hölder continue di ordine $\frac{1}{2}$ (in particolare sullo spazio delle funzioni assolutamente continue).

Infatti dovrebbe esistere una costante A tale che con probabilità uno

$$A \geq \sup_{0 \leq s \leq t} \frac{|x(t) - x(s)|}{\sqrt{t - s}}$$

Ma il termine a destra è maggiore di $\sup_j \sqrt{|x(\frac{j+1}{n}) - x(\frac{j}{n})|}$ quindi maggiore del massimo del valore assoluto di N variabili gaussiane indipendenti con N arbitrariamente grande.

Siccome le variabili gaussiane hanno valore in un insieme illimitato tale costante A non può esistere.



Abbiamo considerato finora processi di Wiener a valori su'asse reale. Notiamo adesso che le formule che abbiamo scritto valgono ugualmente per processi a valori in R^d .

14.4 LA FORMULA DI FEYMAN-KAC

14.4.1 POTENZIALI CONTINUI E LIMITATI

Da (14,37) scegliendo $A_t = V(\xi_t)$ dove V (il potenziale) è una funzione continua e limitata si ottiene

$$(e^{-2T(H_0+V)})(x, x') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dW_{x,x'[-T,T]} e^{-\sum_{k=1}^{2N} \frac{t}{N} V(x(-T+\frac{kT}{2N}))} \quad x, x' \in R^d \quad 14.38$$

(abbiamo scelto di dividere l'intervallo $[-T, T]$ in $2N$ intervalli disgiunti di uguale lunghezza).

Il limite in (14.38) va inteso in distribuzione.

D'altra parte, per il teorema di Trotter-Kato, con $A = H_0$ e $B = V$, abbiamo per i nuclei integrali

$$e^{-2T(H_0+V)}(x, x') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[e^{-\frac{2TH_0}{2N}} e^{-\frac{2TV}{2N}} \right]^N (x, x') \quad 14.39$$

La convergenza in (14.39) è *nel senso della convergenza debole* in $L^2(R^3) \times L^2(R^3)$ e il limite è il nucleo integrale dell'operatore $e^{-2T(H_0+V)}$.

Scegliamo una realizzazione del processo in cui la misura è portata da funzioni continue e il processo è di valutazione.

Allora nella (14.38) si può fare la posizione

$$\xi(t)(\omega) = \omega(t) \quad 14.40$$

Essendo continuo e limitato $V(x)$ è integrabile secondo Riemann.

L'esponenziale nel termine a destra in (14.39) converge puntualmente, come funzione di x, x' , per ogni traiettoria ω ed il suo limite è

$$\int_{-T}^{+T} V(\omega(t)) dt$$

Se V è limitato l'integrando in (14.39) è limitato superiormente da una costante, che naturalmente è integrabile per la misura di Wiener (che è una misura finita). Dunque per il teorema della convergenza dominata di Lebesgue, (ricordare che la misura di Wiener è completamente additiva) il termine destra in (14.39) converge a

$$\int e^{\int_{-T}^{+T} V(\xi(s)) ds} dW_{x,x';2T} \quad (14.41)$$

Si noti ora che, essendo $V(x)$ limitato, i nuclei integrali a destra in (14.39) sono uniformemente limitati, e quindi, ancora per il teorema di convergenza dominata, la loro successione converge in $L^1_{loc}(R \times R)$.

Quindi converge nel senso delle distribuzioni, ed essendo unico il limite in questo senso nel caso di potenziali limitati dal basso e continui, si ottiene

$$(e^{-2tH}\phi)(q) = \int dq' \phi(q') \left(\int_{\Omega} \int e^{-\int_{-T}^{+T} V(\xi(s)) ds} dW_{q,q';2T} \right) \quad 14.42$$

La (14.42) è conosciuta con nome di *formula di Feynman-Kac*.

Essa è stata ottenuta in modo formale da R.Feynman considerando il gruppo ad un parametro e^{-itH} e dimostrata in modo rigoroso di V.Kac per il semigrupp

$$e^{-tH}, \quad H = -\frac{1}{2}\Delta + V$$

Abbiamo dimostrato la validità della formula di Feynman-Kac nel caso di potenziali continui e limitati.

14.4.2 IPOTESI MENO RESTRITTIVE SUL POTENZIALE

Teorema 14.5 (formula di Feynman-Kac)

Sia

$$V = V_+ - V_-, \quad V_+ \geq 0 \quad V_+ \in L_{loc}^2(\mathbb{R}^d), \quad V_- \in S_d$$

dove S_d indica la classe di Stummel, e sia

$$H = H_0 + V, \quad H_0 = -\Delta.$$

Allora, per ogni $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ vale, per ogni $x \in \mathbb{R}^d$ e $t \in \mathbb{R}^+$

$$(e^{-2tH}\phi)(x) = \int dy \int_{\Omega} e^{\int_{-t}^{+t} V(w(s)) ds} \phi(y) dW_{x,y;[-t,t]} \quad 14.43$$

(il secondo integrale è su traiettorie tali che al tempo $-t$ la loro posizione sia y)
 \diamond

Dimostrazione

Abbiamo già visto che la formula vale se $V \in L^\infty(\mathbb{R}^d) \cap L^1(\mathbb{R}^d)$.

Dimostriamola sotto le ipotesi meno restrittive $V_+ \in L_{loc}^2(\mathbb{R}^d)$ e $V_- \in S$ (classe di Stummel).

Ricordiamo la definizione di classe di Stummel: si dice che $V \in S$ se

$$d = 3 \quad : \quad \sup_{x \in \mathbb{R}^3} \int_{|x-y| < 1} |V(y)|^2 < \infty$$

$$d = 4 \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sup_{x \in \mathbb{R}^4} \int_{|x-y| \leq \alpha} \log |x-y|^{-1} V(y)^2 dy \leq \infty$$

$$d \geq 5 : \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int_{|x-y| \leq \alpha} |x-y|^{4-d} V(y)^2 dy \leq \infty$$

Poniamo $V_n \equiv \max(V, -n)$. Allora $V_n \in L^\infty$ e si ha $V_n(x) \rightarrow V(x) \forall x$.
Per convergenza monotona

$$\int_0^t V_n(\omega(s)) ds \rightarrow \int_0^t V(\omega(s)) ds \quad 14.44$$

e quindi, ancora per convergenza monotona, per ogni $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$

$$\int \phi(y) dy \int_{\Omega} e^{\int_{-t}^{+t} V_n(\omega(s)) ds} dW_{x,y;2t} \rightarrow \int dy \int_{\Omega} e^{\int_{-t}^{+t} V(\omega(s)) ds} \phi(y) dW_{x,y;2t}$$

Supponiamo ora che V soddisfi le ipotesi del teorema.

Poniamo $V_n(x) = \min(V(x), n)$. Si ha $V_n(x) \rightarrow V(x)$ per $n \rightarrow \infty$. Ma C_0^∞ è un core per H e quindi

$$e^{-t(H_0+V_n)} \rightarrow e^{-tH}$$

La formula di Feynman-Kac vale per $H_0 + V_n$; passando al limite $m \rightarrow \infty$ e utilizzando il teorema della convergenza dominata, si conclude la dimostrazione del teorema 14.4.

♡

Nota 14.10

A stretto rigore, sotto le nostre ipotesi sul potenziale la variabile casuale $V(\omega(t))$ non è necessariamente misurabile rispetto a $dW_{x,y;[-T,T]}$.

Notiamo che l'integrando in (14.43) è il limite di funzioni regolari su Ω .

Poiché la misura $dW_{x,y;[-T,T]}$ è regolare e l'integrale è equilimitato rispetto ad N , per il criterio di Lebesgue possiamo effettuare una modificazione in un insieme di misura zero e sostituire $V(\omega(t))$ con una funzione misurabile \tilde{V} senza alterare il valore dell'integrale.

Pertanto l'integrale $\int \tilde{V}(\omega(t)) dt$ risulta definito senza ambiguità e risulta misurabile per la misura $dW_{x,y;[-T,T]}$.

♣

Nota 14.11

Segue direttamente dalla formula di Feynman-Kac che per ogni t l'operatore e^{-tH} preserva la positività.

Vedremo in seguito il ruolo che questa proprietà gioca nello studio dei processi di Markov.

♣

14.5 FORMULA DI FEYMAN-KAC PER PROCESSI PIÙ GENERALI

Il processo di Wiener non è invariante per traslazioni nel tempo Poiché la misura è portata dalle traiettorie tali che $x(-T) = q'$, $x(T) = q$.

Il processo di Wiener non ammette pertanto misure che siano invarianti per traslazione nel tempo.

Possiamo attribuire questo al fatto che l'operatore Δ ha spettro puramente continuo.

Dalla costruzione che abbiamo fatto utilizzando semigrupperi è facile capire che per costruire un processo che ha una misura invariante è necessario utilizzare un operatore positivo che ha 0 come punto dello spettro discreto.

Per questo si può utilizzare un operatore $-\Delta + V$ con un potenziale $V(x)$ opportunamente scelto ma la scelta di V come potenziale armonico provvede un nucleo integrale di natura così semplice da poter avere una descrizione esplicita del processo associato.

Costruiamo quindi in modo esplicito un processo stocastico associato alla hamiltoniana

$$H_0 = -\frac{\Delta}{2} + \frac{x^2}{2} - \frac{d}{2}, \quad x \in R^d. \tag{14.45}$$

Questo processo è chiamato *processo di Ornstein-Uhlenbeck*.

Il nucleo integrale del corrispondente semigruppero è in *nucleo di Meher* che è dato esplicitamente da

$$K_t^0(x, y) = (1 - e^{-2t})^{-1/2} e^{-y^2 + \frac{(e^{-t}y - x)^2}{1 - e^{-2t}}} \tag{14.46}$$

Indichiamo brevemente come questa formula può essere ricavata.

Trattiamo solamente il caso $d = 1$.

Utilizzando gli operatori di creazione e di annichilazione

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right), \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right)$$

si ottiene

$$H_0(a^*)^n \Omega_0 = n(a^*)^n \Omega_0 \quad \Omega_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \tag{14.47}$$

Pertanto

$$e^{-tH_0} e^{i\nu \frac{a^*}{\sqrt{2}}} \Omega_0 = e^{i\nu \frac{e^{-t}}{\sqrt{2}}} a^* \Omega_0 \tag{14.48}$$

(entrambi i termini sono funzioni analitiche in t perché $a^* (H_0 + 1)^{-\frac{1}{2}}$ è un operatore limitato).

Utilizzando le relazioni di commutazione tra a e a^*

$$\int e^{-tH_0}(x, y) e^{i\nu y} e^{-\frac{y^2}{2}} = e^{-\nu \frac{e^{-t}}{\sqrt{2}}} e^{i\nu x} e^{-\frac{x^2}{2}} \tag{14.49}$$

Da questo si ricava la (14.46)

Notiamo che

$$\lim_{t \rightarrow \infty} K_t^0(x, y) = \frac{1}{\pi} e^{-\frac{x^2}{2} - \frac{y^2}{2}} = P_0(x, y) \quad 14.50$$

Questo è il nucleo integrale dell'operatore di proiezione sullo stato fondamentale dell'oscillatore armonico, come ci si aspetta essendo H_0 strettamente negativo nel sottospazio ortogonale.

Procedendo come abbiamo fatto per l'operatore Δ si verifica che questo nucleo integrale definisce un processo chiamato *ponte di Ohrstein-Uhlenbeck* e una corrispondente misura $\mu_{q_1, q_2; T}^{OU}$ sui cammini continui nell'intervallo $[-T, T]$ tali che $q(-T) = q_1$, $q(T) = q_2$.

Come nel caso del processo di Wiener se $V(x)$ è sufficientemente regolare il nucleo integrale di

$$H = -\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{2}x^2 - \frac{d}{2} + V(x) \quad 14.51$$

è

$$K_T(y, y') = \int e^{-\int_{-T}^T V(\xi(s)) ds} d\mu_{y, y'; [-T, T]}^{OU} \quad 14.52$$

dove come prima ξ è il processo di valutazione e $d\mu_{q_1, q_2; [-T, T]}^{OU}$ è la misura associata al ponte di Ohrstein-Uhlenbeck.

Se \mathcal{M}_T è lo spazio di funzioni continue nell'intervallo $[-T, T]$ a valori in R^d .

Definiamo una misura $\Phi_0(T)$ su \mathcal{M}_T come prodotto di $\mu_{y, y'; [-T, T]}^{OU}$ per una misura su $R^d \times R^d$ assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue con densità in ciascun fattore l'autofunzione Ω_0 dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico

$$d\Phi_0(T) = d\mu_{y, y'; [-T, T]}^{OU} \Omega_0(y) dy \Omega_0(y') dy' \quad 14.53$$

Se A_k è l'operatore che agisce come moltiplicazione per le funzioni $A_k(x)$, $k = 1, \dots, n$ si ha

$$(\Omega_0, A_1 e^{-(t_2 - t_1)H_0} A_2 \dots e^{-(t_n - t_{(n-1)})H_0} A_n \Omega_0) = \int \prod_k A_k(\xi(t_i)) d\Phi_0(t). \quad 14.54$$

Dall'invarianza di Ω_0 per l'azione di e^{isH_0} segue che per $T < S$ la misura $\Phi_0(T)$ può essere riguardata come *condizionamento* di $\Phi_0(S)$ ai cammini in $[-T, T]$.

Per $|s| \leq T$ le variabili casuali $\xi_T(s)$ hanno la stessa distribuzione di $\xi_S(t)$ quando $S > T$ e possono essere realizzate nello stesso spazio di probabilità (a rigore avremo dovuto chiamarle con nomi diversi).

Essendo soddisfatta la condizione di compatibilità possiamo, utilizzando il teorema di Kolmogorov, definire con un procedimento di limite il processo di Ohrstein-Uhlenbeck (un processo di Markov) e la corrispondente misura μ_0 .

Ma non siamo garantiti che questo processo sia realizzabile sulle traiettorie continue su $(-\infty, \infty)$ (la convergenza è solo in probabilità e non quasi sicuramente).

Conviene dunque cambiare prospettiva e vedere lo spazio di misura come collezione di funzioni misurabili (e non considerare solamente le funzioni caratteristiche di insiemi misurabili).

In corrispondenza ad ogni funzione continua *a supporto compatto* possiamo definire senza ambiguità la funzione misurabile

$$\phi(f) = \int f(x)\xi_x dx.$$

Notiamo che la misura limite è gaussiana (come limite debole di misure gaussiane) ed è pertanto completamente determinata dalla sua media e dalla sua covarianza.

Indicheremo con $E(f)$ la media della funzione misurabile f rispetto alla misura limite.

Determiniamo queste quantità.

Per ogni scelta di t_1 e t_2

$$\int \xi(t_1)d\mu_0 = 0, \quad \int \xi(t_1)\xi(t_2)d\mu_0 = \frac{1}{2}e^{-|t_2-t_1|} \quad 14.55$$

Per ogni funzione continua $f : R \rightarrow R^d$ a supporto compatto si ha

$$E(\phi(f)\phi(g))(\xi) = (f, g)_{-1} \quad (f, g)_{-1} = \int f^*(k)\hat{g}(k)(k^2 + 1)^{-1} dk \quad 14.56$$

Ricordando che $\delta(t) \in H^{-1}$ questo è consistente con la definizione precedente. Infatti $\phi(\delta(t)) = \xi_t$.

Un calcolo esplicito dà

$$E(\phi(f)^{2n}) = (2n - 1)!!|f|_{-1}^{2n}, \quad E(\phi(f)^{2n+1}) = 0, \quad E(e^{i\phi(f)}) = e^{-\frac{1}{2}(f, f)_{-1}} \quad 14.57$$

Questo permette di determinare la distribuzione del limite di una successione di variabili casuali $\phi(f_i)$ dove le funzioni $f_n(x)$ sono continue a supporto compatto e convergono nella topologia di H^{-1} a un elemento $f \in H^{-1}$.

Il limite esiste in distribuzione e pertanto definisce una variabile casuale $\phi(f)$. Lo spazio di misura nel quale la collezione di $\phi(f)$ può essere definita come collezione di funzioni misurabili resta definito modulo l'equivalenza delle distribuzioni congiunte delle $\phi(f)$, $f \in H^{-1}$

La misura limite soddisfa

$$E(\phi(f)\phi(g)) = (f, g)_{-1} \quad 14.58$$

e valgono le (14.57).

È un misura gaussiana essendo il limite di misure gaussiane.

Questa misura può essere certamente realizzata sullo spazio \mathcal{D}' duale dello spazio \mathcal{D} di funzioni infinitamente differenziabili e a supporto compatto. Vedremo in Appendice A che può essere realizzata in spazi molto più piccoli, *ma non nello spazio della funzioni continue.*

Consideriamo ora una hamiltoniana $H \geq 0$ che ha zero come autovalore isolato. Senza perdita di generalità possiamo assumere che la corrispondente autofunzione $\Omega(y)$ sia positiva.

Poiché $\Omega(y) > 0$ si ha $(\Omega, \Omega_0) \neq 0$ e inoltre

$$(\Omega, \Omega_0)\Omega = \lim_{t \rightarrow \infty} e^{-tH}\Omega_0$$

Definiamo

$$d\mu_T = Z_T^{-1} e^{\int_{-T}^T V(\xi(s)) ds} d\mu_0 \quad 14.59$$

dove Z_t è una costante numerica scelta in modo che μ sia una misura di probabilità.

Per costruzione

$$|e^{2tH}\Omega_0|^{-1} \left(e^{-(t_1-t)H}\Omega_0, f_1 e^{-(t_2-t_1)H} f_2 \dots e^{-(t-t_n)H}\Omega_0 \right) = \int \Pi_k f_k(\xi_k(t_k)) d\mu_t \quad 14.60$$

Ne segue che il termine a sinistra converge per $t \rightarrow \infty$.

Pertanto converge anche il termine a sinistra e

$$\left(\Omega, f_1 e^{-(t_2-t_1)H} f_2 \dots e^{-(t_n-t_{n-1})H}\Omega \right) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int \Pi_k f_k(\xi_k) d\mu_t \quad 14.61$$

Prima di aver preso il limite la misura era definita sull'insieme delle funzioni continue a supporto compatto.

Un argomento simile a quello utilizzato nel caso della misura di Osterstein-Uhlenbeck permette quindi di definire una misura limite su \mathcal{D}' .

Ma adesso la misura non è più gaussiana e può essere difficile scrivere le funzioni di correlazione o anche dimostrare l'unicità del limite.

La misura limite è definita da

$$\mu(\Pi_k f_k(\xi_k)) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int \Pi_k f_k(\xi_k) d\mu_t$$

Dobbiamo dimostrare che questa misura definisce un processo di Markov. Per far questo utilizziamo il teorema di Minlos che adesso formuliamo.

Come notato qui sopra questa procedura astratta non permette di garantire che il processo sia realizzabile nello spazio delle funzioni continue.

Vedremo nel seguito di questo capitolo che la realizzabilità sullo spazio di funzioni continue può essere dimostrata mantenendo come misura quella di Wiener (o di Osterstein-Uhlenbeck) e *modificando invece le singole traiettorie.*

Per dimostrare che il processo limite esiste unico dobbiamo ricordare il significato di *convergenza in misura* (convergenza in probabilità)
 Se $f \in D$, $\text{supp}(f) \subset [-T, T]$ definiamo la *funzione caratteristica*

$$\Phi_T(f) \equiv \int e^{i\phi(f)} d\mu_T \tag{14.62}$$

È facile dimostrare che

1)

$$f_n \rightarrow f \text{ in } \mathcal{D} \Leftrightarrow \Phi_T(f_n) \rightarrow \Phi_T(f)$$

2)

$$\sum_{i,j=1}^N \bar{c}_j c_i \Phi_T((f_i - \bar{f}_j) \geq 0$$

per qualunque scelta di funzioni f_i e numeri complessi c_i .

3)

$$\Phi_T(0) = 1$$

Notiamo che $\Phi_T(f) = \Phi_S(f)$ se $S \geq T$.

Ponendo $\Phi(f) = \lim_{T \rightarrow \infty} \Phi_T(f)$ si ottiene un funzionale su \mathcal{D}' con le proprietà 1),2),3).

Notare che dobbiamo richiedere $f \in \mathcal{D}$ perché utilizziamo funzioni che hanno supporto finito ma arbitrario.

Siamo ora in condizione di utilizzare il seguente teorema:

Teorema 14.6 (Minlos)

Sia $\Phi(f)$ un funzionale lineare su \mathcal{D} con le proprietà 1),2),3) descritte sopra. Esiste unica una misura di probabilità su \mathcal{D}' tale che $\Phi_\mu(f) = \int e^{i\xi(f)} d\mu(\xi)$. Chiameremo Φ_μ *funzionale caratteristico* della misura μ .

◇

Il teorema di Minlos generalizza un teorema di Bochner che adesso formuliamo e dimostriamo.

Ricordiamo che una funzione f su R^n è detta essere *di tipo positivo* se è continua, limitata e per ogni scelta di $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in R^n$ la matrice

$$F_{i,j} \equiv f(\lambda_i - \lambda_j) \tag{14.6314.56}$$

è positiva.

Teorema 14.7 (Bochner)

Il cono delle funzioni di tipo positivo coincide con le trasformate di Fourier delle misure finite positive su R^n .

◇

Dimostrazione

1)

Se μ è una misura finita positiva, si ha

$$\sum_{i,j} \widehat{\mu}(\lambda_i - \lambda_j) \bar{\xi}_i \xi_j = \int d\mu(x) \left| \sum_1^N e^{i\lambda_k x} \xi_k \right|^2 \geq 0 \quad 14.64$$

2)

Sia f una funzione continua di tipo positivo.

Sia \mathcal{H} lo spazio delle funzioni a valori complessi che sono diverse da zero solo in numero finito di punti (questo è ovviamente uno spazio vettoriale per addizione puntuale) con prodotto scalare

$$(\phi, \psi)_f = \sum_{x,y \in R^N} \bar{\phi}(x) f(x-y) \psi(y) = (U_t \phi, U_t \psi)_f \quad \forall t \in R \quad 14.65$$

dove

$$U_t \phi(x) = \phi(x-t)$$

Sia Ξ l'ideale della funzioni per le quali $(\phi, \phi)_f = 0$.

Allora U_t passa al quoziente \mathcal{H}/Ξ .

Inoltre U_t è fortemente continuo (perché f è continua) e quindi, utilizzando il teorema di Stone e il teorema spettrale, si può dimostrare che esiste una famiglia di proiettori P_λ su R^n tale che

$$(\phi, U_t \phi)_f = \int e^{it\lambda} d(\phi, P_\lambda \phi)_f \quad 14.66$$

Sia ora $\tilde{\phi}_0$ la classe di equivalenza in \mathcal{H}/Ξ della funzione ϕ_0 definita da : $\phi_0 \equiv 1$ se $x = 0$, $\phi_0 \equiv 0$ se $x \neq 0$.

Si ha $U_t \tilde{\phi}_0 = 1$ se $x = t$ e $U_t \tilde{\phi}_0 = 0$ se $x \neq t$.

Allora

$$f(t) = (U_t \tilde{\phi}_0, \tilde{\phi}_0) = \int e^{-it\lambda} d(\tilde{\phi}_0, P_\lambda \tilde{\phi}_0) \quad 14.67$$

Dunque $f(t)$ è la trasformata di Fourier di una misura positiva.

♡

La generalizzazione del Teorema di Bochner che viene utilizzata per dimostrare il Teorema di Minlos è il seguente Teorema di Bochner-Schwartz che enunceremo senza dimostrarlo.

Ricordiamo che una distribuzione $T \in \mathcal{D}'(R^n)$ è detta di essere *di tipo positivo* se per ogni $\psi \in \mathcal{D}(R^n)$ con $\bar{\psi}(-x) = \psi(x)$ si ha

$$T(\bar{\psi} \psi) \geq 0 \quad 14.68$$

Vale allora

Teorema 14.18 (Bochner-Schwartz)

Un distribuzione $T \in \mathcal{D}'(R^n)$ è di tipo positivo se e solo se $T \in \mathcal{S}'(R^n)$ ed è la trasformata di Fourier di una misura positiva e a crescita al più esponenziale.

◇

Terminiamo questo Capitolo con una breve discussione delle modificazioni del moto browniano.

Nell'analisi della formula di Feynman-Kac abbiamo preso in esame modificazioni ottenute aggiungendo al laplaciano una funzione $V(x)$ (il potenziale).

Nel caso particolare del potenziale armonico abbiamo utilizzato il fatto che la hamiltoniana ha uno stato fondamentale unico e che il nucleo del semigruppso associato ha una espressione particolarmente semplice.

Consideriamo qui un caso più generale in cui l'operatore

$$H = -\frac{1}{2}\Delta + V(x) \quad x \in R^d \tag{14.69}$$

è positivo e ha zero come autovalore isolato con autofunzione ϕ_0 che assumiamo essere strettamente positiva.

Come conseguenza per ogni $\psi \in L^2(R^d)$, normalizzata a uno si ha

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-tH} \phi = c_\phi P_{\phi_0} \quad c = (\phi_0, \psi)$$

dove P_{ϕ_0} è il proiettore ortogonale su ϕ_0 .

Poiché abbiamo richiesto che lo stato fondamentale sia strettamente positivo, sotto la trasformazione unitaria

$$\phi \in L^2(R^d, dx) \rightarrow \psi \in L^2(R^d, \phi_0(x)dx) \tag{14.70}$$

data da $\phi(x) = \sqrt{\phi_0(x)} \psi(x)$ lo stato fondamentale è trasformato nella funzione identicamente uguale ad uno e la hamiltoniana viene trasformata nell'operatore

$$H' = -\frac{1}{2}\Delta - C(x)\nabla, \quad C(x) = \frac{\nabla\sqrt{\phi_0}}{\sqrt{\phi_0}} \tag{14.71}$$

Ne concludiamo che se $a(x)$ è una funzione strettamente positiva differenziabile che appartiene $L^1(R^d)$ l'operatore

$$H_b = -\frac{1}{2}\Delta - b(x)\nabla, \quad b(x) = \frac{\nabla a(x)}{a(x)} = \nabla(\log(a(x))) \tag{14.72}$$

è il generatore di un processo stocastico che ha una misura invariante.

Denoteremo questo processo con il nome *processo dello stato fondamentale* (dell'operatore H).

Nel caso dell'oscillatore armonico si tratta del processo di Ornstein-Uhlenbeck. Il processo stato fondamentale è *una modificazione del moto browniano* e il campo vettoriale $b(x)$ prende il nome di *drift*.

Consideriamo ora il processo ottenuto modificando il laplaciano con un campo vettoriale $b(x)$ che *può non essere un campo gradiente*.

Vogliamo interpretare il processo che otteniamo come un processo ottenuto modificando le singole traiettorie anzichè modificare la misura.

Questo provvederà una processo che è *automaticamente realizzato sullo spazio delle funzioni continue su intervalli di tempo finiti*.

Il generatore del semigruppò è adesso

$$L = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + b(x) \frac{d}{dx} \quad 14.73$$

Assumiamo sempre che il campo vettoriale $b(x)$ sia Lipshitz continuo.

Consideriamo la misura P_x^b sulle traiettorie continue che iniziano in x al tempo $t = 0$ ottenuta per dualità dall'applicazione Φ_b tra traiettorie continue data ad ogni tempo $t \geq 0$ da

$$\beta \rightarrow \xi(t), \quad \xi(t) = x + \beta(t) + \int_0^t b(\xi(s)) ds \quad x(t) \in R^d \quad 14.74$$

dove β è il moto e facciamo uso dell'applicazione di valutazione

Poiché abbiamo assunto che il campo vettoriale sia Lipshitz continuo possiamo far uso del metodo di iterazione di Picard per dimostrare che l'applicazione considerata è ben definita e uno a uno.

Richiamiamo alcune definizioni.

Definizione

Dato una spazio di probabilità $\{\Omega, \mathcal{F}, P\}$ e una filtrazione $\mathcal{F}_t \in \mathcal{F}$ (una famiglia di sotto-sigma algebre tali che $\mathcal{F}_s \subset \mathcal{F}_t$ se $s < t$) una famiglia di variabili casuali $M(t)$ è detta essere una *martingala* se

(1)

Per quasi tutte le ω la funzione $M(t, \omega)$ ha limite destro e sinistro ed è continua a destra.

(2)

Per ogni $t \geq 0$ la funzione $M(t)$ è misurabile e integrabile

(3)

Quasi sicuramente si ha che per $0 \leq s \leq t$ si ha $E(M(t), \mathcal{F}_s)M(t) = M(s)$, dove $E(X, \mathcal{F}_s)$ denota aspettazione condizionata di X relativamente alla σ algebra \mathcal{F}_s (una subalgebra di $\mathcal{F}_{\leq t}$.

◇

Il ruolo di questa definizione può essere visto dal seguente teorema

Teorema 14.19 (formula di Girsanov).

Sia P_x^0 la misura definita dal moto browniano sullo spazio Ω delle traiettorie continue che cominciano a x al tempo 0. Sia $b(x)$ un campo vettoriale Lipschitz continuo.

Denotiamo con P_x^b la misura associata al processo stocastico con generatore (14.73).

Allora la misura P_x^b è assolutamente continua rispetto a P_x^0 .

La sua derivata di Radon-Nykodym è data da

$$R_t^b(\omega) = e^{\int_0^t b(\xi_s(\omega)) ds - \frac{1}{2} \int_0^t |b|^2(\xi_s(\omega)) ds} \quad |b|^2 = \sum_{k=1}^d b_k^2 \quad 14.75$$

Il processo definito da P_x^b è un processo di Markov perché R_t è una martingala rispetto alla filtrazione $\{\Omega, \mathcal{F}_t, P_x\}$.

Abbiamo indicato con $\xi_s(\omega)$ l'applicazione di valutazione.

◇

Dimostrazione

Noi daremo solo la dimostrazione nel caso in cui il campo vettoriale è limitato. La dimostrazione nel caso generale si ottiene per approssimazione e con un procedimento di limite.

Definiamo una nuova misura \widehat{Q}_x sulle funzioni continue ponendo

$$\frac{d\widehat{Q}_x}{dP_x} = R_t^b$$

dove R_t^b è dato in (14.75).

Dimostriamo prima che R_t^b è una martingale rispetto alla filtrazione data dal moto browniano.

Per ispezione diretta questo è vero quando il campo vettoriale b è una funzione costante a tratti (una funzione *semplice*) b_n . Indichiamo con $R_t^{b_n}$ questa martingala.

Si verifica facilmente che $(R_t^b)^2 \leq R_{2t}^b e^{tC^2}$ dove $C(\omega)$ è scelto in modo tale che $C(\omega) \geq |b_s(\omega)|$ per $0 \leq s \leq t$.

Ogni funzione limitata progressivamente misurabile b può essere approssimata mediante funzioni misurabili uniformemente limitate che sono costanti a tratti. Pertanto prendendo il limite le martingale $R_t^{b_n}$ sono equilimitate in $L^2(P_0)$ e il limite è ancora una martingala.

Poiché le distribuzioni sono consistenti a tempi diversi segue che

$$R_t(\theta, \omega) = e^{\int_0^t (\theta - b(x(s))) dx(s) - \frac{1}{2} \int_0^t (b(x(s)) - \theta)^2 ds} \quad 14.76$$

è una martingala per ogni θ .

Questo implica che

$$\begin{aligned} S_t(\theta) &= e^{\int_0^t \theta dx(s) - \frac{t\theta^2}{2} - \frac{1}{2} \int_0^t \theta b(x(s)) ds} \\ &= e^{\theta(x(t) - x - \int_0^t b(x(s)) ds) - \frac{t\theta^2}{2}} \end{aligned} \tag{14.77}$$

è una martingala rispetto alla filtrazione definita da \widehat{Q}_x .
Questo significa che il processo

$$y(t) \equiv x(t) - x - \int_0^t b(x(s)) ds$$

è *distribuito come il moto browniano*.

Poiché $\Phi_x(y(\cdot)) = x(\cdot)$ ne segue $\widehat{Q}_x = Q_x$.

♡

Nota 14.11

Conviene notare nella formula di Girsanov il termine quadratico nell'esponentiale; esso ha origine nel fatto che il moto browniano è un processo *direzionale* e non reversibile.

Esiste un processo inverso ma non è identico al moto browniano e non è markoviano rispetto alla filtrazione browniana.

Il moto browniano ha incrementi indipendenti su intervalli temporali *disgiunti* ma non su intervalli che abbiano un punto in comune. Per questi ultimi la modificazione dell'incremento (rispetto alla somma) è del secondo ordine.

Questo dà ragione della presenza del termine quadratico nel *drift*.

Nel caso di variabili gaussiane, che sono completamente caratterizzate dalla media e dalla varianza, intervengono solo la media e la varianza degli incrementi e questo porta a (14.75).

Il termine quadratico è la differenza tra il quadrato della media degli incrementi (infinitesimi) e l'incremento della media dei quadrati.

♣

APPENDICE 14A: ELEMENTI DI TEORIA DELLA PROBABILITÀ

Vogliamo ritornare brevemente sul tema delle diverse realizzazioni del processo di Wiener.

Studiamo qui il problema dal punto di vista dei semigrupp, o equivalentemente utilizzando le funzioni di transizione.

La stessa analisi, con risultati simili, può essere fatta per il processo di Ohlstein-Uhlembeck.

Iniziamo dando alcuni elementi di teoria della probabilità, in particolare provvedono stime a priori e teoremi particolarmente utili.

Iniziamo con semplici definizioni.

Definizione 14A.1

Uno spazio di probabilità è una tripla $\{\Omega, \mathcal{F}, P\}$ dove Ω è un insieme, \mathcal{F} è una σ -algebra di sottoinsiemi C_i di Ω (i sottoinsiemi P -misurabili) e P è una misura regolare di probabilità su Ω (cioè una misura regolare tale che $P(\Omega) = 1$). La funzione P su \mathcal{F} che gode delle proprietà

1)

$$\forall C \in \mathcal{F} \quad P(C) \geq 0$$

2)

$$P(\Omega) = 1$$

3)

$$C_i \in \mathcal{F}, \quad i = 1, 2, \dots, \quad C_i \cap C_j = \emptyset, \Rightarrow P(\cup_{i=1}^{\infty} C_i) = \sum_{i=1}^{\infty} P(C_i)$$

Il numero $P(C)$ è detto *probabilità di C*.

◇

Nota 14A.1

Una collezione \mathcal{F} di sottoinsiemi di Ω è detta essere una σ -algebra se $C_1, C_2, \dots, C_k \dots \in \mathcal{F}$ implica $\cup_i C_i \in \mathcal{F}$ e inoltre $\Omega - C_i \in \mathcal{F}$. È facile vedere che se $C_1, C_2, \dots, C_k \dots \in \mathcal{F}$ allora $\cap_i C_i \in \mathcal{F}$.

Definizioni equivalenti di σ -algebra sono la seguenti

Se $C_i \in \mathcal{F}$, $C_i \subset C_{i+1}$ allora $P(\cup_i C_i) = \lim_{i \rightarrow \infty} P(C_i)$

Se $C_i \in \mathcal{F}$, $C_{i+1} \subset C_i$ allora $P(\cap_i C_i) = \lim_{i \rightarrow \infty} P(C_i)$

Convien notare che in assenza di σ -additività vale solamente $P(\cup_i C_i) \leq \sum_i P(C_i)$.

♣

Definizione 14A.2

Sia \mathcal{A} una famiglia di sottoinsiemi di Ω .

Chiameremo σ -algebra *generata da* \mathcal{A} la più piccola σ -algebra di sottoinsiemi di Ω che contiene \mathcal{A} ; essa viene indicata con il simbolo $\mathcal{F}(\mathcal{A})$

◇

Nelle applicazioni frequentemente Ω è uno spazio metrico; in questo caso indichiamo con ω un suo generico punto e utilizziamo come σ -algebra l' *algebra di Borel* su Ω (la σ -algebra generata dagli aperti di Ω).

Noi considereremo solamente questo caso.

Definizione 14A.3

Sia ξ una variabile casuale, cioè una funzione $\xi(\omega)$ che è P -misurabile a valori reali sullo spazio metrico Ω .

Se esiste una funzione positiva $p(t)$ tale che per ogni intervallo $[a, b]$ si ha

$$P(\{a \leq f(\omega) \leq b\}) = \int_a^b p(t)dt$$

diciamo che la variabile casuale ξ ha una *distribuzione di probabilità con densità* $p(t)$.

Più in generale si può definire una distribuzione di probabilità nel caso esista una misura di Borel positiva μ per la quale per ogni boreliano β di R e per ogni funzione continua f , si abbia $P(f(\omega) \in \beta) = \mu(\beta)$.

◇

Definizione 14A.4

L' *aspettazione matematica* (o *valor medio*) $E(\xi)$ della variabile casuale ξ è il numero

$$E(\xi) = \int \xi(\omega)dP(\omega) \tag{14A.1}$$

(abbiamo usato la notazione $\xi(\omega)$ per indicare la funzione misurabile che individua ξ)

La sua *varianza* è definita, se $E(\xi)^2 < \infty$, come

$$\text{Var}(\xi) \equiv E(\xi - E(\xi))^2 = E(\xi^2) - (E(\xi))^2 \tag{14A.2}$$

◇

È facile vedere che se $a \leq \xi \leq b$ allora $\text{Var}(\xi) \leq \left(\frac{b-a}{2}\right)^2$.

Inoltre valgono le seguenti disuguaglianze di Chebyshev .

Diseguaglianza di Chebyshev I

Se $\xi \geq 0$ e $E(\xi) < \infty$ allora per ogni $t > 0$ vale

$$P(\omega : |\xi(\omega)| \geq t) \leq \frac{E(\xi)}{t} \tag{14A.3}$$

◇

Dimostrazione

$$P(\omega : |\xi(\omega)| \geq t) \leq \int_{\omega:|\xi(\omega)| \geq t} \frac{\xi(\omega)}{t} dP(\omega) \leq \frac{1}{t} E(\xi)$$

◇

Diseguaglianza di Chebyshev II

Se $\text{Var}(\xi) < \infty$ allora

$$P(\omega : |\xi(\omega) - E(\xi)| \geq t) \leq \frac{\text{Var}(\xi)}{t^2} \quad 14A.4$$

◇

Dimostrazione

Utilizziamo la diseguaglianza di Chebyshev I per la variabile casuale $\eta \equiv (\xi - E(\xi))^2$.

Abbiamo

$$\{\omega : |\xi - E(\xi)| \geq t\} = \{\omega : |\eta| \geq t^2\}$$

Pertanto

$$P(\omega : |\xi(\omega) - E(\xi)| \geq t) \leq \frac{E(\eta)}{t^2} = \frac{\text{Var} \xi}{t^2}$$

♡

Definizione 14A.5

Due variabili casuali ξ_1 e ξ_2 (definite sullo stesso spazio di probabilità) si dicono *indipendenti* se

$$P(\xi_1(\omega) \in \mathcal{B}_1, \xi_2(\omega) \in \mathcal{B}_2) = P(\xi_1(\omega) \in \mathcal{B}_1)P(\xi_2(\omega) \in \mathcal{B}_2)$$

Analogamente si definisce l'indipendenza di una collezione finita di variabili casuali; nel caso di una collezione infinita, l'indipendenza è richiesta per ogni sottocollezione finita.

♣

Un risultato importante è descritto dai due *teoremi limite* di De Moivre-Laplace, che noi enunceremo senza dimostrazione.

Consideriamo la distribuzione binomiale con probabilità p , $1 - p$ $0 \leq p \leq 1$:

$$P_{N,k} = \frac{N!}{k!(N-k)!} p^k (1-p)^{N-k} \quad 14A.5$$

Questa è l'aspettazione matematica del numero k in N misurazioni fatte in condizioni identiche se p è la probabilità di ottenere il risultato k in ogni singola misurazione.

Vogliamo determinare la probabilità *asintotica* per grandi valori di N di ottenere il numero k .

Teorema limite locale di De Moivre-Laplace

Se k è tale che esistono $0 < a < b$ tali che per ogni N si abbia $Np + a\sqrt{N} \leq k \leq Np + b\sqrt{N}$, allora

$$P_{N,k} = \frac{1}{\sqrt{2\pi Np(1-p)}} e^{-\frac{(k-Np)^2}{2Np(1-p)}} (1 + R_N(k))$$

dove il resto $R_N(k)$ converge a zero quando $N \rightarrow \infty$ uniformemente in k

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \max_{Np+a\sqrt{N} \leq k \leq Np+b\sqrt{N}} |R_N(k)| = 0$$

◇

Teorema limite integrale di De Moivre-Laplace

Siano $a < b$ numeri reali.

Allora

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{p+a\sqrt{\frac{p(1-p)}{N}} \leq \frac{k}{N} \leq p+b\sqrt{\frac{p(1-p)}{N}}} = \frac{1}{2\pi} \int_a^b e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad 14A.6$$

◇

Questo è un risultato classico nella teoria degli errori; per grandi valori di N la deviazione del valore ottenuto $\frac{k}{N}$ dalla probabilità p segue una legge gaussiana.

Consideriamo ora risultati che riguardano successioni di variabili casuali indipendenti.

Una prima relazione importante è la seguente

Disuguaglianza di Kolmogorov

Sia $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ una successione di variabili casuali indipendenti che soddisfano

$$E(\xi_i) = 0, \quad \text{Var}(\xi_i) < \infty \quad i = 1, \dots, n$$

Allora

$$P(\omega : | \max_{k=1, \dots, n} |\xi_1 + \dots + \xi_k| \geq c) \leq \frac{1}{c^2} \sum_{k=1}^n \text{Var}(\xi_k) \quad 14A.7$$

◇

Dimostrazione

Indichiamo con A_k l'insieme dei punti ω per i quali vale

$$\max\{|\xi_1|, |\xi_1 + \xi_2|, \dots, |\xi_1 + \dots + \xi_{k-1}|\} < c, \quad |\xi_1 + \dots + \xi_k| \geq c \quad 1 \leq k \leq n$$

e con η_k la sua funzione indicatrice, che è per costruzione misurabile rispetto alle ξ_j , $1 \leq j \leq n$.

Gli insiemi A_k sono due a due disgiunti e per definizione

$$P(\max\{|\xi_1|, |\xi_1 + \xi_2|, \dots, |\xi_1 + \dots + \xi_{k-1}|\} < c) = P(A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_n) = \sum_{k=1}^n P(A_k)$$

Da $E(\xi_k) = 0 \quad \forall k$ e da $\sum_{k=1}^n \xi_k \leq 1$ segue

$$\text{Var}(\xi_1 + \dots + \xi_n) = E((\xi_1 + \dots + \xi_n)^2) \geq \sum_{k=1}^n E(\eta_k(\xi_1 + \dots + \xi_n)^2)$$

Consideriamo ora l'identità

$$E(\eta_k(\xi_1 + \dots + \xi_n)^2) = E(\eta_k(\xi_1 + \dots + \xi_k)^2) + \\ + 2E(\eta_k(\xi_1 + \dots + \xi_k)(\xi_{k+1} + \dots + \xi_n)) + E(\eta_k(\xi_{k+1} + \dots + \xi_n)^2) \quad 14A.8$$

Per la definizione Ξ_k è maggiore o uguale a $c^2 P(A_k)$.

Il secondo termine è nullo perché le due variabili nel prodotto sono indipendenti e hanno media zero.

Il terzo termine è positivo.

Ne deduciamo

$$\text{Var}(\xi_1 + \dots + \xi_n) \geq c^2 \sum_{k=1}^n P(A_k)$$

Ma le ξ_k sono variabili indipendenti e quindi il termine a sinistra è $\sum_{k=1}^n \text{Var}(\xi_k)$. \heartsuit

Legge 1-0 di Kolmogorov

Sia $(\Omega, \mathcal{B}, \mu)$ uno spazio di probabilità e sia ξ_1, ξ_2, \dots una collezione di di variabili casuali *indipendenti* e ugualmente distribuite (permutabili). Supponiamo che un insieme A sia misurabile rispetto a ξ_n, ξ_{n+1}, \dots per ogni valore dell'indice n .

Allora $\mu(A) = 0$ oppure $\mu(A) = 1$ dove $\mu(A)$ è la misura dell'insieme A (l'integrale della sua funzione indicatrice). \diamond

Dimostrazione

Per definizione di misura prodotto esiste un intero N sufficientemente grande e un insieme A_ϵ misurabile rispetto alla collezione ξ_1, \dots, ξ_N (quindi un insieme cilindrico) tale che $|\mu(A) - \mu(A_\epsilon)| < \epsilon$.

D'altra parte possiamo costruire mediante la sostituzione $\xi_i \rightarrow \xi_{i+N}$ un altro insieme A' con $\mu(A) = \mu(A')$ e tale che A' e A_ϵ siano indipendenti.

Quindi, indicando con $\Xi(A)$ la funzione indicatrice di A e con $P(A)$ l'aspettazione di $\Xi(A)$

$$P(A' \cap A_\epsilon) = P(A')P(A_\epsilon) = P(A)P(A_\epsilon)$$

Ma $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} P(A' \cap A_\epsilon) = P(A')$ e quindi $P(A)^2 = P(A)$, cioè $P(A) = 0$ o $P(A) = 1$. \heartsuit

Consideriamo ora alcuni importanti risultati relativi alla convergenza di successioni di variabili casuali: la *legge dei grandi numeri* e il *teorema del limite centrale*.

Premettiamo alcune definizioni generali di convergenza.

Definizione 14A.6

Sia ξ_i una successione di variabili casuali (a valori reali). Diciamo che la successione converge alla variabile casuale ξ

-

in probabilità (in misura) se

$$\forall \epsilon > 0 \quad \lim_{n \rightarrow \infty} P(|\xi_n - \xi| > \epsilon) = 0. \quad 14A.9$$

-

quasi certamente (almost surely) se per quasi tutti gli ω (cioè tranne che per un insieme di misura nulla)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n(\omega) = \xi(\omega). \quad 14A.10$$

◇

Notiamo che convergenza quasi certa implica convergenza in probabilità; il **converso** non è vero.

Sia $\{\xi_n\}$ una successione di variabili casuali con media finita $E(\xi_n) < \infty$.

Indichiamo con $\zeta_n = \frac{1}{n}(\xi_1 + \dots + \xi_n)$ la media aritmetica.

Utilizzando la legge 0-1 di Kolmogorov, si può dimostrare il Lemma di Borel-Cantelli, che dice essenzialmente che se $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ è una successione di variabili casuali indipendenti e ugualmente distribuite in uno spazio di probabilità Ω , la misura dell'insieme di ω per cui la serie $\sum_n \xi_n(\omega)$ converge può essere solamente 0 oppure 1.

Analogamente sotto le stesse condizioni può essere solamente 0 oppure 1 la misura dell'insieme delle ω per le quali vale

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \xi_k(\omega) = 0$$

Nel seguito identificheremo un insieme A con la sua funzione indicatrice η_A .

Lemma di Borel-Cantelli I

Sia A_n una successione di funzioni indicatrici misurabili (una successione di eventi) in uno spazio di probabilità $\{\Omega, \mathcal{F}, P\}$ e supponiamo che $\sum_n P(A_n) < \infty$.

Sia η_A la funzione indicatrice dell'insieme A dei punti ω per i quali esiste una successione infinita $\{n_i(\omega)\}$ per i quali valga $\omega \in A_{n_i}$, $i = 1, 2, \dots$.

Allora $P(A) = 0$ (con probabilità uno non ci sono insiemi con questa proprietà).

◇

Dimostrazione

Scriviamo A nel modo seguente.

$$A = \bigcup_{k=1}^{\infty} \bigcup_{n=k}^{\infty} A_n$$

Allora

$$P(A) \leq P(\cup_{n=k}^{\infty} A_n) \leq \sum_{n=k}^{\infty} P(A_n) \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty \quad 14A.11$$

Poiché $\sum_1^{\infty} P(A_k) < \infty$.

♡

Lemma di Borel-Cantelli II

Sia $\{A_n\}$ una successione di eventi mutuamente indipendenti in uno spazio di probabilità $\{\Omega, \mathcal{F}, P\}$ e supponiamo che $\sum_n P(A_n) = \infty$.

Sia η_A la funzione indicatrice dell'insieme A dei punti ω per i quali esiste una successione infinita $\{n_i(\omega)\}$ per i quali valga $\omega \in A_i, i = 1, 2, \dots, n$.

Allora A ha misura uno.

◇

Dimostrazione

Indichiamo con A^c il complemento di A in Ω . Scriviamo A^c come

$$A^c = \cup_{k=1}^{\infty} \cap_{n=k}^{\infty} A_n^c$$

e quindi $P(A^c) \leq \sum_{k=1}^{\infty} P(\cap_{n=k}^{\infty} A_n^c)$ per ogni n .

Siccome le A_n sono indipendenti anche le A_n^c sono indipendenti. Pertanto

$$P(\cap_{n=k}^{\infty} A_n^c) = \prod_{n=k}^{\infty} (1 - P(A_n)) = 0 \quad 14A.12$$

Poiché $\sum_{n=1}^{\infty} P(A_n) = \infty$.

♡

Diamo ora qualche indicazione su uno dei teoremi più utilizzati nelle applicazioni, la *legge dei grandi numeri*.

Premettiamo alcune *definizioni*.

Definizione 14A.7

La successione di variabili casuali ξ_n soddisfa

La *legge (debole) dei grandi numeri* se $\zeta_n - E(\zeta_n)$ converge a zero in probabilità quando $n \rightarrow \infty$ (cioè per ogni $\epsilon > 0$ si ha $\lim_{n \rightarrow \infty} P(|\zeta_n - E(\zeta_n)| = 0) = 0$).

La *legge forte dei grandi numeri* se $\zeta_n - E(\zeta_n)$ converge a zero quasi certamente (cioè per quasi tutti gli ω si ha $\lim_{n \rightarrow \infty} (\zeta_n - E(\zeta_n)) = 0$).

◇

Notiamo che nella legge debole non si esclude che gli insiemi considerati dipendano da n e quindi non si esclude che l'insieme in cui si ha convergenza abbia misura zero.

In questo contesto, valgono i seguenti Teoremi

Teorema di Kolmogorov I

Una successione di variabili casuali mutuamente indipendenti $\{\xi_i\}$ tale che valga $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^2} \text{Var}(\xi_i) < \infty$ soddisfa la legge forte dei grandi numeri.

◇

Teorema di Kolmogorov II

Una successione $\{\xi_n\}$ di variabili casuali mutuamente indipendenti e identicamente distribuite con medie $E(\xi_n)$ uniformemente limitate soddisfa la Legge forte dei grandi numeri.

◇

Nota 14A.2

Entrambe le leggi dei grandi numeri implicano che per una successione di variabili casuali $\{\xi_n\}$ la variabile casuale *media aritmetica* $m_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \xi_k$ quando N è molto grande differisce di poco dalla sua aspettazione (media in probabilità).

Quindi *asintoticamente non dipende da ω* .

In altre parole, la variabile casuale m_N tende, quando $N \rightarrow \infty$ a una variabile non casuale (una variabile certa). Questa proprietà si può esprimere dicendo che *regolarità non casuali appaiono con grande probabilità* in una lunga catena di variabili casuali.

L'affermazione che un gas occupa sempre tutto il volume disponibile è una versione empirica della legge dei grandi numeri.

♣

Noi daremo una dimostrazione solo del Teorema di Kolmogorov I .

Per la dimostrazione del Teorema II bisogna dimostrare che l'ipotesi che le ξ_k siano ugualmente distribuite e che la media sia finita implica $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^2} \text{Var}\xi_i < \infty$ (e quindi valgono le conclusioni del Teorema di Kolmogorov I).

Per questo si utilizzano le proprietà di una misura prodotto di misure identiche tra loro.

Per la dimostrazione del Teorema di Kolmogorov I facciamo uso della disuguaglianza di Kolmogorov che abbiamo dimostrato (eq. 14A.7) e che qui ricordiamo

$$P \left(\max_{1 \leq k \leq n} |(\xi_1 + \dots + \xi_k) - (E(\xi_1) + \dots + E(\xi_k))| \geq t \right) \leq \frac{1}{t^2} \sum_{i=1}^n \text{Var}(\xi_i)$$

Dimostrazione del Teorema di Kolmogorov I

Utilizzando eventualmente casuali $\xi_k - E(\xi_k)$ possiamo assumere che $E(\xi_k) = 0 \forall k$.

Dobbiamo dimostrare che $\zeta_N = \frac{1}{N} \sum_1^N \xi_i$ converge a zero quasi ovunque quando $N \rightarrow \infty$.

Fissiamo $\epsilon > 0$ e consideriamo l'evento (insieme misurabile) $\mathcal{B}(\epsilon)$ composto dai punti $\omega \in \Omega$ tali che esista $N = N(\omega)$ tale che per tutti gli $n \geq N(\omega)$ si abbia $|\zeta_n(\omega)| < \epsilon$.

Per definizione dunque

$$\mathcal{B}(\epsilon) = \cup_{N=1}^{\infty} \cap_{n>N(\omega)} \{\omega \mid |\zeta_n(\omega)| < \epsilon\} \quad 14A.13$$

Definiamo

$$\mathcal{B}_m(\epsilon) \equiv \{\omega \mid \max_{2^{m-1} \leq n \leq 2^m} |\zeta_n| \geq \epsilon\}$$

Dalla disuguaglianza di Kolmogorov abbiamo

$$\begin{aligned} P(\mathcal{B}_m(\epsilon)) &= P[\max_{2^{m-1} \leq n \leq 2^m} |\sum_{i=1}^n \xi_i| \geq \epsilon n] \\ &\leq P[\max_{2^{m-1} \leq n \leq 2^m} |\sum_{i=1}^n \xi_i| \geq \epsilon 2^{m-1}] \\ &\leq \frac{1}{\epsilon^2} 2^{2m-2} P[\sum_{i=1}^n \max_{1 \leq n \leq 2^m} |\sum_{i=1}^n \xi_i| \geq \epsilon 2^{m-1}] \sum_1^{2^n} \text{Var} \xi_i \end{aligned} \quad 14A.14$$

Ne deduciamo

$$\sum_{m=1}^{\infty} P(\mathcal{B}_m(\epsilon)) \leq \frac{1}{\epsilon^2} \sum_{i=1}^{\infty} \text{Var}(\xi_i) \sum_{n \geq m_i, 2^{m_i-1} \leq i \leq 2^{m_i}} \frac{1}{2^{2n-2}} \leq \frac{16}{\epsilon^2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\text{Var} \xi_i}{i^2}$$

e quest'ultima somma è finita per ipotesi.

Dal Lemma di Borel-Cantelli sappiamo che per quasi tutti gli ω esiste un intero $M(\omega)$ tale che per $m \geq M$

$$\max_{2^{m-1} \leq n \leq 2^m} |\zeta_n| < \epsilon \quad 14A.15$$

Pertanto $P(\mathcal{B}(\epsilon)) = 1$ per ogni $\epsilon > 0$. In particolare $P(\cap_k \mathcal{B}(\frac{1}{k})) = 1$

Se $\omega \in \cap_k \mathcal{B}(\frac{1}{k})$ allora esiste $N(\omega, k)$ tale che per ogni $n \geq N(\omega, k)$ si ha $|\zeta_n| < \frac{1}{k}$. Quindi, per quasi tutti gli ω si ha $\lim_{n \rightarrow \infty} \zeta_n = 0$.

♡

Un' importante conseguenza della legge forte dei grandi numeri è il *Teorema del Limite Centrale*.

Nella sua versione più comunemente nota questo teorema riguarda la somma di variabili casuali indipendenti e identicamente distribuite.

Esso ha un ruolo essenziale ad esempio in Meccanica Statistica; in questo contesto permette di connettere la Meccanica Statistica con la Termodinamica.

Per la legge dei grandi numeri (nella versione forte) la differenza tra la media aritmetica di N variabili casuali indipendenti ξ_k e la media aritmetica delle aspettative $E(\xi_k)$ converge a zero.

È naturale chiedersi quale è la velocità di convergenza.

Dalla disuguaglianza di **Chebicheff** si deduce che l'errore è di ordine di grandezza \sqrt{N} .

Pertanto è interessante studiare la convergenza di

$$\zeta_N \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N \xi_n, \quad E(\xi_k) = 0 \quad 14A.16$$

Il teorema del limite centrale afferma sostanzialmente che le variabili casuali ζ_N non convergono in generale a un limite, ma le loro distribuzioni hanno un limite che non dipende (sotto convenienti ipotesi) dai dettagli delle distribuzioni delle ξ_i .

Sarà conveniente ricordare la definizione *funzione caratteristica* di una variabile casuale.

Definizione 14A.8

La funzione caratteristica ϕ_ξ della variabile casuale ξ è per definizione

$$\phi_\xi(\lambda) \equiv E(e^{i\lambda\xi}) \quad \lambda \in R \quad 14A.17$$



È facile vedere che la funzione caratteristica ϕ_ξ individua completamente la *distribuzione* della variabile casuale ξ e che convergenza debole delle funzioni caratteristiche è equivalente alla convergenza in distribuzione (*non in probabilità*).

L'utilizzazione della funzione caratteristica semplifica l'analisi nel caso di somme di variabili casuali indipendenti.

Indichiamo con ζ_N la somma di N variabili casuali indipendenti ξ_i , $i = 1, \dots, N$.

È facile veder che la funzione caratteristica di ζ_N è il prodotto delle funzioni caratteristiche dei fattori

$$\phi_{\zeta_N}(\lambda) = \prod_{k=1}^N \phi_{\xi_k}(\lambda)$$

Con questa notazione vale

Teorema del Limite Centrale

Sia $\{\xi_1, \dots, \xi_n, \dots\}$ una successione di variabili casuali indipendenti e identicamente distribuite con comune distribuzione $f(x)$ tale che il momento secondo sia finito.

Indichiamo con $M = E(\xi_n)$ la loro comune aspettazione e con $\mathcal{V} = \text{Var}(\xi_n) = E(\xi_n^2) - (E(\xi_n))^2$ la loro comune varianza.

Allora quando $N \rightarrow \infty$ la distribuzione della somma bilanciata

$$\eta_N \equiv \frac{1}{\sqrt{Nv}} \sum_{n=1}^N (\xi_n - M) \quad 14A.18$$

converge debolmente verso la distribuzione gaussiana normale (che ha densità $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$).

◇

Dimostrazione

La funzione caratteristica della distribuzione gaussiana normale è

$$\phi(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} E(e^{i\lambda x - \frac{x^2}{2}}) = e^{-\frac{\lambda^2}{2}}$$

mentre la funzione caratteristica della variabile casuale η è data da

$$\phi_{\eta_N} = \phi\left(\frac{\lambda}{\sqrt{Nv}}\right) e^{-iN \frac{\lambda m}{\sqrt{Nv}}}$$

dove ϕ è la funzione caratteristica di ciascuna delle ξ_n .

È sufficiente dunque dimostrare che per ogni λ

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \phi_{\eta_N}(\lambda) = e^{-\frac{\lambda^2}{2}} \quad 14A.19$$

Poiché m_2 esiste la funzione $\phi(\lambda)$ è due volte differenziabile con derivata assolutamente continua.

Quindi per valori piccoli di λ si ha

$$\phi(\lambda) = 1 + im\lambda - \frac{\lambda^2}{2} m_2 + o(\lambda^2)$$

Ne segue che, per ciascun valore fissato di λ

$$\phi_{\eta_N} = 1 - \left(\frac{\lambda^2}{2N}\right) + o\left(\frac{\lambda^2}{N}\right)^N \rightarrow_{N \rightarrow \infty} e^{-\frac{\lambda^2}{2}} \quad 14A.20$$

(notare che i termini lineari in λ sommano a zero per simmetria).

♡

Nota 14A.3

Sono conosciute anche generalizzazioni del teorema limite centrale a casi più generali, come ad esempio al caso in cui le variabili casuali non abbiano la stessa distribuzione o siano solo approssimativamente indipendenti o ancora che si consideri somme pesate in modo diverso.

In particolare si può dimostrare che se le variabili casuali sono identicamente distribuite con funzione di distribuzione $p(x)$ con $p(x) = p(-x)$ e $p(x) \simeq \frac{c}{|x|^{\alpha+1}}$ per $\alpha \in (0, 2)$ allora la distribuzione della somma

$$\eta_N(\alpha) = N^{-\frac{1}{\alpha}}(\xi_1 + \dots + \xi_N)$$

converge per $N \rightarrow \infty$ a una distribuzione limite la cui funzione caratteristica ha la forma $Ce^{-b|\lambda|^\alpha}$, $b > 0$.



Terminiamo questa collezione di risultati nella teoria delle variabili casuali riguardante sistemi di variabili indipendenti analizzando teoremi che affermano l'esistenza di spazi di misura in cui immergere il sistema dato preservando le probabilità congiunte.

Queste costruzioni sono analoghe alla costruzione di spazi di probabilità prodotto (non necessariamente numerabile) di una collezione di spazi di probabilità. Va sempre notato che la costruzione (e quindi lo spazio di probabilità risultante) non è unica, e insiemi misurabili di misura piena in uno spazio ottenuto con una costruzione possono risultare di misura zero per un'altra costruzione.

Iniziamo con un teorema di Kolmogorov sull'esistenza di uno spazio di misura nel quale vengano realizzate tutte le variabili casuali di una collezione (non necessariamente numerabile) data mediante le probabilità congiunte.

Teorema 14A.1 (Kolmogorov)

Sia I insieme non necessariamente numerabile.

Sia \mathcal{F} la collezione dei sottoinsiemi finiti di I e assumiamo che per ogni $F \in \mathcal{F}$ esista una misura completamente additiva di massa uno μ_F sui boreliani $\mathcal{B}(R^{N(F)})$ (abbiamo indicato con $N(F)$ il numero di elementi in F)

Supponiamo che queste misure siano compatibili.

Allora esiste (X, M, μ) e funzioni $\{f_\alpha, \alpha \in I\}$ tali che μ_I sia la probabilità congiunta di $\{f_\alpha, \alpha \in I\}$. Inoltre, se \mathcal{F} è la più piccola σ -algebra che contiene tutte le f_α misurabili, la misura μ ottenuta è unica a meno di omeomorfismi.



Dimostrazione

Sia $\dot{R} \equiv R \cup \infty$ la compattificazione ad un punto della retta reale R , e poniamo

$$X \equiv (\dot{R})^I$$

Sia C_{fin} l'insieme delle funzioni che dipendono solo da un numero finito di α . Per $f \in C_{fin}$ definiamo

$$l(f) = \int f(x^I) d\mu_I(x^I) \tag{14A.21}$$

dove ξ^I è la collezione delle x_α da cui f dipende. Per costruzione X è compatto nella topologia prodotto. Per il teorema di Stone-Weierstrass C_{fin} è denso in $C(X)$ (nella topologia di $C(X)$). Infatti i polinomi in C_{fin} coincidono con quelli in $C(X)$.

Dunque il funzionale l si estende a $C(X)$. Per il teorema di rappresentazione di Riesz-Markov, essendo X compatto esiste una misura di Baire μ su X tale che

$$l(f) = \int f(x) d\mu(x) \quad 14A.22$$

Sia f_α uguale a ξ_α se $|x_\alpha| < \infty$, 0 altrimenti.

Allora se J è un insieme finito, $d\mu_I$ è la probabilità congiunta di f_α , $\alpha \in J$.

Questo dimostra l'esistenza.

Per dimostrare l'unicità, è sufficiente dimostrare che C_{fin} è denso in $L^2(X, d\mu)$. Sia dunque \mathcal{H} la chiusura di C_{fin} in $L^2(X, d\mu)$.

Se A è un boreliano in X , allora $\xi(A)$ (la funzione indicatrice di A) può essere approssimata in $L^2(X, d\mu)$ mediante funzioni continue, e quindi anche mediante $\xi(A_n)$, $A_n \subset B_{fin}$ (i Boreliani cilindrici con base finito dimensionale).

Dunque l'insieme delle $\xi(A)$ è chiuso per intersezioni finite. Poiché il complementare di un insieme cilindrico è anch'esso cilindrico, l'insieme delle $\xi(A)$ è anche chiuso per complementazione e per unione numerabile (per convergenza dominata).

Pertanto

$$\{A : \Xi(A) \in \mathcal{H}\} \quad 14A.23$$

è una σ -algebra.

Ma \mathcal{F} è la più piccola σ -algebra che contiene i boreliani. Se ne deduce che

$$\{A : \Xi(A) \in \mathcal{H}\} = \mathcal{H} \quad 14A.24$$

dunque

$$\mathcal{H} = L^2(X, d\mu)$$

♡

Nota 14A.4

Si può utilizzare R^I come modello Poiché

$$\mu\{x : \exists \alpha, |x_\alpha| < \infty\} = 1 \quad \forall \alpha$$

e, per ogni J finito

$$\mu\{x : |x_\alpha| = \infty \quad \forall \alpha \in J\} = 0 \quad 14A.25$$

Dalla σ -additività della misura si deduce allora che

$$\mu(\dot{R}^I - R^I) = 0$$



In molti casi dalla struttura della funzione caratteristica della misura si può individuare un sottospazio di \mathcal{D}' da cui può essere portata la misura in una specifica realizzazione.

Consideriamo il caso del teorema di Minlos e assumiamo che la funzione caratteristica Φ sia continua nella topologia di \mathcal{S} .

Vogliamo dimostrare che esiste una realizzazione tale che $\mu(\mathcal{S}') = 1$.

Per ogni funzione $f \in \mathcal{S}$ poniamo

$$f = \sum_n x_n \phi_n$$

dove ϕ_n è l'ennesimo polinomio di Hermite (trattiamo qui solo il caso di funzioni di una sola variabile reale; il caso R^d si tratta in modo analogo).

Poniamo

$$\mathcal{S}_M \equiv \{f : \sum_n (1+n^2)^M |x_n|^2 \equiv |f|_M^2 < \infty\} \quad 14A.26$$

dove M è un intero, positivo o negativo.

Si noti che i polinomi di Hermite costituiscono un sistema ortonormale rispetto alla misura di Gauss.

Si ha allora

$$\mathcal{S} \equiv \bigcap_M \mathcal{S}_M$$

(con la topologia di Frechet data dalle seminorme $|\cdot|_M$) e

$$\mathcal{S}' \equiv \bigcup_M \mathcal{S}_M$$

Con queste notazioni la dualità tra \mathcal{S} e \mathcal{S}' è rappresentata da

$$\eta(\xi) = \sum_n (x_n, y_n), \quad \eta \in \mathcal{S}' \quad \xi \in \mathcal{S}$$

$$\eta \equiv \{y_n\}, \quad \xi \equiv \{x_n\}$$

Per dimostrare che $\mu(\mathcal{S}') = 1$, dato $\epsilon > 0$ scegliamo M e δ così che

$$|\xi|_M < \delta \quad \rightarrow \quad |\Phi(\xi) - 1| < \epsilon \quad 14A.27$$

Questo è possibile perché Φ è continuo in \mathcal{S} e la topologia di \mathcal{S}' è data dalle seminorme $|\cdot|_M$.

Ne deduciamo che

$$\Re \Phi(\xi) \geq 1 - \epsilon - \frac{2}{\delta^2} |\xi|_M^2, \quad \forall \xi \in \mathcal{S} \quad 14A.28$$

Infatti se $|\xi|_M < \delta$ la disuguaglianza è ovvia. Se $|\xi|_M \geq \delta$ si utilizza l'indentità $\Re \Phi(\xi) > -1$. Quest'ultima disuguaglianza segue da $\Phi(\xi) \leq \Phi(0)$.

Notare che l'intero M in (14A.27) dipende in generale da ϵ .

Fissiamo ora $\{q_n\}$ e definiamo su R^N

$$d\sigma_{\alpha,n} = \Pi_1^N (2\pi\alpha q_n)^{-1} e^{-\sum \frac{y_n^2}{2\alpha q_n}} dy_n \quad 14A.29$$

Si ha

$$\int d\sigma_{\alpha,n} = 1, \quad \int y_i y_j d\sigma_{\alpha,n} = \alpha q_j \delta_{i,j} \quad \int e^{i(z,y)} d\sigma_{\alpha,n} = e^{-\frac{\alpha}{2} \sum q_n z_n^2} \quad 14A.30$$

Consideriamo la funzione definita su S' da

$$\psi(\eta) = \int e^{i(\eta,y)} d\sigma_{\alpha,n}(y), \quad \eta = \sum_1^N z_n P_n(x) + \eta'$$

$$z = z(\eta), \quad \int \eta' P_k(x) dx = 0, \quad k \leq N \quad 14A.31$$

Abbiamo indicato con P_n l'ennesimo polinomio di Hermite. Si ha

$$\int_{S'} \psi(\eta) d\mu_\eta = \int d\mu \int e^{i(z(\eta,y))} d\sigma_{\alpha,n}(y)$$

$$\Re \psi(\eta) \geq \inf_y \Re \Phi(y) \quad 14A.32$$

dove la relazione tra le $y \equiv \{y_1, y_2, \dots\}$ e i loro rappresentativi nello spazio delle funzioni in S è data da

$$y \equiv \sum y_k P_k(x)$$

Da (14A.32), (14A.30) si deduce

$$\int_{S'} d\mu e^{-\frac{\alpha}{2} \sum q_n x_n^2} \geq 1 - \epsilon - \frac{2\alpha}{\delta^2}$$

se

$$\sum_n q_n (1 + n^2)^M \equiv K_M \leq +\infty$$

Prendendo ora il limite $\alpha \rightarrow 0$ e utilizzando la convergenza dominata si ha infine

$$\mu\{\eta : \sum_n q_n x_n^2 < +\infty\} > 1 - \epsilon \quad 14A.33$$

Poiché M dipende in generale da ϵ si deduce che per ogni ϵ la misura di un opportuno sottoinsieme di S' (che dipende in generale da ϵ in modo non monotono) è maggiore di $1 - \epsilon$. Dunque $\mu(S') = 1$.

Nei casi in cui si può scegliere M indipendente da ϵ si può concludere che, se $\{q_n\}$ sono tali che

$$\sum q_n(1+n^2)^M < \infty \quad 14A.34$$

allora la misura si può scegliere essere concentrata sull'insieme

$$\{\eta : \eta = \sum x_n P_n(x) \quad \sum q_n x_n^2 < \infty \quad 14A.35$$

Tuttavia anche questo risultato non è ottimale.

Ad esempio se queste considerazioni si applicano alla misura di Wiener esse portano a concludere che per ciascun valore di ϵ esiste una rappresentazione in cui hanno misura piena le traiettorie descritte da funzioni in $H_{-1/2-\epsilon}$ e le traiettorie continue formano un insieme che è contenuto in un insieme misurabile di misura zero.

Ma noi già sappiamo che esiste una realizzazione in cui le funzioni continue costituiscono un insieme di misura piena.

Nota 14A.5

Quest'ultima considerazione è particolarmente importate quando si cerca di costruire una misura sulle traiettorie a valori distribuzioni in R^{d+1} , come si deve fare nella trattazione dei campi quantizzati (d è il numero di dimensioni dello spazio, un punto di R^{d+1} verrà indicato con $\{x, t\}$, $x \in R^d$; il caso che abbiamo trattato in questo capitolo è il caso di dimensioni spaziali zero).

Per definire il campo quantizzato a tempo fissato t_0 è necessario che sia misurabile una *funzione di valutazione* a tempo fissato, e per questo è necessario che le traiettorie che costituiscono lo spazio di probabilità siano continue in t (e assumano valori, ad esempio in $\mathcal{S}'(R^d)$).

La costruzione della misura Gaussiana nel caso $d \geq 1$ con stime tipo Kolmogorov non è sufficiente per questo proposito.

Si può procedere alternativamente costruendo la misura (e il suo spazio) con un procedimento che è simile a quello utilizzato da Wiener (utilizzando opportune generalizzazioni del moto browniano) o costruendo una specifica realizzazione del processo in cui per una successione $f_n(x, t) \rightarrow g(x) \delta(t)$ con f_n e g funzioni regolari il limite $\xi(g(x), \delta(t)) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \xi(f_n(x, t))$ esiste come funzione misurabile.



APPENDICE 14B: COSTRUZIONI ALTERNATIVE DEL MOTO BROWNIANO

Diamo in questa appendice due descrizioni del moto browniano alternative a quella descritta nel corso del capitolo.

Una è la descrizione originale di Wiener, l'altra è sostanzialmente la formulazione data da Einstein come limite della passeggiata aleatoria.

1) *Costruzione del moto Browniano data da Wiener.*

Siano c_1, c_2, \dots variabili gaussiane indipendenti di media zero e varianza uno. Utilizzando opportune stime della misura del sottoinsieme insieme di Ω in cui una variabile casuale eccede un valore prefissato (stime di Kolmogorov, vedi Appendice 14.A) e teoremi elementari di teoria della misura, in particolare relativi a misure prodotto, si può dimostrare che la serie

$$X_N(t) \equiv c_0 t + \sum_{n=1}^N \sum_{k=2^{n-1}}^{2^n} c_n \frac{\sqrt{2} \sin \pi k t}{\pi k} \tag{14B.1}$$

converge *in distribuzione* (cioè le distribuzioni convergono in $L^1(R)$) uniformemente nei compatti con probabilità uno quando $N \rightarrow \infty$.

Per il lemma di Borel-Cantelli ha misura zero l'insieme delle ω tali che le distribuzioni della successione

$$X_N(t, \omega) \equiv c_0 t + \sum_{n=1}^N \sum_{k=2^{n-1}}^{2^n} c_n(\omega) \frac{\sqrt{2} \operatorname{sen} \pi k t}{\pi k} \tag{14B.2}$$

non convergono uniformemente in $L^1(R)$.

La funzione limite (14B.1) è continua ed è zero per $t = 0$ Poiché ciascun termine è zero.

Ne deduciamo che per ogni fissato valore di $T \in R^+$ abbiamo posto una corrispondenza Φ_T tra un insieme di misura piena Y di punti ω nello spazio di probabilità (Ω, M, μ) e funzioni continue in $[0, T]$ nulle nell'origine.

Definiamo ora una misura di probabilità μ' sulle funzioni continue X_T in $[0, T]$ nulle all'origine mediante

$$\mu'(\Phi_T^{-1}(Y)) = \mu(Y), \quad \mu'(X_T - \Phi_T^{-1}(Y)) = 0$$

Questa misura è la *misura di Wiener*.

Wiener ha dimostrato che Y è denso in X_T nella topologia delle funzioni continue.

Si noti che le $X_n(t)$ sono per ogni t variabili casuali gaussiane, (essendo somme di variabili gaussiane indipendenti) e quindi è una variabile gaussiana anche il loro limite in distribuzione

$$\xi_t(\omega) = \lim_{N \rightarrow \infty} X_N(t) \tag{14B.3}$$

Data la corrispondenza tra un insieme di misura uno in Ω e un insieme denso di funzioni continue, la funzione ξ_t può essere riguardata come un elemento nel duale delle funzioni continue.

Dalle definizioni segue che ξ_{t_0} associa alla funzione $x(t)$ il numero $x(t_0)$.

Dalla definizione si verifica anche che

$$E(\xi_t) = 0 \tag{14B.4}$$

Eguale, utilizzando le formule di prostaferesi e l'indipendenza delle c_k , ed effettuando il limite che definisce ξ_t , si dimostra

$$E(\xi_t \xi_s) = \int \xi_t(x(\cdot)) \xi_s(x(\cdot)) d\mu' = \min(t, s) \tag{14B.5}$$

Poiché le ξ_t sono variabili gaussiane, le (14B.4) e (14B.5) determinano completamente la loro distribuzione.

Da (14B.5) si vede che le variabili casuali ξ_s e ξ_t *non sono indipendenti*.

Nota 14B.1

Abbiamo assunto che le variabili casuali abbiano valore in R .

Un'analogia costruzione si può effettuare supponendo che le c_k abbiano valore in R^d e che, data una base in R^d , le c_k^s siano per ogni scelta distinta degli indici, variabili gaussiane indipendenti di media zero e varianza uno.

Si ottiene così il processo di Wiener in R^d .

Il caso in cui le c_k abbiano valore in uno spazio di Banach X di dimensione infinita è molto più delicato.

Notiamo che nel caso di R^n per la costruzione abbiamo utilizzato il fatto che la classe delle funzioni continue è chiusa per convergenza uniforme, e che la convergenza in (14B.2) è nella topologia uniforme (eccezion fatta per un insieme di misura nulla).

La dimostrazione di quest'ultima affermazione utilizza il fatto che i chiusi e limitati in R^n sono compatti, e questo non è vero in uno spazio di Banach X di dimensione infinita.

Vedremo nel cap. 19 che, attraverso la teoria della forma di Dirichlet, è possibile definire dei processi in spazi di Banach (ad esempio in spazi di funzioni) che giocano un ruolo analogo a quello del processo di Wiener.



Nota 14.B.2

La rappresentazione che abbiamo dato del processo di Wiener è molto adatta a dare stime su una possibile regolarità di una generica traiettoria, utilizzando teoremi sulla convergenza delle serie di Fourier.

Utilizzando le stime di Kolmogorov (App.14.A) si può in particolare dimostrare che ha misura zero l'insieme delle ω per cui il limite è una funzione assolutamente continua.

Per un approfondimento sulla nota 14B.2 si può vedere ad esempio [IMK65]



2) Moto Browniano come limite di passeggiate aleatorie

Diamo ora una costruzione del moto Browniano come limite di una *passeggiata aleatoria*; questa costruzione è nello spirito dell'analisi del moto browniano fatta da Einstein.

Consideriamo il caso di dimensione spaziale uno e studiamo il moto di una particella pesante che si muove per causa di urti elastici con particelle di massa molto piccola che non interagiscono tra loro.

Questo è il modello introdotto da Einstein [E08] per formalizzare matematicamente il fenomeno descritto da R.Brown nel 1927 [B27] del movimento erratico delle particelle di polline sospese in acqua.

Einstein descrisse il moto del polline come dovuto agli urti con il polline da parte delle molecole d'acqua, molto più leggere.

Le teoria di Einstein fu verificata sperimentalmente da J.Perrin [P09] che la utilizzò per dare una stima precisa del numero d'Avogadro. Gli esperimenti di Perrin costituirono all'epoca la più notevole evidenza dell'esistenza di atomi e molecole.

Consideriamo il moto in una dimensione spaziale. Le particelle leggere provengono a caso da destra e da sinistra; ad ogni unità di tempo una particella leggera urta quella pesante, e questa si muove a destra o a sinistra di un'unità di spazio. Siccome la provenienza delle particelle leggere è casuale, se la particella pesante all'istante iniziale si trova all'origine delle coordinate, dopo n unità di tempo *microscopico* la particella pesante si troverà nella posizione data da $\sum_{i=1}^n \xi_i$ dove ξ_i sono variabili casuali indipendenti con distribuzione $P(\xi_i = \pm 1) = \frac{1}{2}$.

Su scala *macroscopica* per ogni intervallo di tempo avvengono ϵ^{-2} urti e lo spostamento in ciascun urto è di ϵ . Dopo un tempo macroscopico t le particella pesante sarà nel punto $X_\epsilon(t) = \epsilon \sum_{i=1}^{\epsilon^{-2}t} \xi_i$.

Costruiamo il moto Browniano come limite in distribuzione della variabile casuale $X_\epsilon(t)$.

Più generalmente consideriamo un misura di probabilità su R , con boreliani $\mathcal{B}(R)$, tale che $\int x^4 d\mu < \infty$ e normalizzata a

$$\int d\mu(x) = 1, \quad \int x d\mu(x) = 0 \quad \int x^2 d\mu(x) = 1$$

Costruiamo lo spazio prodotto

$$(\Omega, \mathcal{F}, P) = \otimes_{i=1}^{\infty} (R, \mathcal{B}(R), \mu) \tag{14B.6}$$

con elementi ξ .

Per $\epsilon > 0$ e per interpolazione definiamo per ciascuna realizzazione di ξ una traiettoria continua $t \rightarrow \psi_\epsilon(\xi; t)$ mediante

$$\psi_\epsilon(\xi; t) = \epsilon \sum_{i=1}^{[\epsilon^{-2}t]} \xi_i + \epsilon(\epsilon^{-2}t - [\epsilon^{-2}t])\xi_{[\epsilon^{-2}t]+1} \tag{14B.7}$$

dove $[y]$ è la parte intera di y .

Definiamo $P_\epsilon(A) = P(\psi_\epsilon^{-1}(A))$ per ogni insieme cilindrico A di traiettorie misurabile.

Teorema 14B.1

La successione di misure P_ϵ converge debolmente quando $\epsilon \rightarrow 0$ alla misura di Wiener.

◇

Dimostrazione

La dimostrazione procede in tre passi:

i)

La distribuzione al tempo generico t converge alla distribuzione del moto Browniano al tempo t .

ii)

Le distribuzioni finito dimensionali convergono a quelle del moto Browniano.

iii)

La famiglia P_ϵ è relativamente compatta.

i)

Questo è una conseguenza del teorema del limite centrale (vedere appendice 14.A).

Introduciamo la funzione caratteristica $\phi_\epsilon(\lambda)$, trasformata di Fourier della distribuzione della variabile casuale $\xi_\epsilon(t)$ sotto P_ϵ .

La convergenza in distribuzione è equivalente alla convergenza della funzione caratteristica. La funzione caratteristica della somma di variabili indipendenti è il prodotto della funzioni caratteristiche

$$\phi_\epsilon(\lambda) = \phi_\epsilon(\lambda\epsilon)^{\frac{t}{\epsilon^2}} = \left[1 - \frac{1}{2}\lambda^2\epsilon^2 + o(\epsilon^2) \right]^{\frac{t}{\epsilon^2}} \quad 14B.8$$

e

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \phi_\epsilon(\lambda) = e^{-\frac{1}{2}\lambda^2 t}$$

ii)

Tenendo presente questa proprietà si dimostra che il termine che abbiamo aggiunto per ottenere una traiettoria continua, cioè

$$\epsilon(\epsilon^{-2}t - [\epsilon^{-2}t])\xi_{[\epsilon^{-2}t]+1} \quad 14B.9$$

tende a zero uniformemente per $\epsilon \rightarrow 0$.

Omesso questo termine, l'affermazione segue dal fatto che P è una misura prodotto.

iii)

Consideriamo uno spazio metrico X e siano $\mathcal{B}(X)$ i suoi boreliani; denotiamo con $\mathcal{C}(X)$ le funzioni continue da X a \mathbb{R} .

Una famiglia di misure di probabilità P_n su X è detta essere relativamente compatta se e solo se da ogni successione limitata P_n possiamo estrarre una successione debolmente convergente, cioè tale che esista una misura di probabilità P tale che $\lim_{n \rightarrow \infty} \int f dP_n = \int f dP$ per ogni $f \in \mathcal{C}(X)$ limitata.

Denoteremo la convergenza debole con $P_n \rightarrow_w P$.

La convergenza debole è equivalente alla convergenza puntuale delle funzioni caratteristiche.

Nel nostro caso il punto 1) garantisce che il limite, se esiste, è unico. Quindi in questo caso se si dimostra compattezza si garantisce convergenza di tutte le sottosuccessioni a uno stesso limite e quindi convergenza forte.

Per dimostrare la compattezza relativa nel caso generale e concludere quindi la dimostrazione del teorema 14B.1 si può utilizzare il *criterio di Prohorov* (vedere ad esempio [B68]: questo libro contiene una discussione dettagliata della convergenza debole e dei criteri di compattezza).

Questo criterio afferma che condizione sufficiente perché la successione Π sia *tight* è che essa sia relativamente compatta.

Se inoltre X è completo e separabile, la condizione è anche necessaria.

Ricordiamo che una collezione Π_n di misure di probabilità su uno spazio metrico si dice *tight* (*stretta*) se e solo se per ogni $\epsilon > 0$ esiste un compatto \mathcal{K} per il quale $P(\mathcal{K}) > 1 - \epsilon$ per ogni $P \in \Pi$.

Nel caso $X = \mathbb{R}^d$, $d < \infty$ possiamo caratterizzare la convergenza debole attraverso la funzione caratteristica (la trasformata di Fourier della distribuzione)

$$\phi(\lambda) \equiv \int e^{i\lambda x} \mu(dx) \tag{14B.10}$$

E possiamo dimostrare compattezza utilizzando il teorema di Ascoli-Arzelà, che caratterizza i compatti di $C(\mathbb{R}^d)$ (le funzioni continue su \mathbb{R}^d).

Definendo il *modulo di continuità* di $x(t) \in C(\mathbb{R}^d)$ mediante

$$\omega_x(\delta) \equiv \sup_{|t-s| < \delta} |x(t) - x(s)|$$

il teorema di Ascoli-Arzelà afferma che un insieme $A \in C$ ha chiusura compatta se e solo se

$$\sup_{x \in A} |x(0)| < \infty, \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{x \in A} \omega_x(\delta) = 0$$

Dalla definizione segue che se A ha chiusura compatta, allora i suoi elementi sono equilimitati ed equicontinui.

È allora facile vedere che in questo caso una successione P_n è *tight* se e solo se
i)

Per ogni $\eta > 0$ esiste $a > 0$ tale che

$$P_n(x : |x(0)| > a) \leq \delta \quad \forall n \geq 1$$

ii)

Per ogni $\eta > 0$, $\epsilon > 0$ esistono $\delta \in (0, 1)$ e $n_0 \in N$ tali che

$$P_n(x : \omega_x(\delta) \geq \epsilon) \leq \eta \quad \forall n \geq n_0$$

Tornando ora alla costruzione della misura di Wiener, notiamo che per $0 \leq s < t \leq T$ tali che $\epsilon^{-2}t$ e $\epsilon^{-2}s$ siano numeri interi si ha

$$\begin{aligned} \int dP_\epsilon |x(t) - x(s)|^4 &= E \left(\epsilon \sum_{i=\epsilon^{-2}s+1}^{\epsilon^{-2}t} \xi_i \right)^4 \\ &= \epsilon^4 \sum_{i=\epsilon^{-2}s+1}^{\epsilon^{-2}t} E(\xi_i^4) + 6\epsilon^4 \sum_{\epsilon^{-2}s+1 \leq i < j \leq \epsilon^{-2}t} E(\xi_i^2 \xi_j^2) \leq C(\epsilon^2(t-s) + (t-s)^2) \leq 2C(t-s)^2 \end{aligned}$$

Si può vedere, per interpolazione, che questa disuguaglianza vale senza limitazioni per $0 \leq s \leq t \leq T$.

Notiamo ora che se esistono $\alpha, \beta > 0$ e $C < \infty$ tali che

$$E(|x(t) - x(s)|^\beta) \leq C|t - s|^{1+\alpha} \tag{14B.11}$$

allora esistono $c_1, c_2 < \infty$ tali che

$$P \left(\sup_{0 \leq s \leq t \leq T} \frac{|x(t) - x(s)|^\beta}{|t - s|^{1+\alpha}} \geq c_1 \lambda \right) \leq c_2 \frac{1}{\lambda} \tag{14B.12}$$

Questa disuguaglianza, una versione della disuguaglianza di Tchebicheff, detta sovente disuguaglianza di Garcia, può essere trovata ad esempio sul libro di Billingsley.

Da (14B.12) scegliendo $\alpha = 1$ e $\beta = 4$ e con le notazioni introdotte segue

$$P_\epsilon(x, \omega_x/\delta) \geq \eta \leq P_\epsilon \left(\delta^\beta \sup_{|t-s| \leq \delta} \frac{|x(t) - x(s)|}{|t - s|^\beta} \geq \eta \right) \leq c_2 \left(c_1 \frac{\delta^\beta}{\eta} \right)^4$$

da cui

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{\epsilon > 0} P_\epsilon(x : \omega_x(\delta) \geq \eta) = 0$$

e questo implica compattezza relativa.

♡

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [AH77] S.Albeverio, R.Hoegh-Krohn *Invent. Math.*40, 59-106, (1977).
- [A04] S. Albeverio et al. *Rigorous Feynman path integrals, with applications to quantum theory, gauge fields, and topological invariants*, Stoch. Analysis and Math. Physics, 1-60, World Sci. Publishing, River Edge, NJ, (2004) .
- [BK95] Yu. Berezansky, Yu. Kondriatev *Spectral Methods in infinite-dimensional analysis* Kluwer, Dordrecht, (1995).
- [B68] P.Billingsley *Convergence of Probability Measures* Wiley New York (1968).
- [B27] R.Brown, *Philosophical Magazine* 4, 161-173, (1828).
- [E08] A. Einstein *zur Theorie der Brownschen bewegung*, Ann. del Physik 19, 180-188, (1828).
- [F80] D.Fujiwara, *Duke Math. Journal* , 47, 559-600, (1980).
- [HK93] T.Hida, H.Kuo, J.Pothoff, L.Streit *White noise, an infinite dimensional calculus* Kluwer Acad. Press, London, (1993).
- [IMK5] K.Ito, H.Mc Kean *Diffusion processes and their sample paths* Springer, (1965).
- [K96] H.H.Kuo, *White Noise Distription Theory* CRC press New York and Tokyo, (1996).
- [M09] S.Mazzucchi *Mathematical Feynman Integrals and their Applications* , World Scientific, (2009).
- [M51] C.Morette, *Phys Rev.* .81, 848-852, (1951).
- [P09] J.Perrin *Mouvement Brownien et réalité moleculaire* , Annales de Chemie et de Physique 8, 5-114 , (1909).
- [Y79] K.Yajima *Comm. Math. Phys.*, 69, 101-129, (1979).

CAPITOLO 15
FORME QUADRATICHE. ESTENSIONE DI FRIEDRICHS.

Le forme quadratiche intervengono in modo naturale in Meccanica Quantistica, e alcune di esse (le forme di Dirichlet) permettono di dimostrare l'autoaggiuntezza di hamiltoniane di Schrödinger, in particolare in casi in cui il potenziale non è piccolo nel senso di Kato rispetto al laplaciano.

Questo è ad esempio il caso di forze che hanno supporto in un insieme di misura di Lebesgue nulla ma di capacità newtoniana finita.

Inoltre le forme quadratiche per loro stessa natura si prestano bene all'applicazione di metodi di minimax (ad esempio per una stima del numero di stati legati) e possono essere anche utili nello studio della convergenza di una successione di operatori.

Una forma quadratica positiva chiusa definisce in modo intrinseco un operatore autoaggiunto positivo (la sua estensione di Friedrichs) che è in qualche modo l'estensione minimale degli operatori simmetrici associati a quella forma quadratica.

L'estensione di Friedrichs è anche connessa alla teoria di dualità di Tomita e Takesaki per algebre di von Neumann e ai risultati di dualità per coni positivi in uno spazio di Hilbert in cui agisce un'algebra di von Neumann che ha un vettore ciclico e separante.

Questa teoria ha a sua volta molte connessioni con la condizione K.M.S. che abbiamo brevemente analizzato nel Capitolo 4 e abbiamo lì associato all'esistenza di stati di equilibrio in Meccanica Statistica Quantistica.

In appendice a questo capitolo diamo elementi della costruzione dell'*operatore modulare* associato a uno stato normale ciclico di un'algebra di Von Neumann e indichiamo la connessione con l'estensione di Friedrichs.

Accenneremo anche in questa appendice alla relazione dell'operatore modulare con la teoria della dualità tra algebre di von Neumann e loro commutanti e faremo brevi cenni alla teoria dell'integrazione non-commutativa e alla teoria dei coni duali (teoria di Tomita-Takesaki).

Iniziamo lo studio delle forme quadratiche, in particolare di quelle associate all'operatore di Schrödinger, con alcune considerazioni semi-qualitative; in queste prime considerazioni studiamo il caso di dimensione uno.

Sia $\rho(x)$ una funzione di variabile reale, strettamente positiva di classe C^1 , integrabile rispetto alla misura di Lebesgue e di integrale uno.

Consideriamo in $L^2(R)$ (sottintendiamo sempre la misura di Lebesgue) la forma quadratica definita su C_0^∞ dalla seguente espressione

$$q(f, g) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{f}}{dx} \frac{dg}{dx} \rho(x) dx, \quad f, g \in C_0^\infty(R) \quad 15.1$$

Questa forma quadratica può essere estesa per continuità ad una forma chiusa \bar{q} , con dominio

$$Q(\bar{q}) \equiv \left\{ f : \int \left| \frac{df}{dx} \right|^2 \rho(x) dx < \infty \right\}$$

È facile vedere che $Q(\bar{q})$ ha la struttura di un prespazio di Hilbert, ma in generale non è contenuto (né contiene) L_ρ^2 definito nel modo seguente

$$u \in L_\rho^2 \Leftrightarrow \int |u(x)|^2 \rho(x) dx < \infty$$

Convienne allora studiare la forma quadratica

$$q_1(f, g) \equiv \int \frac{d\bar{f}}{dx} \frac{dg}{dx} \rho(x) dx + \int \bar{f}(x)g(x)\rho(x) dx$$

e la sua chiusura \bar{q}_1 con dominio $Q(\bar{q}_1) \equiv \{f : q_1(f, f) < \infty\}$.

Poiché ρ è di classe C^1 strettamente positiva integrando per parti si ottiene

$$q_1(f, g) = \int \bar{f} \left[-\frac{d^2g}{dx^2} - \frac{d \log \rho(x)}{dx} \frac{dg}{dx} \right] \rho(x) dx + \int \bar{f}g \rho(x) dx \quad 15.2$$

L'espressione (15.2) definisce, almeno da un punto di vista formale e in forma debole, un operatore su un opportuno sottoinsieme di L_ρ^2 . Questo operatore può essere scritto formalmente come

$$-\frac{d^2}{dx^2} - \frac{d \log \rho}{dx} \frac{d}{dx} + 1 \quad 15.3$$

Vedremo nel seguito di questo capitolo che ad ogni forma quadratica chiusa e limitata dal basso (come è \bar{q}_1) corrisponde *in modo canonico un unico operatore autoaggiunto* (detto *estensione di Friedrichs* della forma quadratica).

Ne deduciamo che all'operatore descritto in (15.3) corrisponde un operatore autoaggiunto.

Se ρ non è differenziabile le manipolazioni in (15.2) sono formali, tuttavia q definisce ancora una forma quadratica positiva definita sulle funzioni di classe C^1 , che in circostanze favorevoli si può dimostrare essere chiudibile.

È possibile allora associare ad essa un operatore autoaggiunto. In particolare se $\rho(x)$ è la funzione indicatrice dell'intervallo $(0, 1)$ si ottiene formalmente un

operatore A che agisce come $-\frac{d^2}{dx^2}$ sulle funzioni due volte differenziabili definite nell'intervallo aperto $(0, 1)$.

Abbiamo visto nel Capitolo 9 che questo operatore è simmetrico ma non autoaggiunto.

È naturale chiedersi quale sia l'estensione autoaggiunta che corrisponde all'estensione di Friedrichs.

Nel corso di questo capitolo dimostreremo che si tratta dell'estensione autoaggiunta con condizioni di Neumann al bordo.

Scegliendo invece

$$\rho(x) = 1 - |x|, \quad x \in (-1, 1) \quad \rho(x) = 0, \quad |x| \geq 1$$

si ottiene l'operatore

$$-\frac{d^2}{dx^2} - (1 - |x|)^{-1} \frac{d}{dx} + 1$$

su funzioni con supporto in $|x| < 1$.

Anche questo operatore è simmetrico ma non autoaggiunto. Una sua possibile estensione si ottiene definendolo essere uguale a zero per $|x| > 1$.

Vedremo che questo operatore esteso è autoaggiunto ed è l'estensione di Friedrichs associata alla forma q_1 in questo caso.

In generale, quale è il senso che deve essere dato a (15.2) e nel caso che la forma quadratica sia limitata dal basso? Che relazione intercorre tra le funzioni f tali che $q_1(f, f) < \infty$ e il supporto dell'operatore autoaggiunto associato?

Per il momento supponiamo che $\rho(x)$ sia di classe C^2 , limitata e che il suo supporto sia l'intero asse reale.

Consideriamo l'isometria $\Phi : L^2(R, \rho(x)dx) \xrightarrow{\Phi} L^2(R, dx)$ definita da $\Phi(f) = \rho^{1/2}f$.

Possiamo considerarla definita inizialmente sulle funzioni f tali che $\rho^{1/2}f$ sia limitata e a quadrato integrabile. Per queste funzioni si ha

$$\int |\Phi(f)(x)|^2 dx = \int |f(x)|^2 \rho(x) dx$$

e Φ si può estendere a un corrispondenza unitaria tra gli spazi di Hilbert $L^2_\rho(R)$ ed $L^2(R)$.

Nel seguito, salvo menzione contraria, utilizziamo lo stesso simbolo per indicare forme quadratiche ottenute una dall'altra per una corrispondenza unitaria di questo tipo e indicheremo sempre con $Q(q)$ il dominio della forma q .

Consideriamo solo forme chiudibili.

Posto $F = \Phi(f)$, $f = \Phi^{-1}(F)$ si ha

$$q(F, G) = \int \rho(x) \frac{d}{dx} (\bar{F}(x) \rho^{-\frac{1}{2}}) \frac{d}{dx} (G(x) \rho^{-\frac{1}{2}}) dx \quad 15.4$$

Svolgendo i calcoli, nell'ipotesi che $\rho \in C^2$ sia strettamente positiva e che F e G siano di classe C^2 e a supporto compatto (in modo da non avere problemi con l'integrazione per parti) si ottiene

$$q(F, G) = \int \overline{F}(x) \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \frac{\rho''}{\rho} - \frac{1}{4} \frac{(\rho')^2}{\rho^2} \right] G(x) dx \quad 15.5$$

Definendo

$$V_\rho(x) \equiv \frac{1}{2} \frac{\rho''}{\rho} - \frac{1}{4} \frac{(\rho')^2}{\rho^2} \quad 15.6$$

la forma quadratica assume la seguente forma, per tutte le funzioni G nell'intersezione di $C^2(R)$ con il dominio di forma

$$q(F, G) = \int \overline{F} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_\rho \right) G(x) dx$$

così che la forma quadratica risulta associata alle restrizioni alle funzioni di classe C^2 a supporto compatto dell'operatore $-\frac{d^2}{dx^2} + V_\rho$ in $L^2(R, dx)$.

Ne concludiamo che, se la forma quadratica q definisce un operatore autoaggiunto, esso deve essere una delle estensioni autoaggiunte di $-\frac{d^2}{dx^2} + V_\rho$ definito inizialmente su C_0^2 .

Reciprocamente, ci aspettiamo che data la funzione $V_\rho(x)$, se la (15.6) *letta come equazione per $\rho(x)$* ha una soluzione positiva e integrabile, l'operatore di Schrödinger $H = -\frac{d^2}{dx^2} + V_\rho$ con dominio di definizione $D(H_\rho)$ sia connesso da una trasformazione unitaria all'operatore

$$H_\rho = -\frac{d^2}{dx^2} - \left(\frac{d}{dx} \log \rho(x) \right) \frac{d}{dx} \quad 15.7$$

definito su un opportuno sottoinsieme denso di L_ρ^2 .

Notiamo che se la soluzione di (15.6) soddisfa

$$\rho(x) \geq 0, \quad \int \rho(x) dx < \infty, \quad \rho \in C^1$$

l'operatore (15.7) ha un autovalore nullo e la corrispondente autofunzione è una funzione costante.

Ne segue, poiché la trasformazione è unitaria, che anche l'operatore $-\frac{d^2}{dx^2} + V_\rho$ è non negativo e ha un autovalore nullo, con autofunzione $\rho^{1/2}$.

Vedremo in seguito che se $\rho(x)$ soddisfa ulteriori ipotesi (ad esempio di essere strettamente positiva) l'autovalore 0 è non degenere e studieremo, utilizzando la relazione con le forme quadratiche, condizioni sufficienti affinché lo spettro dell'operatore $-\frac{d^2}{dx^2} + V_\rho$ sia $\sigma \equiv \{0\} \cup [a, \infty)$ con $a > 0$.

Qui notiamo solo che se

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V\right)\phi_0 = 0, \quad \phi_0 \geq 0$$

si ha

$$V \equiv \frac{\frac{d^2}{dx^2}\phi_0}{\phi_0} \tag{15.8}$$

per cui V è determinato da (15.6).

Posto $\phi_0 \equiv \rho^{1/2}$ si vede che (15.6) e (15.8) coincidono.

Viceversa, dato un operatore di Schrödinger della forma

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + a(x)\frac{d}{dx}$$

se esiste una funzione positiva $\rho(x) \in L^1$ tale che $a(x) = \frac{d \log \rho(x)}{dx}$ allora H è un operatore simmetrico positivo su L^2_ρ .

Se la funzione $\rho(x)$ è di classe C^2 e strettamente positiva, l'operatore H è essenzialmente autoaggiunto su C_0^∞ .

Queste considerazioni portano alla seguente conclusione.

Supponiamo che $-\frac{d^2}{dx^2} + V$ sia un operatore positivo e zero sia un suo autovalore.

Sia ϕ un'autofunzione all'autovalore zero. Definiamo $\rho(x) \equiv |\phi(x)|^2$.

Allora $-\frac{d^2}{dx^2} + V$ corrisponde alla forma quadratica

$$q(f) = \int \left| \frac{df(x)}{dx} \right|^2 \rho(x) dx$$

Quest'analisi può essere facilmente estesa al caso $d > 1$. Sia dato su R^d un operatore della forma

$$H = -\Delta + f\nabla$$

dove $f(x)$ è un campo gradiente $f(x) = \nabla(\log \rho(x))$ con $\rho(x) \geq 0$ e $\rho \in L^1$.

Allora l'operatore H è simmetrico in $L^2_\rho(R^n)$ ed è unitariamente equivalente all'operatore

$$H = -\Delta + V, \quad V(x) \equiv \frac{1}{2} \frac{\Delta \rho}{\rho} - \frac{1}{4} \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho^2}$$

Se ρ è abbastanza regolare e strettamente positivo, l'operatore è essenzialmente autoaggiunto su C_0^∞ .

Notiamo che se $V(x) = \frac{x^2}{4} - \frac{1}{2}$, $x \in R^n$, la corrispondenza indicata qui sopra dà

$$\phi(x) = (2\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{4}}, \quad \rho(x) = (2\sqrt{\pi})^{-1} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

Quindi l'operatore $-\Delta + \frac{x^2}{4} - \frac{1}{2}$ su $L^2(R, d^n x)$ è unitariamente equivalente a $-\Delta + x\nabla$ su $L^2(R, (2\sqrt{\pi})^{-1}e^{-\frac{x^2}{2}}d^n x)$.

Un problema interessante è il seguente.

Supponiamo che $\{V_n\}$ sia una successione di potenziali con queste proprietà e sia ϕ_n la corrispondente autofunzione all'autovalore zero. Notiamo che ϕ_n determina V_n .

È possibile studiare la convergenza della successione $\{-\Delta + V_n\}$ in qualche senso (convergenza in risolvente, in semigruppato, ...) studiando la convergenza in L^1 della successione $\rho_n \equiv |\phi_n|^2$?

Lo studio delle forme quadratiche ci porterà anche a una migliore comprensione della relazione tra operatori ellittici e processi di Markov.

Importanti in questo contesto sono le forme di Dirichlet che discuteremo in dettaglio in seguito (Capitolo 19).

Dopo aver dato queste motivazioni euristiche, formuliamo la teoria delle forme quadratiche.

Definizione 15.1

Una forma quadratica q con dominio $Q(q)$ (un sottoinsieme di uno spazio di Hilbert \mathcal{H}) è un'applicazione sesquilineare $Q(q) \times Q(q) \rightarrow R$.

Faremo sempre la convenzione che sesquilineare significa lineare nel secondo argomento e antilineare nel primo.

◇

Definizione 15.2

Una forma quadratica è detta essere

Simmetrica

se $q(\phi, \psi) = q(\psi, \phi)$.

Positiva

se $q(\phi, \phi) \geq 0$ per ogni ϕ nel suo dominio.

Limitata dal basso

se esiste $M > 0$ per cui $q(\phi, \phi) \geq -M|\phi|^2$ per ogni $\phi \in Q(q)$.

◇

Esempi

a) Se $\mathcal{H} \equiv R^n$, scegliendo una base completa la forma q è rappresentata da una matrice A e, se A è positiva, allora q definisce un prodotto scalare.

b) Se $\mathcal{H} = L^2(R^n)$ l'espressione $q(f, g) \equiv \bar{f}(0)g(0)$ definisce una forma quadratica con dominio le funzioni a quadrato sommabile che sono continue all'origine.

Questa forma non è chiudibile

c) Sia $H = L^2(R, dx)$ e definiamo $Q(q) \equiv \{f \in L^2, xf(x) \in L^2\}$ e per $f, g \in Q(q)$

$$q(f, g) \equiv \int \bar{f}(x)g(x)x^2 dx$$

Allora q è simmetrica, densamente definita e, se $g \in L^2(R)$ è tale che $x^2g \in L^2(R)$ si ha

$$q(f, g) = (f, Ag), \quad (Ag)(x) = x^2g(x)$$

In questo caso A è un operatore essenzialmente autoaggiunto sulle funzioni limitate a supporto compatto; la forma quadratica determina completamente l'operatore di moltiplicazione per x^2 .

Inoltre in questo caso si ha

$$Q(q) = D(\sqrt{A}), \quad (\sqrt{A}g)(x) = |x|g(x)$$

♣

Definizione 15.3

Una forma quadratica limitata dal basso da $-M\|\phi\|^2$ è detta *chiusa* se $Q(q)$ è chiuso (in \mathcal{H}) nella norma

$$\|\phi\|_1^2 \equiv q(\phi, \phi) + (M + \delta)\|\phi\|^2, \quad \forall \delta > 0 \quad 15.9$$

o equivalentemente se $Q(q)$ è uno spazio di Hilbert per il prodotto scalare

$$\langle \phi, \phi \rangle \equiv q(\phi, \phi) + (M + \delta)\|\phi\|^2 \quad 15.10$$

Inoltre, se $D \subset Q(q)$ è denso in $Q(q)$ per la topologia indotta da (15.10) allora D è detto essere un *nocciolo (core)* per q .

◇

Definizione 15.4

Una forma quadratica limitata dal basso con dominio $Q(q)$ è detta *chiudibile* se essa è la restrizione di una forma chiusa \bar{q} e $Q(q)$ è denso in $Q(\bar{q})$ nella topologia indotta da \bar{q} .

In questo caso la forma quadratica \bar{q} è detta *chiusura* di q .

◇

Vale il seguente Lemma, la cui dimostrazione è lasciata al lettore.

Lemma 15.1

La forma quadratica q definita su $Q(q)$ è chiusa se e solo se vale la seguente affermazione:

se

$$\phi_n \in Q(q), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \|\phi_n - \phi\|_{\mathcal{H}} = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} q(\phi_n - \phi, \phi_n - \phi) = 0$$

allora

$$\phi \in Q(q), \quad q(\phi, \phi) = \lim_{n \rightarrow \infty} q(\phi_n, \phi_n)$$

◇

Non tutte le forma quadratiche limitate dal basso sono chiudibili. Ad esempio la forma

$$q_0(f, g) \equiv \bar{f}(0)g(0), \quad Q(q) \equiv C_0(R)$$

non è chiudibile in $L^2(R)$.

Notare tuttavia che è chiudibile la forma quadratica $q \equiv q_1 + q_0$ dove

$$q_1(f, g) \equiv \int \frac{d\bar{f}}{dx} \frac{dg}{dx} dx + \int \bar{f}(x)g(x)dx$$

Infatti la topologia indotta da q è equivalente alla topologia indotta da q_1 e dunque è la topologia della convergenza assoluta per funzioni continue.

In particolare $\lim_{n \rightarrow \infty} \phi_n(0) = \phi(0)$ in questa topologia, e quindi $q(\phi_n) \rightarrow q(\phi)$. Ne concludiamo che la forma quadratica q_1 è associata ad un operatore autoaggiunto.

Nelle notazioni utilizzate finora, useremo per questo operatore la scrittura *formale*

$$-\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x) + 1$$

Teorema 15.2 (estensione di Friedrichs)

Sia q una forma quadratica su $Q(q) \subset \mathcal{H}$ chiudibile limitata dal basso.

Esiste *unico* un operatore A autoaggiunto con $D(A) \subset Q(q)$ tale che

$$q(\phi, \psi) = (\phi, A\psi) \quad \psi \in D(A), \quad \phi \in Q(q) \quad 15.11$$

Inoltre l'operatore A soddisfa $(\phi, A\phi) \geq -M$ se $q(\phi, \phi) \geq -M$.

Se $q(\phi, \phi) > C > 0$ si ha $A > \sqrt{C}I$ e $D(A^{1/2}) = Q(\bar{q})$.

Questo operatore viene detto *estensione di Friedrichs* della forma q .

◇

Dimostrazione

Possiamo limitarci al caso di forme quadratiche strettamente positive. Infatti se q è limitata dal basso da $-M$ possiamo considerare la forma quadratica strettamente positiva q_M definita da $q_M(\phi) = q(\phi) + (M+1)\|\phi\|^2$.

Il teorema garantisce l'esistenza di un operatore A_M associato alla forma q_M ed è facile vedere che l'operatore $A_M - (M+1)I$ è associato alla forma quadratica q .

Diamo due dimostrazioni del teorema 15.2 nel caso di forme quadratiche strettamente positive. Entrambe hanno un interesse indipendente e corrispondono a due procedimenti diversi di costruzione.

Prima dimostrazione

Poniamo

$$(\phi, \psi)_1 \equiv q(\phi, \psi) + (\phi, \psi) \quad \phi, \psi \in Q(q) \quad 15.12$$

Per ipotesi q è chiusa e quindi $Q(q)$ è uno spazio di Hilbert completo per il prodotto scalare (15.12).

La topologia dello spazio di Hilbert $Q(q)$ è più fine di quella di \mathcal{H} . Per il teorema di Riesz, esiste allora un unico elemento $\xi(\phi) \in \mathcal{H}$ tale che

$$(\xi(\phi), \psi) = (\phi, \psi)_1$$

Indichiamo con B l'applicazione $Q(q) \rightarrow \mathcal{H}$ definita da

$$B\phi = \xi(\phi) \quad 15.13$$

L'operatore B è simmetrico poiché la forma quadratica q è simmetrica.

È anche limitato, poiché la topologia definita da q è più forte della topologia di \mathcal{H} .

Notiamo ora che il codominio di B è denso in \mathcal{H} .

Dal teorema di Hellinger e Toeplitz ne concludiamo che \overline{B} (la chiusura di B) è autoaggiunto e limitato come operatore sullo spazio di Hilbert $Q(q)$.

Per tutti i vettori $\phi \in D(B)$ si ha

$$((B - I)\phi, \psi) = (\phi, \psi)_1 - (\phi, \psi) = q(\phi, \psi)$$

La chiusura dell'operatore $A \equiv B - I$ è un operatore autoaggiunto e si ha

$$(A\phi, \psi) = q(\phi, \psi) \quad \forall \phi \in D(A) \cap Q(q) \quad \forall \psi \in Q(q)$$

Questo conclude la prima delle dimostrazioni del teorema 15.2.

Seconda dimostrazione

Questa costruzione è basata sull'introduzione di una scala di spazi di Hilbert. Come nella dimostrazione precedente si nota che $Q(q)$ è uno spazio di Hilbert completo, che adesso indichiamo con \mathcal{H}_1 con la scrittura di prodotto scalare (15.12).

Per costruzione $\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}$.

Questa notazione è dovuta al fatto che se $A = -\Delta + 1$ gli spazi \mathcal{H}_p coincidono con gli spazi di Sobolev H^p .

Indichiamo con $\tilde{\jmath}$ l'inclusione naturale di \mathcal{H}_1 in \mathcal{H} ottenuta per identificazione.

Indichiamo con \mathcal{H}_{-1} lo spazio duale di \mathcal{H}_1 rispetto al prodotto scalare in \mathcal{H} .

Per ogni ϕ l'applicazione $\psi \rightarrow (\phi, \psi)$ definisce un funzionale continuo e quindi $\mathcal{H} \subset \mathcal{H}_{-1}$.

Indichiamo con $\hat{\jmath}$ questa inclusione di \mathcal{H} in \mathcal{H}_{-1} .

Si ha, per ogni $\psi \in \mathcal{H}$ e $\phi \in \mathcal{H}_1$

$$\|\widehat{\mathcal{J}}(\phi)\psi\| \leq \|\phi\| \|\psi\| \leq \|\phi\|_1 \|\psi\|$$

e quindi $\|\widehat{\mathcal{J}}\| \leq 1$ dove $\|\widehat{\mathcal{J}}\|$ è la norma di $\widehat{\mathcal{J}}$ come applicazione di \mathcal{H} in \mathcal{H}_{-1} .
Definiamo l'operatore \widehat{A} da \mathcal{H}_1 ad \mathcal{H}_{-1}

$$(\widehat{A}\xi)(\phi) = q(\phi, \xi) + (\phi, \xi), \quad \phi, \xi \in \mathcal{H}_1$$

L'operatore \widehat{A} provvede un'isometria tra \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_{-1} . Infatti

$$(\widehat{A}\phi)(\phi) = \|\phi\|_1^2, \quad \sup_{\|\phi\|_1=1} |(\widehat{A}\xi)(\phi)| = \sup_{\|\phi\|_1=1} (\phi, \xi)_1 = \|\xi\|_1$$

e quindi la norma di $\widehat{A}\xi$ come elemento di \mathcal{H}_{-1} coincide con la norma di ξ come elemento di \mathcal{H}_1 .

Definiamo un operatore \widetilde{A}

$$D(\widetilde{A}) = \left\{ \phi \in \mathcal{H}, \widehat{A}\phi \in \text{Ran } \widetilde{\mathcal{J}} \right\} \quad \widetilde{A}\phi = \widetilde{\mathcal{J}}^{-1}(\widehat{A}\phi)$$

L'operatore \widetilde{A} è un'applicazione dal codominio di $\widetilde{\mathcal{J}}$ a \mathcal{H} .

Ma il codominio di $\widetilde{\mathcal{J}}$ è denso in \mathcal{H} .

Infatti, supponiamo che esista $\xi \in \mathcal{H}_{-1}$, $\xi \neq 0$ tale che $\xi(\widetilde{\mathcal{J}}(\phi)) = 0$, $\forall \phi \in \mathcal{H}$.

Per il teorema di Riesz esiste allora $\widehat{\xi} \in \mathcal{H}_1$ tale che

$$0 = \xi(\widetilde{\mathcal{J}}(\phi)) = (\widehat{\xi}, \phi) \quad \forall \phi \in \mathcal{H}$$

Questo è impossibile poiché \mathcal{H} è denso in $\mathcal{H}_1 = (\mathcal{H}_{-1})^*$.

Quindi l'operatore \widetilde{A} è densamente definito. Inoltre è simmetrico, infatti

$$(\phi, \widetilde{A}\psi) = q(\phi, \psi) + (\phi, \psi) = (\widetilde{A}\phi, \psi) \quad \forall \phi, \psi \in D(\widetilde{A}).$$

Consideriamo ora l'operatore

$$C \equiv (\widetilde{A})^{-1}\widetilde{\mathcal{J}} \quad \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_1$$

L'operatore C è simmetrico (per la simmetria di \widetilde{A}) e definito ovunque in \mathcal{H} .

Pertanto esso è limitato e la sua chiusura definisce un operatore autoaggiunto, per il teorema di Hellinger-Toeplitz.

Per il teorema spettrale anche l'operatore C^{-1} è autoaggiunto. Ma $C^{-1} \equiv \widetilde{A}$.

Dunque \widetilde{A} è autoaggiunto e il suo dominio è il dominio di C^{-1} .

Poniamo

$$A = \widetilde{A} - I$$

Anche A è autoaggiunto con lo stesso dominio di \widetilde{A} .

Se $\phi, \psi \in D(A)$ segue dalla definizione di \tilde{A}

$$(\phi, A\psi) = q(\phi, \psi)$$

Inoltre $D(A)$ è denso in \mathcal{H}_1 e quindi in \mathcal{H} .

Questo termina la seconda dimostrazione del teorema 15.2.

♡

Esempio

Sia

$$q(f, g) \equiv \int \frac{d\bar{f}}{dx} \frac{dg}{dx} dx + \int \bar{f}(x)g(x)dx = \frac{1}{2\pi} \int \bar{f}(k)g(k)(k^2 + 1)dk$$

Si ha

$$\mathcal{H}_1 \equiv \left\{ f : \int |f(k)|^2(k^2 + 1)dk < \infty \right\}, \quad \mathcal{H}_{-1} \equiv \left\{ f : \int |f(k)|^2(k^2 + 1)^{-1}dk < \infty \right\}$$

$$D(A) \equiv \left\{ f : \int |f(k)|^2(k^2)^2 dk < \infty \right\}$$

e l'operatore $\hat{A} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_{-1}$ è in trasformata di Fourier l'operatore di moltiplicazione per $(k^2 + 1)$.

L'operatore \tilde{A} è la restrizione di \hat{A} agli elementi di $D(\hat{A})$ la cui immagine per \hat{A} sta in \mathcal{H} .

♣

Un semplice corollario del teorema 15.2 è la seguente proposizione

Proposizione 15.3

Sia A un operatore chiuso densamente definito in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} . Poniamo

$$D(A^*A) \equiv \{\phi \in D(A) : A\phi \in D(A^*)\}$$

e per $\phi \in D(A^*A)$ poniamo

$$(A^*A)\phi = A^*(A\phi) \tag{15.14}$$

Allora A^*A è autoaggiunto su $D(A^*A)$.

◇

Dimostrazione

Consideriamo su $D(A) \times D(A)$ la forma quadratica

$$q_A(\phi, \psi) \equiv (A\phi, A\psi)$$

Si ha $q_A \geq 0$ e $q(A)$ è chiusa poiché A è chiuso.

Denotiamo con B l'estensione di Friedrichs di q_A .

Dimostriamo che B coincide con A^*A definito in (15.14). Sia

$$\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H} \subset \mathcal{H}_{-1}$$

la scala di spazi di Hilbert associata alla forma quadratica q_A . Definiamo

$$A' : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_{-1}, \quad (A'\phi)(\psi) = (\phi, A\psi), \quad \psi \in D(A)$$

L'operatore A' estende A . D'altra parte A' è la restrizione di A^* a quegli elementi del suo dominio per i quali l'immagine attraverso A^* sta in \mathcal{H} .

Si ha dunque

$$D(A^*) \equiv \{\phi : A'\phi \in \mathcal{H}\}, \quad A^* = A'_{D(A^*)}$$

Sia

$$\widehat{B} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_{-1}, \quad (\widehat{B}\phi)(\psi) = q(\phi, \psi) = (A\phi, A\psi) \quad \phi, \psi \in \mathcal{H}_1$$

Allora

$$D(B) = \{\phi \in \mathcal{H}_1, \widehat{B}\phi \in \mathcal{H}\}$$

e dunque \widehat{B} estende B .

Siano ora $\phi, \psi \in \mathcal{H}_1$. Allora

$$(A'(A\phi), \psi) = (A\phi, A\psi) = (\widehat{B}\phi)(\psi) \Rightarrow \widehat{B} = A' A$$

D'altra parte

$$\begin{aligned} D(B) &= \{\phi \in \mathcal{H}_1, : \widehat{B}\phi \in \mathcal{H}\} = \{\phi \in \mathcal{H}_1, : A'(A\phi) \in \mathcal{H}\} \\ &= \{\phi \in \mathcal{H}_1, : A\phi \in D(A^*)\} = D(A^*A) \end{aligned}$$

e inoltre

$$B = \widehat{B}|_{D(B)} = \widehat{B}|_{D(A^*A)} = A^*A|_{D(A^*A)}$$

Questo termina la dimostrazione della proposizione 15.3. ♡

Nello stesso modo si dimostra

Proposizione 15.4

Se A è simmetrico e chiuso e A^2 è densamente definito, allora A^*A è l'estensione di Friedrichs della forma q_A associata ad A mediante $q_A(\phi, \psi) = (\phi, A\psi)$, $\psi \in D(A)$. ◇

Esempi

1) Sia

$$A = i \frac{d}{dx}, \quad D(A) = \{\phi : \phi \in AC[0, 1] \quad \phi(0) = \phi(1) = 0\}$$

e quindi

$$D(A^*) = \phi : \phi \in AC[0, 1], \quad A^* = i \frac{d}{dx}$$

Allora

a) A^*A coincide con $-\frac{d^2}{dx^2}$ con condizioni al bordo di Dirichlet ($\phi(0) = \phi(1) = 0$)

b) $A A^*$ coincide con $-\frac{d^2}{dx^2}$ con condizioni al bordo di Neumann ($\phi'(0) = \phi'(1) = 0$)

2) Siano $a_k(x) \in L^2(\mathbb{R}^d)_{loc}$, $k = 1, \dots, d$ funzioni a valore reale.

Sia τ_k la chiusura di $(i\nabla + a_k(x))$ su $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Allora $H \equiv \sum_{k=1}^d \tau_k^* \tau_k$ è autoaggiunto su $\cap_k \{\psi \in D(\tau_k), \tau_k \psi \in D(\tau_k^*)\}$ e inoltre il dominio della forma q_H associata a H è $Q(q) = \cap_k D(\tau_k)$.

Formalmente si ha

$$H = \sum_k \left(i \frac{d}{dx_k} + a_k(x) \right)^2.$$



La relazione tra forme quadratiche chiuse e semidefinite e operatori autoaggiunti permette di definire la somma di due operatori autoaggiunti A e B mediante la somma delle loro forme quadratiche (anche in alcuni casi in cui $D(A) \cap D(B) = 0$).

Conviene introdurre per le forme quadratiche un criterio di “piccolezza” simile a quello di Kato per gli operatori.

Definizione 15.5

La forma quadratica (simmetrica, chiusa) q_1 si dice essere *piccola secondo Kato* rispetto alla forma quadratica (simmetrica, chiusa) positiva q_2 se $Q(q_2) \subset Q(q_1)$ ed esistono numeri positivi $a < 1$, b tali che valga

$$|q_1(\phi, \phi)| \leq a q_2(\phi, \phi) + b \|\phi\|^2 \quad \forall \phi \in Q(q_2) \quad 15.15$$

In notazioni questo si esprime $q_1 \prec q_2$.

Se la disuguaglianza (15.15) vale comunque piccola sia la costante positiva a pur di prendere b abbastanza grande la forma q_1 è detta essere *infinitesima* rispetto alla forma q_2 ($q_1 \prec\prec q_2$).

Nota 15.1

Se $q_1 \prec q_2$ non è necessariamente vero che i corrispondenti operatori soddisfino $A_1 \prec A_2$. Vale invece l'implicazione inversa se A_2 è strettamente positivo.



Con queste notazioni vale il seguente teorema

Teorema 15.5 (Kato)

Sia A positivo autoaggiunto e sia q una forma quadratica simmetrica piccola nel senso di Kato rispetto alla forma quadratica associata all'operatore A .

$$|q(\phi, \phi)| \leq a q_A(\phi, \phi) + b \|\phi\|^2 \quad \phi \in Q(A) \quad 0 < a < 1$$

Allora la forma $q' = q_A + q$ definisce un unico operatore autoaggiunto B con $D(A) \subset D(B)$ tale che

$$(\phi, B\phi) = (\phi, A\phi) + q(\phi, \phi) \quad \forall \phi \in D(A) \quad 15.16$$

Inoltre ogni dominio di essenziale autoaggiuntezza di A è un nocciolo per la forma quadratica q_B associata a B (nel senso che q_B è la chiusura della sua restrizione a $D(A)$).

◇

Dimostrazione

Definiamo su $Q(A)$

$$\tilde{q}(\phi, \psi) \equiv q_A(\phi, \psi) + q_1(\phi, \psi) \quad 15.17$$

Dall'ipotesi fatta segue che $\tilde{q}(\phi, \phi) \geq -b\|\phi\|^2$. Dunque q è limitata dal basso. Posto $\hat{q}(\phi, \phi) = \tilde{q}(\phi, \phi) + b\|\phi\|^2$ si ha $\hat{q} \geq 0$. Inoltre

$$\hat{q}(\phi, \phi) \leq (1-a)q_A(\phi, \phi)$$

Per c_1 abbastanza grande la topologia definita da \hat{q} è quindi più debole di quella definita da $q_A(\phi, \phi) + c_1\|\phi\|^2$ e dunque \hat{q} è chiusa in $Q(A)$.

Essendo anche positiva, esiste un unico operatore autoaggiunto \hat{C} tale che, per $\phi, \psi \in D(\hat{C})$ si abbia

$$\hat{q}(\phi, \psi) = (\phi, \hat{C}\psi)$$

Inoltre $\hat{Q} \equiv D(\hat{C}^{1/2})$.

Dunque q è associata ad un unico operatore $\hat{C} - c_1 I \equiv C$ e si ha $D(A^{1/2}) \geq D((C')^{1/2})$ e inoltre se $\phi \in D(A)$ si ha

$$(\phi, C\phi) = (\phi, A\phi) + q(\phi, \phi)$$

♡

Nota 15.2

Se vale (15.16) ed esiste un operatore C tale che $q(\phi, \phi) = (\phi, C\phi)$, $\forall \phi \in D(C) \cap Q(q)$ diremo che l'operatore B è la somma nel senso delle forme quadratiche degli operatori A e C e utilizzeremo la notazione $B = A \hat{+} C$.

Notiamo che non è necessariamente vero che B sia la *somma operatoriale* degli operatori A e C : si potrebbe avere $D(A) \cap D(C) = \{0\}$ o più in generale la restrizione di B a $D(A) \cap D(C)$ potrebbe non essere un operatore essenzialmente autoaggiunto.



Esempi

Esempio 1

Consideriamo la forma $q(f, g) = \bar{f}(0)g(0)$ definita sulle funzioni in L^2 che sono continue all'origine. Questa forma è positiva ma abbiamo già notato che non è chiusa.

Sia $A \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + I$, la cui forma quadratica q_A è data da

$$q_A(f, g) = \int \frac{d\bar{f}}{dx} \frac{dg}{dx} dx + \int \bar{f}(x)g(x)dx$$

Le funzioni in $Q(q_A)$ sono assolutamente continue e la topologia definita da q_A è quella della convergenza uniforme.

La forma $q_A + q$ è chiusa nella topologia di q_A e quindi nella topologia indotta da $q_A + q$.

Esiste dunque un operatore autoaggiunto H tale che per ogni $\phi \in D(H)$ si abbia

$$(\phi, H\phi) = q_A(\phi, \phi) + q(\phi, \phi) = \int \left| \frac{d\phi}{dx} \right|^2 dx + \int |\phi|^2 dx + |\phi(0)|^2$$

In questo procedimento abbiamo utilizzato il fatto che q è positiva.

Vogliamo adesso dimostrare che q è infinitesima rispetto a q_A .

Questo permette di concludere che per ogni $\lambda \in \mathbb{R}$ la forma quadratica $q_A + \lambda q$ definisce un operatore autoaggiunto H limitato dal basso.

Scriveremo *formalmente* $H = -\frac{d^2}{dx^2} + 1 + \lambda \delta(x)$.

La dimostrazione risulta più semplice operando in trasformata di Fourier.

Dobbiamo dimostrare che si possono trovare costanti positive $a(\lambda), b(\lambda)$ con $a(\lambda)$ arbitrariamente piccola, tali che se $\hat{\phi}(k) \in L^1$ e $\int (1+k^2)|\hat{\phi}(k)|^2 dk < \infty$ (così che $\phi \in Q(A)$) si abbia

$$|\lambda|^2 \left| \int \hat{\phi} dk \right|^2 \leq a(\lambda) \int |\hat{\phi}(k)|^2 (k^2 + 1) dk + b(\lambda) \int |\hat{\phi}(k)|^2 dk \quad 15.19$$

Dividiamo l'intervallo di integrazione in due parti: $|k| \leq k_0$ e $|k| > k_0$.

Stimiamo i due integrali separatamente, e successivamente scegliamo k_0 in modo opportuno.

Per quanto riguarda l'integrazione su $|k| \geq k_0$ risulta

$$\left| \int_{|k|>k_0} \hat{\phi}(k) dk \right|^2 \leq \left| \int_{|k|>k_0} \frac{1}{\sqrt{1+k^2}} \sqrt{1+k^2} \hat{\phi}(k) dk \right|^2$$

$$\leq \int_{|k|>k_0} \frac{1}{1+k^2} dk \int_{|k|>k_0} (1+k^2) |\widehat{\phi}(k)|^2 dk \leq C(k_0) \int (1+k^2) |\widehat{\phi}(k)|^2 dk$$

con $C(k_0) \rightarrow 0$ se $k_0 \rightarrow \infty$.

D'altra parte l'integrale su $|k| \leq k_0$ soddisfa le seguenti stime

$$\left| \int_{|k| \leq k_0} \widehat{\phi}(k) dk \right|^2 \leq \int_{|k| \leq k_0} dk \int_{|k| \leq k_0} |\widehat{\phi}(k)|^2 dk \leq 2k_0 \int_{|k| \leq k_0} |\widehat{\phi}(k)|^2 dk$$

Ne segue che, pur di prendere k_0 sufficientemente grande, per ogni valore dell'indice λ si può soddisfare (15.19) con $a(\lambda)$ arbitrariamente piccolo.

Pertanto, per ogni λ reale la forma quadratica $q_A + \lambda q$ definisce un operatore autoaggiunto.



Nota 15.3

Nella dimostrazione precedente si è utilizzato in modo essenziale il fatto che le funzioni considerate sono funzioni di una sola variabile reale k . Si è infatti utilizzato il fatto che $(1+k^2)^{-\frac{1}{2}}$ è a quadrato sommabile.

Un analogo risultato *non vale* in R^d per $d \geq 2$; questo riflette il fatto che in R^d , $d \geq 2$ le funzioni il cui gradiente è a quadrato sommabile *non sono necessariamente continue* e quindi non è possibile definire la loro valutazione in un punto.

Per $d = 2$ e $d = 3$ è ancora possibile definire un'operatore autoaggiunto che rappresenta una perturbazione del laplaciano con supporto in un punto, ma la costruzione è più elaborata.

Abbiamo accennato a questa costruzione nel Capitolo 9.



Esempio 2

Sia $V \geq 0$, $V \in L^2_{loc,\Gamma}(R)$ (cioè $|V(x)|$ è a quadrato integrabile al di fuori di un insieme chiuso Γ di misura zero).

Sia Q_Γ l'insieme delle funzioni in $L^2(R)$ che hanno supporto disgiunto da Γ e definiamo in Q_Γ la forma quadratica

$$q_\Gamma(\phi, \phi) = \int |\phi(x)|^2 V(x) dx, \quad \phi \in Q_\Gamma \tag{15.20}$$

Sia

$$H_0 \equiv -\frac{d^2}{dx^2} + 1, \quad q_0 \equiv q_{H_0} = \int |\nabla \phi|^2 + |\phi|^2 \quad Q(q_0) \equiv \left\{ \phi : \int (|\nabla \phi|^2 dx + |\phi|^2) < \infty \right\} \tag{15.21}$$

Allora $D(H_0) \cap Q_\Gamma$ è denso e $q \equiv q_0 + q_\Gamma$ è una forma positiva e chiusa (verificare quest'ultima affermazione).

Dunque esiste un operatore autoaggiunto H di cui q è la forma quadratica. Formalmente

$$H = H_0 + V$$

Questa relazione vale in senso stretto su $D(H) = D(H_0) \cap D(V)$.



Esempio 3

Vogliamo utilizzare il teorema 15.2 per dimostrare che in R^3 se $\alpha < 2$ l'espressione $-\Delta + \lambda|x|^{-\alpha}$ definisce un operatore autoaggiunto per ogni λ reale. Ricordiamo che dal teorema di Kato-Rellich, basato sul confronto secondo Kato di operatori, si ottiene lo stesso risultato solamente per $\alpha < 3/2$.

Notiamo anche che dal criterio di Weyl segue che l'affermazione *non è vera* se $\alpha = 2$ e $\lambda < -\frac{3}{2}$.

Utilizzeremo la disuguaglianza di Hardy (vedi Capitolo 12).

Lemma 15.6 (disuguaglianza di Hardy)

Per ogni $\phi \in L^2(R^3)$ si ha

$$\int_{R^3} \frac{1}{4|x|^2} |\phi(x)|^2 d^3x \leq \int_{R^3} |\nabla\phi|^2 d^3x \quad 15.22$$

Equivalentemente

$$(\widehat{\phi}, |p|^2 \widehat{\phi}) \geq \left(\phi, \frac{1}{4|x|^2} \phi \right) \quad 15.23$$



Lemma 15.7

Se $0 < \alpha < 2$ l'operatore $-\Delta + \lambda|x|^{-\alpha}$ è in R^3 infinitesimo rispetto all'operatore $-\Delta + 1$ nel senso delle forme quadratiche.



Dimostrazione

Sia $\phi \in C_0^\infty$ e dato $a > 0$ scegliamo ϵ in modo tale che risulti $|x|^{-\alpha} < \frac{a}{4} |x|^{-2}$ per $|x| < \epsilon$.

Dividiamo il dominio di integrazione in due parti, $|x| < \epsilon$ e $|x| \geq \epsilon$. Utilizzando (15.22)

$$\begin{aligned} \int_{R^3} |x|^{-\alpha} |\phi(x)|^2 dx &\leq \frac{a}{4} \int_{|x| < \epsilon} |x|^{-2} |\phi(x)|^2 dx + \frac{1}{\epsilon^\alpha} \int_{|x| \geq \epsilon} |\phi(x)|^2 dx \\ &\leq a \int |\nabla\phi|^2 dx + \frac{1}{\epsilon^\alpha} \int |\phi(x)|^2 dx \end{aligned} \quad 15.24$$

La disuguaglianza si estende a tutte le funzioni in $L^2(R^3)$ considerando una successione di approssimanti (nella topologia di $L^2(R^3)$) costituita da funzione in C_0^∞ ; Dunque

$$q_{|x|^{-\alpha}}(\phi, \phi) \leq aQ_0(\phi, \phi) + b\|\phi\|^2$$

con a arbitrariamente piccolo pur di scegliere b sufficientemente grande. Ne segue che

$$H = -\Delta + 1 + \lambda|x|^{-\alpha}, \quad 0 < \alpha < 2$$

inteso come somma di forme quadratiche definisce un operatore autoaggiunto il cui dominio di forma coincide con il dominio di forma del laplaciano.

♡

Esempio 4 (generalizza l'esempio 1)

Sia $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$, $H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + 1$. Sia μ una misura reale sull'asse reale tale che la sua trasformata di Fourier (nel senso delle distribuzioni) soddisfi $\hat{\mu} \in L^\infty$ (notare che $\hat{\mu}(k) = 1 \forall k$ equivale a $\mu = \delta(x)$).

Definiamo un operatore $W : Q_0 \rightarrow Q_0$ mediante

$$q_W(f, g) \equiv (f, Wg) = \int \int \hat{f}(k) \hat{\mu}(k-p) \hat{g}(p) dp dk \quad 15.25$$

Dall'ipotesi $\hat{\mu} \in L^\infty$ è facile dimostrare che se $\hat{f} \in L^1 \cap L^2$ allora per ogni $\epsilon > 0$ si può trovare $b(\epsilon) > 0$ tale che

$$\|f\|_1 \leq \|k\hat{f}\|^2 + b(\epsilon)\|\hat{f}\|^2$$

Dunque q_W è una forma quadratica infinitesima rispetto a q_0 e ne segue che $q_0 + q_W$ definisce un operatore autoaggiunto.

Se $V \in L^1$ allora $\hat{V} \in L^\infty$. Ma l'esempio porta a definire perturbazioni di $\frac{d^2}{dx^2}$ più generali, poiché $\{\mu \in L^1\} \subset \{\hat{\mu} \in L^\infty\}$.

♣

Esempio 5

Sia $H_0 = -\Delta + 1$ su $L^2(\mathbb{R}^d, dx)$ $V = U + W$, $U \geq 0, W \in L^p + L^\infty$ con $p \geq d/2$ se $d \geq 3$, $p > 1$ se $d = 2$ e $p \geq 1$ se $d = 1$.

Allora la somma $H = -\Delta + 1 + V$, intesa nel senso delle forme quadratiche, definisce un operatore autoaggiunto limitato inferiormente.

◇

Dimostrazione

Dimostriamo che W è infinitesimo nel senso delle forme quadratiche rispetto a $-\Delta + 1$ e quindi anche a $-\Delta + 1 + V$ essendo V positivo.

Nella decomposizione $W = W_p + W_\infty \in L^p + L^\infty$, per ogni $\epsilon > 0$ si può prendere $\|W_p\|_p < \epsilon$.

Infatti ogni funzione in L^p è limitata nel complemento di un insieme di misura arbitrariamente piccola.

D'altra parte, utilizzando la disuguaglianza di Hölder,

$$(f, W_\infty f) \leq \|W_\infty\|_p \|f\|_q^2, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1 \quad 15.26$$

e nelle ipotesi fatte $\frac{1}{2q} \geq \frac{1}{2} - \frac{1}{d}$.
Allora per la disuguaglianza di Sobolev

$$\|f\|_{2q}^2 \leq a(f, (-\Delta + b)f), \quad a < \epsilon, \quad b > b(\epsilon)$$

Dunque

$$(f, Wf) \leq a\|W_p\|_p(f, (-\Delta f)) + ab\|W_\infty\|_p\|f\|_{2q}^2 \quad 15.27$$

♡

Esempio 6

Sia $\hat{\mu}(k) = i\pi \text{sign}(k)$.

Per $\epsilon > 0$ la trasformata di Fourier di $i\pi \text{sign}(k)e^{-\epsilon|k|}$ è $\frac{x}{x^2 + \epsilon^2}$.

Definiamo la forma quadratica

$$q(f, g) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \bar{f}(x) \frac{x}{x^2 + \epsilon^2} g(x) dx = V.P. \int \bar{f}(x) \frac{1}{x} g(x) dx \quad 15.27$$

dove abbiamo indicato con *V.P.* il valore principale dell'integrale.

Conviene notare che questa forma quadratica non è associata né all'operatore di moltiplicazione per $\frac{1}{|x|}$ né all'operatore di moltiplicazione per $\frac{1}{x}$.

La successione

$$q_\epsilon(f, g) \equiv \int \bar{f}(x) \frac{x}{x^2 + \epsilon^2} g(x) dx \quad 15.28$$

è costituita da forme quadratiche che sono infinitesime rispetto alla forma di $-\frac{d^2}{dx^2} + 1$ uniformemente in ϵ .

Da questo si deduce che q è infinitesima rispetto alla forma di $-\frac{d^2}{dx^2} + 1$ e quindi risulta ben definito, attraverso la somma delle corrispondenti forme quadratiche, l'operatore autoaggiunto $-\frac{d^2}{dx^2} + P\left(\frac{1}{x}\right)$ (P sta per *parte principale*).

♣

Nota 15.7

Non esiste nel caso delle forme quadratiche l'analogo del Teorema di Wurst. Si può vedere questo con un esempio. Poniamo

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2}, \quad V \equiv \frac{d^2}{dx^2} + \delta(x) \quad 15.29$$

Se $a < 1$ l'operatore V è piccolo in forma rispetto ad H_0 (ricordare che $\delta(x)$ è infinitesimo in forma rispetto a $-\Delta$). Conseguentemente

$$H \equiv H_0 + V = -(1-a)\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x) \quad 15.30$$

è essenzialmente autoaggiunto su C_0^∞ se $a < 1$.

Ma per $a = 1$ non è neppure definito come forma chiusa. ♣

In conclusione di questo Capitolo notiamo che le condizioni date in questo capitolo affinché $-\Delta + V$ inteso nel senso della somma delle corrispondenti forma quadratiche rappresenti un operatore autoaggiunto sono basate essenzialmente su disuguaglianze di Sobolev.

In particolare in R^d

$$c\|f\|_p + \|\nabla f\|_p \geq C(p, d)\|f\|_q, \quad \frac{1}{q} = \frac{1}{p} + \frac{1}{d} \quad 15.31$$

per opportune costanti $C(p, d)$. Se f ha media zero

$$\|f\|_{\frac{2d}{d-2}} \leq \frac{d-1}{d-2} \prod_{k=1}^d \left\| \frac{\partial f}{\partial x_k} \right\|_2^{\frac{1}{d}} \quad 15.32$$

(disuguaglianza di Moser-Nash, vedi Capitolo 12).

La (15.31) contiene un coefficiente $C(p, d)$ che tende all'infinito quando $d \rightarrow \infty$. Inoltre quando $d \rightarrow \infty$ si ha $q \rightarrow p$ nella (15.31) e $\frac{2d}{d-2} \rightarrow 2$ nella (15.32).

Quindi al limite $d \rightarrow \infty$ non si ha guadagno nelle norme L^p utilizzate.

Questo può essere visto come conseguenza del fatto che non esiste su R^∞ una misura regolare quasi invariante per traslazione (equivalente ad ogni sua traslata).

A differenza della misura di Lebesgue la misura di Gauss ammette un'estensione come misura regolare al caso $d = \infty$. È allora interessante trovare delle disuguaglianze nel caso della misura di Gauss.

Sia $d\nu(x)$ la misura di Gauss con media zero e covarianza uno in R^d . Utilizzando la forma esplicita della misura si verifica che vale la disuguaglianza *indipendente dalla dimensione* d

$$\int |\nabla f|^2 d\nu(x) \geq C \int |f(x)| \frac{\log f(x)}{\|f\|_\nu} d\nu \quad 15.33$$

Questa disuguaglianza vale anche per $d = \infty$; vedremo in seguito come si definisce la misura di Gauss (distribuzione normale debole) nel caso $d = \infty$.

La (15.33) è detta *disuguaglianza di Sobolev logaritmica*; la discuteremo in dettaglio nel Capitolo 19.

La disuguaglianza di Sobolev logaritmica mostra che indipendentemente dalla dimensione dello spazio, la norma $\|\nabla u\|_\nu$ domina (con una costante indipendente dalla dimensione) una norma che è *poco più forte* della norma L^2 (solo un fattore logaritmico viene guadagnato).

La presenza del logaritmo nella (15.33) suggerisce che nella stima di $V(x)$ rispetto a $-\Delta$, se si vuole un risultato che valga anche in R^∞ , sia conveniente

confrontare $e^{-V}f$ con $e^{\Delta}f$; in questo confronto si può cercare di far uso della formula di Trotter-Kato.

Vedremo nel Capitolo 19 che questo porta a dimostrare che esiste una costante positiva C tale che

$$e^{-t} \leq \sqrt{\frac{q-1}{p-1}} \Rightarrow \|e^{-tH_0}\|_{q,p} < C \quad 15.34$$

dove H_0 è definito dalla forma quadratica

$$q_{H_0}(f, f) = \int |\nabla f|^2 d\nu(x)$$

e abbiamo indicato con $\|A\|_{q,p}$ la norma di A come operatore da L^q a L^p con $q < p$.

Conviene confrontare la (15.34) valida per ogni $d \leq \infty$ con la stima, per $d < \infty$,

$$f \in L^2(\mathbb{R}^d, dx) \Rightarrow e^{-tH_0}f \in C^\infty. \quad 15.35$$

Quindi per ogni d finito l'operatore e^{-tH_0} regolarizza molto per $t > 0$, ma questa regolarizzazione *non è indipendente dalla dimensione d* e si perde quando $d = +\infty$.

APPENDICE 15A: OPERATORE E GRUPPO MODULARE. DERIVATA DI RADON-NYKODIM NON-COMMUTATIVA.

Diamo in quest'appendice alcuni elementi della teoria di Tomita-Takesaki che è connessa alla teoria dell'estensione di Friedrichs e provvede una dualità tra un'algebra di Von Neumann e la sua commutante nel caso esista un vettore ciclico e separante.

Questa teoria e la corrispondente teoria dell'operatore modulare hanno connessioni molto profonde con la condizione K.M.S. che abbiamo brevemente discusso nel Capitolo 4 e che si è rivelata molto importante nella trattazione della Meccanica Statistica Quantistica e nella Teoria Quantistica dei Campi.

Accenneremo anche brevemente alla teoria dei coni duali, strettamente connessa alla teoria di Tomita-Takesaki ma che ha anche un interesse indipendente, essendo un'estensione al caso non commutativo del teorema di Radon-Nykodym relativo all'equivalenza di misure.

Nel caso non commutativo il ruolo delle misure (positive) viene giocato dagli stati, e quindi il problema corrispondente sarà quello di equivalenza di stati e delle rappresentazioni ad essi associate tramite la costruzione G.N.S..

Se un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} che sia un fattore ($\mathcal{M} \cap \mathcal{M}' \equiv \{cI\}$) ammette uno stato traccia (uno stato normale ϕ per il quale vale $\phi(ab) = \phi(ba)$)

allora esiste un isomorfismo “naturale” tra \mathcal{M} e \mathcal{M}' che può essere utilizzato per impostare una teoria non-commutativa dell'integrazione.

Nei modelli in Fisica questa proprietà viene ad esempio utilizzata nella descrizione di un campo di spin su un reticolo o di un campo di fermioni su un reticolo.

Per un'algebra di von Neumann dotata di (uno stato) traccia si può definire una versione non commutativa della teoria dell'integrazione su spazi di misura finita.

I fondamenti di questa teoria sono stati posti da [S53]. Rilevanti contributi sono in [G72].

Ne diamo qui alcuni cenni.

Nel caso non commutativo definiamo *spazio con peso finito regolare (gage)* una tripla $\{\mathcal{H}, \mathcal{M}, \mu\}$ in cui \mathcal{H} è uno spazio di Hilbert complesso, \mathcal{M} è un'algebra di von Neumann ed μ è una funzione a valori reali non negativi sulle proiezioni di \mathcal{M} tale che

(i) μ è completamente additiva: se \mathcal{S} è una collezione di proiezioni in \mathcal{M} mutuamente ortogonali con estremo superiore P , allora $\mu(P) = \sum_{Q \in \mathcal{S}} \mu(Q)$.

(ii) μ è invariante per trasformazioni unitarie

(iii) μ è finita ($\mu(I) < \infty$)

(iv) μ è regolare (se P è una proiezione non nulla, allora $\mu(P) > 0$).

Sotto queste ipotesi risulta definita univocamente un'estensione lineare di μ a tutto \mathcal{M} continua in norma.

Quest'estensione viene chiamata *traccia di \mathcal{M}* ; utilizziamo il simbolo $\text{Tr}(A)$ per $A \in \mathcal{M}$.

Se $A \in \mathcal{M}$ con decomposizione spettrale $A = \int \lambda dE(\lambda)$ allora $\text{Tr}(A) = \int \lambda d\mu(\lambda)$.

Se $A \geq 0$ allora $\text{Tr}(A) \geq 0$ e se $A \neq 0$ allora $\text{Tr}A > 0$.

La traccia è centrale: $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$.

Se $A \in \mathcal{M}$ è un operatore chiuso poniamo $|A| = (A^*A)^{\frac{1}{2}}$.

Se $A \in \mathcal{M}$ poniamo $\|A\|_p = (\text{Tr}(|A|^p))^{\frac{1}{p}}$ se $1 \leq p < \infty$ e poniamo $\|A\|_\infty$ per indicare la norma di A .

Con questa definizione $\|A\|_p$ è una norma per ciascun p in $[1, \infty]$.

Indichiamo con $L^p(\mathcal{M})$ il completamento di \mathcal{M} in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ nella norma $\|\cdot\|_p$.

Naturalmente $L^\infty(\mathcal{A}) \equiv \mathcal{M}$.

In [S53] (vedere anche [K58]) si dimostra che per $1 \leq p \leq \infty$ si può identificare $L^p(\mathcal{M})$ con uno spazio di operatori limitati su \mathcal{H} . In particolare si può identificare un elemento positivo di $L^p(\mathcal{M})$ con un operatore autoaggiunto.

Notiamo che se \mathcal{M} è un fattore di tipo I, in particolare se $\mathcal{M} = \mathcal{B}(\mathcal{H})$ lo spazio $L^1(\mathcal{M})$ è lo spazio degli operatori di classe traccia e $L^p(\mathcal{M}) \equiv \mathcal{I}_p$ è lo spazio degli operatori di classe Schatten p .

Con questa notazione la teoria degli spazi $L^p(\mathcal{M})$ non-commutativi si sviluppa in completo parallelismo con la teoria degli spazi di integrazione di Lebesgue. Se $A \in L^1(\mathcal{M})$ la funzione $\text{Tr}(A)$ risulta un funzionale lineare continuo a valori complessi su $L^1(\mathcal{M})$.

Valgono per questi spazi non commutativi le disuguaglianze di Hoelder e le formule di interpolazione che abbiamo descritto nel Capitolo 12.

In particolare se $\{\mathcal{M}, \mu\}$ è uno spazio di misura non-commutativo regolare finito, e $a, b \in \mathcal{M}$ si ha

$$\|ab\|_p \leq \|a\|_\infty \|b\|_p \quad \|ba\|_p \leq \|a\|_\infty \|b\|_p$$

Ne segue che la moltiplicazione a destra e a sinistra in \mathcal{M} per un elemento $a \in \mathcal{M}$ si estende ad un operatore limitato su $L^p(\mathcal{M})$.

Indicheremo con R_a e L_a questi operatori.

Per costruzione R_a e L_a commutano per qualunque scelta di a .

La rilevanza in Fisica degli spazi con peso regolare discende anche dal fatto che in questi spazi valgono teoremi simili ai teoremi di Frobenius per matrici relativi all'esistenza e unicità dell'autovalore più basso di un matrice positiva.

Un operatore limitato A su $L^2(\mathcal{M})$ è detto *preservare la positività* se $A\phi$ è un elemento non negativo di $L^2(\mathcal{M})$ se ϕ ha questa proprietà.

Sia $\{\mathcal{H}, \mathcal{M}, \mu\}$ uno spazio con peso finito regolare e π un proiettore in \mathcal{M} .

Chiamiamo *sottospazio di Pierce* associato a π il codominio di $P_\pi = L_\pi R_\pi$ come operatore su $L^2(\mathcal{M})$.

Il ruolo del supporto di una funzione viene preso dal *supporto* di un operatore chiuso definito densamente; questo supporto è la chiusura convessa dell'unione del codominio dell'operatore e del suo aggiunto.

Non daremo qui una trattazione anche solo parziale di questa teoria non-commutativa dell'integrazione che ha un ruolo importante nella trattazione dei campi di spin su un reticolo infinito e dei campi fermionici relativistici. Citiamo solo un teorema importante ([G72])

Teorema

Sia $\{\mathcal{H}, \mathcal{M}, \mu\}$ uno spazio con peso finito regolare e sia A un operatore hermitiano limitato su $L^2(\mathcal{M}, \mu)$ che preserva la positività.

Se $\|A\|$ è un autovalore di A e l'operatore A non lascia invariante alcun sottospazio di Pierce proprio, allora l'autovalore $\|A\|$ ha molteplicità uno.

◇

Abbiamo visto che in una rappresentazione che soddisfa le condizioni K.M.S. con parametro t_0 rispetto ad un gruppo a un parametro $\{\alpha_t\}$ di automorfismi esiste uno stato ρ tale che $\rho(\alpha_{t_0}(b)) = \rho(b a)$ per un insieme denso in \mathcal{M} .

Se la relazione è vera per $t_0 = 0$ si tratta di uno stato traccia invariante per l'azione duale del gruppo di automorfismi.

In questo caso il cono degli stati positivi relativamente a ρ (ottenuti per applicazione a ρ di elementi positivi dell'algebra \mathcal{M}) corrisponde nel caso commutativo al cono delle misure positive.

La teoria di Takesaki-Tomita è un'estensione della teoria dell'integrazione non-commutativa a stati normali che non definiscono delle tracce.

In un certo senso è la versione non-commutativa dell'integrazione in un compatto Ω rispetto a una misura finita che è assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue (ammette derivata di Radon-Nikodym).

La teoria di Tomita-Takesaki estende questa corrispondenza a stati che non sono di tipo traccia ma soddisfano per un valore non nullo del parametro t_0 la condizione K.M.S. relativamente a un gruppo di automorfismi (modulari) associato allo stato.

Con questo si estende all'integrazione non commutativa la definizione di coni positivi e di derivata di Radon-Nikodym; le proprietà dell'operatore modulare caratterizzeranno l'equivalenza tra stati normali di \mathcal{M} (nel senso che le costruzioni G.N.S. associate a stati diversi siano tra loro unitariamente equivalenti).

La teoria di Tomita-Takesaki è basata sul fatto che ad ogni algebra di Von Neumann \mathcal{M} su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} che ammetta un vettore *ciclico e separante* Ω può essere associato un operatore positivo Δ (detto *operatore modulare*) e un'isometria antilineare j tale che

$$j\Omega = \Omega, \quad j\Delta^{\frac{1}{2}}a\Omega = a^*\Omega \quad \mathcal{M}\Omega \subset D(\Delta^{\frac{1}{2}}) \quad a \in \mathcal{M}$$

e inoltre

$$j\mathcal{M}j = \mathcal{M}' \quad \Delta^{it}\mathcal{M}\Delta^{-it} = \mathcal{M} \quad \forall t. \quad 15A.1$$

Per definizione il *gruppo modulare associato allo stato* è il gruppo di automorfismi interni che ha come generatore l'operatore $\log \Delta$ e lo stato Ω soddisfa la condizione K.M.S. rispetto a questo gruppo di automorfismi.

Il caso $\Delta = I$ corrisponde al caso in cui lo stato è una traccia e in questo caso l'esistenza dell'isometria antilineare j si dimostra facilmente, utilizzando la relazione $(a\Omega, b\Omega) = (b^*\Omega, a^*\Omega)$.

Nel seguito accenneremo alla relazione tra operatore modulare ed estensione di Friedrichs di una forma quadratica positiva. Un'analisi più approfondita è contenuta in [KR90].

Notiamo in questo contesto che la costruzione dell'estensione di Friedrichs si può anche interpretare nel modo seguente:

Data una forma quadratica chiusa strettamente positiva q in uno spazio di Hilbert complesso \mathcal{H} resta definito il sottospazio X dei vettori $\phi \in \mathcal{H}$ tali che $q(\phi, \psi)$ assuma valori reali per ogni $\phi, \psi \in X$.

Si tratta di uno spazio vettoriale reale chiuso nella topologia indotta dalla forma quadratica e generato dal cono dei suoi elementi positivi.

Questo va confrontato con il fatto che dato uno stato ciclico Ω di un'algebra di von Neumann \mathcal{M} resta definito il cono positivo \mathcal{M}^+ generato da Ω applicando elementi positivi di \mathcal{M} .

D'altra parte, ogni operatore autoaggiunto positivo A determina un sottospazio reale Y chiuso nella topologia dell'operatore A attraverso la condizione che per ogni coppia $\phi, \psi \in Y$, $(\phi, A\psi)$ assuma valori reali.

Risulta così determinato anche il cono Y^+ .

Nel caso di operatori a spettro discreto, si tratta del sottospazio generato sui reali dagli autostati reali di A .

La costruzione che abbiamo fatto dell'estensione di Friedrichs a partire dalla forma quadratica q si può interpretare come costruzione di Y^+ come sottospazio di $Q(q)$.

La relazione della teoria di Tomita-Takesaki con la costruzione di Friedrichs può essere vista come relazione tra coni positivi Y^+ e \mathcal{M}^+ .

Se lo spazio di Hilbert è di dimensione finita, quindi isomorfo a $C^n \equiv R^n \oplus R^n$ l'operatore A è rappresentato da una matrice hermitiana strettamente positiva, con autovalori $\lambda_1, \dots, \lambda_n$.

È allora possibile trasformare A nella matrice identità nello spazio di Hilbert reale $R^n \oplus R^n$ mediante una trasformazione di coordinate in C^n che consiste in una rotazione seguita da una dilatazione di un fattore $\sqrt{\lambda_k}$ nelle direzioni degli autovalori.

Per operatori compatti il procedimento è simile.

La costruzione dell'estensione di Friedrichs può essere vista come estensione di questo procedimento al caso di forme quadratiche strettamente positive la cui estensione di Friedrichs ha spettro in parte continuo.

Questo mette in luce il ruolo essenziale della seguente struttura.

Sia \mathcal{H} uno spazio di Hilbert complesso, e definiamo

$$\langle \psi, \phi \rangle = \Re \langle \psi, \phi \rangle \quad \phi, \psi \in \mathcal{H}. \quad 15A.2$$

Con questa definizione allo spazio \mathcal{H} viene data la struttura di spazio di Hilbert reale, che indichiamo con \mathcal{H}_r con prodotto scalare

$$(\psi, \phi) = \langle \psi, \phi \rangle + i \langle i\psi, \phi \rangle \quad 15A.3$$

(usiamo la notazione per cui (ψ, ϕ) è lineare in ϕ e anti-lineare in ψ).

Supponiamo che esista un sottospazio *reale* \mathcal{K} chiuso di \mathcal{H} con le seguenti proprietà

$$a) \mathcal{K} \cap i\mathcal{K}^\perp = \emptyset, \quad b) (\mathcal{K} + i\mathcal{K})^\perp = \emptyset \quad 15A.4$$

La costruzione che ora faremo definisce in modo unico un operatore autoaggiunto Δ (detto *operatore modulare* associato al sottospazio \mathcal{K}) e un'anti-isometria lineare j

Nel caso \mathcal{K} sia il sottospazio reale X che avevamo associato ad una forma quadratica strettamente positiva q , l'operatore così ottenuto è l'estensione di Friedrichs di q .

A noi in quest'appendice interessa il caso in cui \mathcal{K}_Ω sia generato dall'applicazione degli elementi autoaggiunti di un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} su un vettore Ω ciclico e separante.

In questo caso dimostreremo che l'operatore modulare così ottenuto ha le proprietà indicate in (15A.1).

Notiamo che in questo caso \mathcal{K}_Ω è generato dal cono convesso \mathcal{K}_Ω^+ ottenuto dall'applicazione a Ω degli elementi *positivi* in \mathcal{M} .

Se Ω_1 è un altro stato ciclico e separante, risulterà definito un altro cono $\mathcal{K}_{\Omega_1}^+$. Se lo stato Ω è ciclico per la commutante \mathcal{M}' di \mathcal{M} resterà anche definito il cono duale \mathcal{K}'_Ω .

Questo porterà alla teoria di dualità di Tomita-Takesaki e ai teoremi di equivalenza di rappresentazioni di algebre C^* .

Conviene notare che nel caso dell'estensione di Friedrichs l'algebra di von Neumann considerata è $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ che ha commutante banale.

Il cono \mathcal{K}'_Ω si riduce ad un punto e non vi è dualità.

La teoria di Tomita-Takesaki è quindi interessante solo se l'algebra di von Neumann \mathcal{M} ammette stati normali ciclici e separanti (ciclici sia per \mathcal{M} che per \mathcal{M}').

Per questo ha rilevanza nello studio degli stati che soddisfano la condizione *K.M.S.*.

Nel seguito sarà utile il seguente risultato

Lemma 15A.1

Sia ρ uno stato su un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} e sia τ un funzionale lineare positivo su \mathcal{M} che soddisfa $\tau \leq \rho$.

Allora esistono $h \in \mathcal{M}_1^+$ e $\lambda, \Re \lambda \geq \frac{1}{2}$ tali che per ogni $a \in \mathcal{M}$

$$\tau(a) = \lambda \rho(ha) + \bar{\lambda} \rho(ah)$$

Se la rappresentazione indotta dallo stato ρ è irriducibile, l'operatore h con questa proprietà è unico.

◇

Dimostrazione

Possiamo ricondurci al caso in cui $\mathcal{M} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$, gli stati sono normali, lo stato ρ è definito da un proiettore π_ϕ , $\|\phi\| = 1$ e l'operatore a è positivo $a = b^*b$.

In questo caso $\rho(a) = \text{Tr}(\pi_\phi a) = (b\phi, b\phi)$, mentre $\tau(b^*b) = \text{Tr}(\sigma b^*b)$ per un'opportuna matrice densità σ e il Lemma 15A.1 segue da semplici disuguaglianze.

Una dimostrazione più algebrica è la seguente: denotiamo con Ξ_ρ l'insieme convesso compatto in $(\mathcal{M}^*)_{s.a.}$ definito da

$$\tau \in \Xi_\rho \Leftrightarrow \exists \lambda, \Re \epsilon \lambda \geq \frac{1}{2}, \exists h \in \mathcal{M}_+^1 : \tau(a) = \lambda \rho(ha) + \bar{\lambda} \rho(ah) \quad \forall a \in \mathcal{M}.$$

Dobbiamo dimostrare che se $0 \leq \tau \leq \rho$ allora $\tau \in \Xi_\rho$. Supponiamo che questa inclusione non sia vera. Indichiamo con $\mathcal{M}_{f,+}$ la collezione degli operatori autoaggiunti di \mathcal{M} . Per il teorema di separazione di Hahn-Banach, esistono $a \in \mathcal{M}_{s.a.}$ e $t \in \mathbb{R}^+$ tali che $\tau(a) > t$, $\rho(a) \leq t$. Poniamo $a = a_+ - a_-$, $h = [a_+]$ (la proiezione sul supporto di a_+). Allora

$$\tau(a_+) \geq [\tau(a_+) - \tau(a_-)] > t \geq 2\Re \epsilon \lambda \tau(a_+) \geq \rho(a_+)$$

una contraddizione.

♡

Corollario

Se lo stato ψ è fedele, e se

$$\psi(a) = \lambda \phi(ka) + \bar{\lambda} \phi(ak) \quad k \in \mathcal{M}_{s.a.} \quad 15A.5$$

allora $k = [a_+]$.

◇

Dimostrazione

Certamente (15A.5) è vera per $[a_+]$. Supponiamo che valga per h . Si ha

$$(\lambda + \bar{\lambda})(h - [a_+])^2 = \lambda h(h - [a_+]) + \bar{\lambda}(h - [a_+])h - \lambda [a_+](h - [a_+]) - \bar{\lambda}(h - [a_+])[a_+].$$

Se vale (15A.5) per h segue

$$2\Re \epsilon \lambda \tau((h - [a_+])^2) = \rho(h - [a_+]) - \rho(h - [a_+]) = 0. \quad 15A.6$$

Quindi $h = [a_+]$.

♡

Sia ora \mathcal{M} un'algebra di Von Neumann su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} che ammette un vettore ciclico e separante Ω . È facile vedere che Ω è ciclico e separante anche per \mathcal{M}' .

Notare che se ρ è uno stato normale e fedele ($\rho(a^*a) > 0$ per ogni $a \in \mathcal{M}$ non nullo) la rappresentazione π_ρ associata a ρ attraverso la costruzione G.N.S. provvede un isomorfismo.

Possiamo allora identificare \mathcal{M} con $\Pi_\rho(\mathcal{M})$.

Sia \mathcal{K} la chiusura di $\mathcal{M}_{s.a.} \Omega$; \mathcal{K} può essere riguardato come sottospazio di \mathcal{H}_r .

Proposizione 15A.1

\mathcal{K} ha le proprietà indicate in (15A.4). ◇

Dimostrazione

La proprietà *a)* segue dal fatto che Ω è ciclico.

Per dimostrare *b)* notiamo che $\mathcal{M}'_{s.a.}\Omega$ è ortogonale in \mathcal{H}_r a $\mathcal{M}_{s.a.}\Omega$.

Infatti se $a' \in \mathcal{M}'_{s.a.}\Omega$, $a \in \mathcal{M}_{s.a.}$ si ha

$$(a'\Omega, ia\Omega) = -(ia\Omega, a'\Omega) \Rightarrow \langle a'\Omega, ia\Omega \rangle = 0 \quad 15A.7$$

Ne segue $\mathcal{M}'_{s.a.}\Omega \subset (i\mathcal{K})^\perp$ e analogamente si dimostra $i\mathcal{M}'_{s.a.}\Omega \subset (\mathcal{K})^\perp$. Quindi

$$\mathcal{M}'\Omega \subset (\mathcal{K} \cap i\mathcal{K})^\perp = \mathcal{K}^\perp + (i\mathcal{K})^\perp \quad 15A.8$$

e per la densità di $\mathcal{M}'\Omega$ segue $\mathcal{K} \cap i\mathcal{K} = \emptyset$. ♡

Dato \mathcal{K} con le proprietà indicate in (15A.4) costruiamo ora una anti-isometria invertibile j e un operatore autoaggiunto Δ (*operatore modulare*).

Nel caso in cui \mathcal{K} sia costruito mediante un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} che ha uno stato ciclico e separante Ω , vedremo che l'anti-isometria j intralaccia l'algebra e la sua commutante (che sono quindi equivalenti) e l'operatore modulare è il generatore di un gruppo di automorfismi interni che soddisfa la condizione K.M.S. per $\beta = 1$.

La costruzione che segue indica che l'operatore modulare è definito, *indipendentemente dalla teoria delle algebre di Von Neumann*, partendo da un sottospazio reale di uno spazio di Hilbert complesso, con una costruzione molto simile a quella che viene fatta per costruire l'estensione di Friedrichs di una forma quadratica chiusa e positiva.

Assumiamo che il sottospazio \mathcal{K} dello spazio di Hilbert reale \mathcal{H}_r soddisfi le condizioni (15A.4).

Siano P e Q i proiettori ortogonali in \mathcal{H}_r su \mathcal{K} e $i\mathcal{K}$ rispettivamente. Definiamo

$$A = P + Q, \quad jB = P - Q \quad 15A.9$$

Proposizione 15A.2 ([P79])

Gli operatori A, B, P, Q, j soddisfano

i) A e B sono lineari complessi e soddisfano $0 \leq A \leq 2I$ e $0 \leq B \leq 2I$

ii) $A, (2I - A)$ e B sono iniettivi e si ha $B = \sqrt{A(2I - A)}$

iii) j è un'isometria antilineare, $j^2 = I$ e per $\phi, \psi \in \mathcal{H}$ si ha $(j\phi, \psi) = \overline{(\phi, j\psi)}$

iv) B commuta con A, P, Q e j

$$v) jP = (I - Q)j, jQ = (I - P)j \text{ e } jA = (2I - A)j$$

◇

Dimostrazione

i) Un calcolo semplice mostra che $iP = Qi$. Ne segue che $A \equiv P + Q$ è lineare sui complessi e $jB \equiv P - Q$ è antilineare. Poiché $B^2 = (P - Q)^2$ si deduce che B^2 e quindi anche B è lineare.

Quindi j è antilineare.

In \mathcal{H}_r gli operatori A e B sono positivi e da (15A.3) segue che sono autoaggiunti e positivi anche in \mathcal{H} .

La stima $\|A\| \leq 2, \|B\| \leq 2$ è ovvia dalla definizione.

ii) Se $A\phi = 0$ si ha

$$\|P\phi\|^2 + \|Q\phi\|^2 = \langle P\phi, \phi \rangle + \langle Q\phi, \phi \rangle = \langle A\phi, \phi \rangle = 0$$

Ne segue $\phi \in K^\perp \cap (iK)^\perp$ e quindi $\phi = 0$. Quindi A è iniettivo.

Ugualmente si dimostra, analizzando $I - P$ e $I - Q$, che $2I - A$ è iniettivo perché P e Q sono idempotenti e $B^2 = A(A - 2I)$

iii) j è autoaggiunto in \mathcal{H}_r ed è un'isometria iniettiva poiché B è iniettivo. Quindi $j^2 = I$.

Da (15A.3) si ha

$$(j\psi, \phi) = \langle j\psi, \phi \rangle + i \langle ij\psi, \phi \rangle = \langle \psi, j\phi \rangle - i \langle i\psi, j\phi \rangle = \overline{(\psi, j\phi)}$$

iv) L'operatore B commuta con A, P, Q . Poiché $P - Q$ è autoaggiunto in \mathcal{H}_r esso commuta con j .

v) Si ha

$$BjP = (P - Q)P = (I - Q)(P - Q) = (I - Q)Bj = B(I - Q)j$$

poiché j è iniettivo, si deduce $jP = (I - Q)j$.

Prendendo aggiunti e sommando si ottiene $jA = (2I - A)j$

♡

Possiamo ora introdurre l'operatore modulare.

Definizione 15A.1 : operatore modulare

Con le notazioni precedenti, definiamo *operatore modulare associato al sottospazio* \mathcal{K} l'operatore $\Delta \equiv (2I - A)A^{-1}$.

◇

Proposizione 15A.3

L'operatore Δ è autoaggiunto, positivo, iniettivo e $\Delta^{-1} = j\Delta j$.

Inoltre $\mathcal{K} + i\mathcal{K} \subset D(\sqrt{\Delta})$ e per ogni coppia $\phi, \psi \in \mathcal{K}$ vale

$$j\sqrt{\Delta}(\phi + i\psi) = \phi - i\psi \quad 15A.10$$

◇

Dimostrazione

Da $0 \leq A \leq 2I$ e dal fatto che sia A che $2I - A$ sono iniettivi segue che Δ è positivo e iniettivo.

L'eguaglianza $\Delta^{-1} = j\Delta j$ segue dal punto v) della proposizione 15A.3.

Se ϕ e ψ sono in \mathcal{K} si ha

$$(2I - P - Q)\phi = (P - Q)\phi, \quad (2I - P - Q)(i\psi) = -(P - Q)(i\psi)$$

e quindi $(2I - A)(\phi + i\psi) = jB(\phi - i\psi)$.

Per ogni $\xi \in D(A^{-1})$ si ha quindi

$$\begin{aligned} (\phi + i\psi, \Delta\xi) &= ((2I - A)(\phi + i\psi), A^{-1}\xi) \\ &= (jB(\phi - i\psi), A^{-1}\xi) = (j(\phi - i\psi), \sqrt{\Delta}\xi) \end{aligned} \quad 15A.11$$

dove abbiamo utilizzato il punto ii) della proposizione (15A.3) e il fatto che $D(\Delta) \subset D(\sqrt{\Delta})$.

In particolare si ha

$$|(\phi + i\psi, \sqrt{\Delta}(\sqrt{\Delta}\xi))| \leq \|\phi - i\psi\| \|\sqrt{\Delta}\xi\|$$

Per densità segue che $\phi + i\psi \in D(\sqrt{\Delta})$ e che $\sqrt{\Delta}(\phi + i\psi) = j(\phi - i\psi)$.

♡

Abbiamo visto nella proposizione 15A.1 che se un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} possiede un elemento Ω ciclico e separante, allora il sottospazio ottenuto per l'azione degli elementi autoaggiunti di \mathcal{M} su Ω soddisfa le condizioni per l'esistenza dell'operatore modulare.

L'operatore modulare Δ così ottenuto *dipende dal sottospazio* e quindi in generale dal vettore Ω .

Ricordando che Δ è iniettivo sarà conveniente per rendere più trasparente l'analisi, introdurre l'operatore $\delta \equiv \log \Delta$ così da avere $\Delta^{it} = e^{it\delta}$.

Questo renderà più evidente la relazione tra l'operatore modulare Δ e la condizione K.M.S..

Ricordiamo che il gruppo unitario generato da λ lascia \mathcal{M} invariante.

Proposizione 15A.4

Il gruppo di operatori unitari $t \rightarrow e^{it\delta}$ (gruppo modulare associato al sottospazio \mathcal{K}) commuta con j e lascia invariante \mathcal{K} .

◇

Dimostrazione

Dalla definizione di Δ si ha

$$e^{it\delta} = (2I - A)^{it} A^{-it} \quad 15A.12$$

Dalla proposizione (15A.2) iv) si ha che $jA^{it} = (2I - A)^{-it} j$ (tenuto conto del fatto che j è antilineare).

Da questo e da (15A.12) segue $j\Delta^{it} = \Delta^{it}j$.

Dunque $e^{it\delta}$ commuta con A, B, j e in particolare si ha

$$e^{it\delta}\mathcal{K} = e^{it\delta}P\mathcal{H}_r = Pe^{it\delta}\mathcal{H}_r = P\mathcal{H}_r = \mathcal{K} \quad 15A.13$$

♡

È facile vedere, dalla definizione di vettori analitici, che i vettori analitici per il gruppo di automorfismi generato da Δ^{it} sono densi in \mathcal{K} .

Ritorniamo ora al caso in cui il gruppo modulare è associato a un vettore ciclico e separante per un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} .

Proposizione 15A.5

Se il gruppo modulare è associato ad un vettore ciclico e separante Ω di un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} (e quindi \mathcal{K} è la chiusura di $\mathcal{M}_{s.a.}\Omega$), allora l'operatore (chiuso) $j\sqrt{\Delta}$ è l'estensione dell'applicazione

$$a\Omega \rightarrow a^*\Omega, \quad a \in \mathcal{M}$$

definita densamente in \mathcal{H} .

◇

Dimostrazione

Abbiamo visto (proposizione 15A.1) che la chiusura di $(a + a^*)\Omega$; $a \in \mathcal{M}$ ha le proprietà richieste allo spazio \mathcal{K} .

Dalla (15A.9) della Proposizione 15A.4 applicata ad $a\Omega$ si vede allora che per tutti gli $a \in \mathcal{A}$ si ha $j\sqrt{\Delta} a\Omega = a^* \Omega$.

♡

Nota 15A.2

L'esistenza dell'operatore modulare (ma non la sua proprietà di generare un gruppo a un parametro che interlaccia l'algebra \mathcal{M} con la sua commutante) si può dimostrare in modo più semplice.

Infatti l'operatore antilineare

$$S_0 : a\Omega \rightarrow a^*\Omega, \quad a \in \mathcal{M}$$

è densamente definito (poiché Ω è ciclico per \mathcal{M}) e chiudibile poiché $S_0 \subset F_0$ con F_0 definito da

$$F_0 : b\Omega \rightarrow b^*\Omega, \quad b \in \mathcal{M}'.$$

Si verifica facilmente che $S_0 \subset F_0^*$ e poiché F_0 è densamente definito, l'operatore S_0 è chiudibile.

Indichiamo con S la chiusura di S_0 ; la decomposizione polare dà

$$S = J \Delta^{\frac{1}{2}}$$

dove $\Delta = S^*S$ è un operatore autoaggiunto e J è antiunitario.

La relazione $J^2 \Delta^{\frac{1}{2}} = J \Delta^{-\frac{1}{2}} J$ dà

$$J^2 = I \quad \Delta^{\frac{1}{2}} = J \Delta^{-\frac{1}{2}} J$$



Nota 15A.3

Va notato che in generale se a, b sono elementi autoaggiunti di \mathcal{M} l'operatore ba non è autoaggiunto.

Quindi un elemento autoaggiunto A di \mathcal{M} lascia invariante lo spazio K ma la sua azione su questo spazio *non commuta in generale con la coniugazione*.

Si vede da (15A.12) che il ruolo dell'operatore modulare è quello di *quantificare questa non commutatività*.

Se lo stato Ω è uno stato traccia su \mathcal{M} l'operatore modulare si riduce all'identità.



Vogliamo ora dimostrare che l'isometria j intralaccia \mathcal{A} con \mathcal{A}' nel senso che $j\mathcal{A}j = \mathcal{A}'$. Questa relazione sarà anche alla base della trattazioni della dualità tra coni positivi.

Per il suo interesse, diamo prima la semplice dimostrazione nel caso che \mathcal{M} sia un fattore di tipo II_1 , esista cioè uno stato fedele τ che sia una traccia ($\tau(ab) = \tau(ba)$ per ogni $a, b \in \mathcal{M}$).

Indichiamo con $\Pi_\tau \mathcal{M}$ la rappresentazione *G.N.S.* nello spazio di Hilbert \mathcal{H} associata a τ e la identifichiamo con \mathcal{M} .

Qualunque stato (normale) ω di \mathcal{M} può essere scritto nella forma $\omega(a) = \tau(\rho a) = \tau(\sqrt{\rho} a \sqrt{\rho})$ dove $\rho \in \mathcal{M}$ è un operatore positivo.

Supponiamo che ρ sia invertibile. Allora $\sqrt{\rho}$ riguardato come elemento di \mathcal{H} è ciclico per l'algebra di Von Neumann \mathcal{N} di moltiplicazione a sinistra

$$\mathcal{N} = \{L_a, a \in \mathcal{M}\}$$

È facile vedere che \mathcal{N}' è l'algebra di moltiplicazione a destra R_a . In questo caso si ha

$$S : a\sqrt{\rho} \rightarrow a^*\sqrt{\rho}, \quad Ja = a^* \quad \Delta = L_\rho R_{\rho^{-1}}.$$

Un semplice calcolo conduce a

$$e^{it\delta} L_a e^{-it\delta} b = L_{\rho^{it} a \rho^{-it}} b \quad a, b \in \mathcal{N}$$

quindi

$$e^{it\delta}\mathcal{N}e^{-it\delta} \subset \mathcal{N}.$$

D'altra parte $JL_aJb = ba^* = R_{a^*}b$ e quindi

$$j\mathcal{M}j \in \mathcal{M}'.$$

Trattiamo ora il caso generale.

Proposizione 15A.6

Con le notazioni introdotte sopra, si ha

$$Q\Omega = P\Omega = A\Omega = B\Omega = j\Omega = \Delta\Omega = j\Omega = \Omega \quad 15A.14$$

Inoltre per ogni $a' \in \mathcal{M}'_{s,a}$ esiste un $a \in \mathcal{M}_{s,a}$ tale che

$$jBa'\Omega = a\Omega. \quad 15A.15$$

◇

Dimostrazione

Per definizione $\Omega \in K$ e poiché $\mathcal{M}'\Omega \in (iK)^\perp$ si ha anche $\Omega \in K^\perp$. Quindi $P\Omega = Q\Omega = \Omega$. Da qui segue anche $j\Omega = \Delta\Omega = \Omega$.

Per dimostrare (15A.15) assumiamo inizialmente che b sia un elemento positivo di \mathcal{M}' che soddisfa $0 \leq b \leq I$.

Allora il funzionale $\psi \in \mathcal{M}_*$ definito da

$$\psi(a) = (b\Omega, a\Omega) \quad 15A.16$$

è positivo e dominato da ϕ_Ω (notare che $b^*a = \sqrt{b^*a}\sqrt{b^*}$).

Utilizzando questa proprietà e restringendo ψ agli elementi autoaggiunti di \mathcal{M} si può far vedere che esiste un elemento positivo $c \in \mathcal{M}$ tale che $\psi(a) = (a\Omega, c\Omega)$.

Ne concludiamo che $a\Omega = P(b\Omega)$. La (15A.15) segue allora da $Q\Omega = 0$.

♡

Dobbiamo estendere adesso la Proposizione 15A.6 per ottenere una relazione tra elementi di \mathcal{M} e di \mathcal{M}' .

Faremo questo traducendo (15A.16) in una relazione tra a e a' che coinvolge il gruppo modulare Δ^{it} e successivamente utilizzeremo il fatto (vedi Proposizione 15A.1) che il gruppo modulare lascia invariante \mathcal{M} .

Iniziamo traducendo (15A.16) in una relazione operatoriale tra a, a', A, B e j .

Iniziamo con

Proposizione 15A.7

Per ogni $a' \in \mathcal{M}'$ e numero complesso λ , $\Re\lambda > 0$ esiste un $a \in \mathcal{M}$ tale che

$$Bja'jB = \lambda(2I - A)aA + \bar{\lambda}Aa(2I - A) \quad 15A.17$$

◇

Dimostrazione

Per linearità possiamo assumere che a' sia positivo e anche che $a < I$. Il funzionale $b \rightarrow (b\Omega, x'\omega)$, $b \in \mathcal{M}$ è positivo e dominato da ϕ_Ω ed esiste quindi $a \in \mathcal{M}_+$ tale che

$$(b\Omega, a'\Omega) = ((\lambda ab + \bar{\lambda} ba)\Omega, \Omega), \quad \forall b \in \mathcal{M}$$

Sostituendo c^*b per b , $c \in \mathcal{M}$, si ottiene

$$(b\Omega, a'\Omega) = \lambda(b\Omega, ca\Omega) + \bar{\lambda}(ba\Omega, c\Omega)$$

Dati $b', c' \in \mathcal{M}'$ scegliamo $b, c \in \mathcal{M}$ che soddisfino la Proposizione 15A.6.

Sostituendo $b\Omega$ con $jBb'\Omega$ e $c\Omega$ con $jBc'\Omega$ si ottiene

$$(Bja'jBc'\Omega, b'\Omega) = \lambda(jBb'\Omega, ca\Omega) + \bar{\lambda}(ba\Omega, jBc'\Omega) \quad 15A.18$$

Utilizzando la relazione $a\Omega = j\Delta^{\frac{1}{2}}a^*\Omega$ valida per ogni $a \in \mathcal{M}$ la (15A.18) può essere riscritta

$$\begin{aligned} (Bja'jBc'\Omega, b'\Omega) &= \lambda(jBb'\Omega, j\Delta^{\frac{1}{2}}ac\Omega) + \bar{\lambda}(j\Delta^{\frac{1}{2}}bc'\Omega, Bc'\Omega) = \\ &= \lambda(ajBc'\Omega, (2I - a)b'\Omega) + \bar{\lambda}((2I - A)c'\Omega, ajBb'\Omega) \end{aligned}$$

Ma $A - jB = 2Q$ e $QM'\Omega = 0$ e quindi

$$(Bja'jBc'\Omega, b'\Omega) = [(\lambda(2I - A)aA + \bar{\lambda}Aa(2I - A)]c'\Omega, b'\Omega) \quad 15A.19$$

Ricordiamo ora che b' e c' erano stati scelti in modo arbitrario in \mathcal{M}' e che Ω è ciclico per \mathcal{M}' .

Ne concludiamo la relazione operatoriale

$$Bja'jB = \lambda(2I - A)aA + \bar{\lambda}Aa(2I - A). \quad 15A.20$$

♡

Trasformiamo ora questa relazione operatoriale in una relazione che contenga a , $a'j$ ed il gruppo modulare.

Definiamo la funzione analitica

$$f(z) = (BaB e^{-\bar{z}\lambda}\phi, e^{z\lambda}\psi) \quad 15A.21$$

Questa funzione è limitata nella striscia $\{z \in \mathbb{C}, |\Re z| \leq \frac{1}{2}\}$.

Utilizziamo il seguente Lemma la cui dimostrazione si ottiene ad esempio considerando la funzione $g(z) = \pi \frac{e^{i\theta z}}{\sin(\pi z)} f(z)$ e applicando la formula che dà il residuo a $z = 0$ in termini dell'integrazione su un opportuno bordo

Lemma 15A.8

Se $\Re \lambda > 0$ e $f(z)$ è una funzione limitata e analitica nella striscia $\{z \in C, |\Re z| \leq \frac{1}{2}\}$ allora posto $\lambda e^{i\frac{\theta}{2}}$, $|\theta| < \pi$

$$f(0) = \frac{1}{2} \int e^{-\theta t} \frac{1}{\cosh(\pi t)} \left[\lambda f\left(it + \frac{1}{2}\right) + \bar{\lambda} f\left(it - \frac{1}{2}\right) \right] dt. \quad 15A.22$$

◇

Utilizzando il Lemma precedente dimostriamo ora

Proposizione 15A.9

Se a e a' sono nella relazione indicata nella Proposizione A.6 e $\lambda = e^{i\frac{\theta}{2}}$, $|\theta| < \pi$ si ha

$$a = \frac{1}{2} \int \Delta^{it} j a' j \Delta^{-it} \frac{e^{-\theta t}}{\cosh(\pi t)} dt$$

◇

Dimostrazione

Siano $\phi, \psi \in \mathcal{K}$ vettori analitici di δ^{it} .

Dalle formule (15A.17) e (15A.18) segue che

$$f\left(it + \frac{1}{2}\right) = (e^{it\delta}(2I-A)aAe^{it\delta}\phi, \psi); \quad f\left(it - \frac{1}{2}\right) = (e^{-it\delta}Aa(2I-A)e^{it\delta}\phi, \psi)$$

Dalla Proposizione 15A.6 otteniamo allora

$$\lambda f\left(it + \frac{1}{2}\right) + \bar{\lambda} f\left(it - \frac{1}{2}\right) = (e^{-it\delta}Bj a' j B e^{it\delta}\phi, \psi)$$

Un'applicazione del Lemma 15A.8 dà

$$\begin{aligned} (BxB\phi, \psi) &= \frac{1}{2} \int \frac{e^{-\theta t}}{\cosh(\pi t)} (e^{-it\delta}Bj a' j B e^{it\delta}\phi, \psi) dt \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{e^{-\theta t}}{\cosh(\pi t)} (e^{-it\delta}j a' j e^{it\delta}B\phi, B\psi) dt \end{aligned} \quad 15A.23$$

Di qui segue la proposizione 15A.9 poiché \mathcal{K} genera \mathcal{H} e il codominio di B è denso.

♡

Siamo in condizione adesso di dimostrare

Proposizione 15A.10

Per ogni $t \in R$ e $a' \in \mathcal{M}'$ si ha $e^{it\delta}j a' j e^{-it\delta} \in \mathcal{M}$

◇

Dimostrazione

Sia $b' \in \mathcal{M}'$ e $\phi, \psi \in \mathcal{H}$.

Definiamo

$$g(t) = ([e^{-it\delta} j a' j e^{it\delta} b' - b' e^{-it\delta} j a' j e^{it\delta}] \phi, \psi)$$

Dalla proposizione precedente segue, per ogni θ con $\theta < \pi$

$$\int g(t) \frac{e^{-\theta t}}{\cosh(\pi t)} dt = 0 \quad 15A.24$$

La funzione h definita da

$$h(z) = \int g(t) \frac{e^{-zt}}{\cosh(\pi t)} dt$$

è olomorfa e si annulla per z reale. Quindi

$$\int g(t) e^{-ist} \frac{1}{\cosh(\pi t)} dt = 0$$

L'unicità della trasformata di Fourier implica allora $g \equiv 0$. Ne segue

$$e^{-it\delta} j a' j e^{it\delta} \in \mathcal{M}'' = \mathcal{M}$$

♡

Teorema 15A.11

Sia \mathcal{M} un'algebra di Von Neumann in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} e sia $\Omega \in \mathcal{H}$ un vettore ciclico e separante.

Allora esiste un operatore positivo (in generale illimitato) Δ detto operatore modulare (rispetto al vettore Ω) e un'isometria antilineare j tale che $j\mathcal{M}j = \mathcal{M}'$ e $e^{-it\delta} \mathcal{M} e^{it\delta} = \mathcal{M}$ per ogni t reale.

Si ha $j\Omega = \Omega$, $\mathcal{M}\Omega \in D(\sqrt{\Delta})$ e inoltre

$$j \sqrt{\Delta} a \Omega = a^* \Omega \quad \forall a \in \mathcal{M} \quad 15A.25$$

◇

Dimostrazione

La (15A.25) segue immediatamente dalla definizione di j .

Per dimostrare la rimanente parte del teorema, sia \mathcal{K} la chiusura di $\mathcal{M}_{s.a.}\Omega$.

Abbiamo visto che esso soddisfa le condizioni per la costruzione dell'operatore modulare.

Dalla Proposizione 15A.9 (per $t = 0$) sappiamo che $j\mathcal{M}'j \in \mathcal{M}$.

La conclusione del Teorema 15A.11 potrebbe allora essere ottenuta dimostrando che l'operatore modulare Δ' associato al sottospazio reale \mathcal{K}' chiusura di $\mathcal{M}'_{s.a.}\Omega$

soddisfa $\Delta' \Delta = I$ (le coniugazioni soddisfano $j' = j$). Questo provvede l'inclusione $j\mathcal{M}j \in \mathcal{M}'$.

Una dimostrazione diretta può essere fatta come segue.
Siano a, b autoaggiunti in \mathcal{M} . Poiché $j\Omega = \Omega$ si ha

$$(bjaj\Omega, \Omega) = (\Omega, ajbj\Omega) \quad 15A.26$$

Questa relazione lineare si estende a tutti gli elementi di \mathcal{M} .
Prendiamo $b' \in \mathcal{M}'$ e notiamo che $bjb'j \in \mathcal{M}$. Utilizzando in (15A.25) $bjb'j$ al posto di b otteniamo

$$((bjb'j)jaj\Omega, \Omega) = (\Omega, aj(bjb'j)j\Omega)$$

Da qui si deduce

$$(ajbj\Omega, b'\Omega) = (jbja\Omega, b'\Omega)$$

poiché $\mathcal{M}'\Omega$ è denso in \mathcal{H} ne segue

$$ajbj\Omega = jbja\Omega$$

Quest'equazione è lineare e quindi valida per tutti gli $a \in \mathcal{M}$. Sostituendo a con ac $a, c \in \mathcal{M}$ si ottiene

$$jbjac\Omega = acjbj\Omega = ajbjc\Omega \quad 15A.27$$

e quindi $jbja = ajbj$ per la densità di $\mathcal{M}\Omega$.
Ne segue $jbj \in \mathcal{M}'$.

♡

Definizione 15A.3

Dato uno spazio di Hilbert \mathcal{H} e un sottospazio reale chiuso \mathcal{K} di \mathcal{H}_r diremo che il gruppo di unitari $\{U_t\}$, $t \in R$ soddisfa la condizione modulare rispetto a \mathcal{K} se per ogni coppia di vettori $\phi, \psi \in \mathcal{K}$ esiste una funzione limitata continua $f_{\phi, \psi}$ definita nella striscia del piano complesso

$$\mathcal{S}_{-1} = \{z \in C : -1 \leq \Im z \leq 0\}$$

olomorfa nell'interno e che soddisfa le condizioni al bordo

$$f(t) = (U_t\phi, \psi) \quad f(t-i) = (\psi, U_t\phi) \quad t \in R$$

♣

Si può dimostrare la seguente Proposizione.

Proposizione 15A.12 [P79]

Se \mathcal{M} è un'algebra di Von Neumann con vettore ciclico e separante Ω , la rappresentazione $t \rightarrow e^{it\delta} \equiv \Delta^{it}$ soddisfa la condizione modulare rispetto alla chiusura di $\mathcal{M}\Omega$ ed è l'unica rappresentazione unitaria con questa proprietà. \diamond

Diamo ora la relazione tra il gruppo modulare e la rappresentazione K.M.S..

Proposizione 15A.13

Sia $\mathcal{A}, \{\alpha_t\}$ un sistema dinamico C^* . Supponiamo che uno stato ρ soddisfi la condizione K.M.S. per $\beta = 1$.

Sia $(\Pi_\rho, U_t^\rho, \mathcal{H}_\rho \Omega_\rho)$ la rappresentazione ciclica covariante associata a ρ attraverso la rappresentazione G.N.S. e sia \mathcal{K} la chiusura di $\Pi_\rho(\mathcal{M}_{s.a} \Omega_\rho)$.

Allora U_t^ρ soddisfa la condizione modulare rispetto a \mathcal{K} . \diamond

Dimostrazione

Poiché lo stato è α -invariante, la rappresentazione ciclica ottenuta è covariante.

È anche facile vedere che gli U_t^ρ lasciano invariante il sottospazio \mathcal{K} .

Per ogni $\phi, \psi \in \mathcal{K}$ possiamo scegliere due successioni $a_n, b_n \in \mathcal{M}_{s.a.}$ tale che $\Pi_\rho(a_n)\Omega_\rho$ converga a ϕ e che $\Pi_\rho(b_n)\Omega_\rho$ converga a ψ .

Per ipotesi, esistono funzioni f_n continue limitate nella striscia

$$\mathcal{S}_1 = \{z : 0 \leq \Im z \leq 1\}$$

olomorfe nell'interno e che soddisfano al bordo le condizioni

$$f_n(t) = (U_t^\rho \Pi_\rho(a_n)\Omega_\rho, \Pi_\rho(b_n)\Omega_\rho), \quad f_n(t+i) = (\Pi_\rho(b_n)\Omega_\rho, U^\rho \Pi_\rho(a_n)\Omega_\rho) \quad 15A.28$$

Siccome le f_n sono uniformemente limitate e uniformemente convergenti, per il teorema di Phragmén-Lindelöf le funzioni f_n convergono ad una funzione f olomorfa all'interno della striscia e che soddisfa la condizioni al bordo

$$f(t) = (U_t^\rho \phi, \psi) \quad f(t+i) = (\psi, U_t^\rho \phi).$$

Ponendo $g(z) = \bar{f}(\bar{z})$ si vede che g soddisfa la condizione modulare rispetto a \mathcal{K} .

Per dimostrare che a \mathcal{K} corrisponde una struttura modulare dobbiamo verificare le condizioni indicate in (15A.4).

La seconda è banalmente verificata perché Ω_ρ è ciclico.

Dimostriamo che $\mathcal{K} \cap i\mathcal{K} = \emptyset$.

Sia $\phi \in \mathcal{K} \cap i\mathcal{K}$ e $\psi \in \mathcal{K}$. Poiché U^ρ soddisfa la condizione modulare, esistono funzioni f_1 e f_2 olomorfe nella striscia $\{z : -1 \leq \Im z \leq 0\}$ che soddisfano al bordo le condizioni

$$f_1(t) = (U_t^\rho \phi, \psi), \quad f_1(t-i) = (\psi, U_t^\rho \phi)$$

$$f_2(t) = (U_t^\rho i\phi, \psi) \quad f_1(t-i) = (\psi, iU_t^\rho \phi) \quad 15A.29$$

Si ha $if_1(t) = f_2(t)$ e $-if_1(t-i) = f_2(t-i)$ che implica $if_1(z) = f_2(z)$ e $-if_1(z) = f_2(z)$ all'interno della striscia, e quindi $f_1 = f_2 \equiv 0$.
Poiché questo vale per ogni $\psi \in \mathcal{K}$ e poiché \mathcal{K} genera \mathcal{H} sui complessi, ne segue $\phi = 0$.

♡

Una conseguenza della Proposizione 15A.13 è il seguente risultato

Teorema 15A.14

Per ogni stato fedele normale ρ di un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} esiste unico un sistema dinamico W^* che indichiamo con $(\mathcal{M}, \alpha_t, \rho)$ tale che ρ soddisfi la condizione K.M.S. (rispetto a α_t).

Chiamiamo *gruppo modulare* associato a ρ il gruppo degli automorfismi di questo sistema dinamico e lo indichiamo con σ_t^ρ .

◇

Dimostrazione

Consideriamo la rappresentazione ciclica associate a ρ dalla costruzione G.N.S.. Poiché ρ è ciclico e normale, possiamo identificare \mathcal{M} con la sua immagine in Π_ρ .

Poiché Ω_ρ è separante, possiamo costruire l'operatore modulare e definire

$$\sigma_t(a) = e^{it\delta} a e^{-it\delta} \quad a \in \mathcal{M} \quad t \in \mathbb{R} \quad 15A.30$$

Per costruzione la rappresentazione $t \rightarrow e^{it\delta}$ soddisfa la condizione modulare rispetto al sottospazio chiusura di $\mathcal{M}_{s.a.}\Omega_\rho$.

È immediato vedere che la condizione di modularità implica la condizione K.M.S. rispetto a $\{\sigma_t\}$ al valore 1 del parametro β .

Per vedere il converso, sia ρ uno stato K.M.S. per $\beta = 1$ per un sistema dinamico $(\mathcal{M}, R, \alpha_t)$. Sia U_t^ρ la famiglia di operatori unitari che realizzano α_t nello spazio di Hilbert \mathcal{H}_ρ .

Utilizzando la Proposizione 15A.15 per il sistema dinamico $(\mathcal{M}, R, \alpha_t)$ è facile vedere che si ha per ogni $t \in \mathbb{R}$ e ogni $a \in \mathcal{M}$

$$\alpha_t(a) = U_t^\rho a U_{-t}^\rho = e^{it\delta} a e^{-it\delta} = \sigma_t(a) \quad 15A.31$$

♡

Come conseguenza immediata del teorema 15A.14 si ha

Lemma 15A.15

Se σ_t^ρ è il gruppo modulare associato allo stato fedele normale ρ di un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} e α è un automorfismo di \mathcal{M} allora $\{\alpha^{-1}\sigma_t^\rho\alpha\}$ è il gruppo modulare associato allo stato $\alpha^*\rho \equiv \rho\alpha$.

◇

*Dimostrazione*Siano $a, b \in \mathcal{M}$.Usando la condizione K.M.S. per $\alpha(a), \alpha(b)$ si costruiscono due funzioni olomorfe all'interno della striscia \mathcal{S}_1 che al bordo coincidono rispettivamente con

$$\rho(\alpha(b) \sigma_t^\rho \alpha(a)) \equiv (\rho\alpha)(b(\alpha^{-1} \sigma_t^\rho \alpha(a)))$$

e con

$$\rho(\sigma_t^\rho(\alpha(a) \alpha(b))) = (\rho\alpha)(\alpha^{-1} \sigma_t^\rho \alpha(a)|b)$$

Il risultato segue allora dalla Proposizione A.14.

♡

Consideriamo ora le relazioni tra stati normali fedeli in termini dei loro operatori modulari. Iniziamo costruendo la derivata di Radon-Nikodym.

*Proposizione 15A.16*Sia ρ uno stato normale fedele di un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} ; denotiamo con σ_t^ρ il corrispondente gruppo modulare.Se $\rho' \in \mathcal{M}_*$ soddisfa $0 \leq \rho' \leq \rho$ e σ' è invariante sotto l'azione duale di $\{\sigma_t^\rho\}$ allora esiste unico un elemento $h \in \mathcal{M}_{s.a.}$ tale che $\rho'(a) = \rho(h a) = \rho(a h)$. Inoltre h è invariante per l'azione di σ^ρ .

◇

*Dimostrazione*Per il Lemma 15A.1 esiste un unico $h \in \mathcal{M}$ tale che i

$$\rho' = \frac{1}{2}[\rho(h \cdot) + \rho(\cdot h)] \tag{15A.32}$$

poiché sia ρ che ρ' sono invarianti e h è unico, anche h è invariante.Dimostriamo che questo implica $\rho(a h) = \rho(h a)$ per ogni $a \in \mathcal{M}$ (in effetti si può dimostrare che c'è equivalenza). Per ogni $a h \in \mathcal{M}$ esiste una funzione f olomorfa in Ω_1 tale che

$$f(t) = \rho(a h), \quad f(t+i) = \rho(h b)$$

Se h è invariante, f è costante. Quindi $\sigma(a h) = f(0) = f(i) = \sigma(h a)$.Da (15A.32) segue $\rho(\cdot) = \rho'(h \cdot) = \rho(\cdot h)$

♡

Studiamo ora il caso di stati che hanno *lo stesso operatore modulare*.*Proposizione 15A.17*Se ρ e ρ' sono stati fedeli e normali dell'algebra di Von Neumann \mathcal{M} e se i loro operatori modulari coincidono allora esiste unico un operatore positivo e

iniettivo h affiliato a $\mathcal{M} \cap \mathcal{M}'$ tale che $\rho'(a) = \rho(ha)$ (e viceversa $\rho(a) = \rho'(h^{-1}a)$) per tutti gli $a \in \mathcal{M}$.
L'elemento h gioca quindi il ruolo di *derivata di Radon-Nykodym* di ρ' rispetto a ρ .

◇

Dimostrazione

Consideriamo per primo il caso $\rho' \leq \rho$. Dal lemma precedente sappiamo che $\rho'(\cdot) = \rho(h \cdot)$ con h invariante per l'azione di σ_t^ρ .
Siano u unitario e a arbitrario in \mathcal{M} . Utilizzando la condizione K.M.S. per ρ otteniamo due funzioni f, g continue in Ω_1 e olomorfe nel suo interno tale che

$$\begin{aligned} f(t) &= \rho'(u^* \sigma_t^\rho h u a), & f(t+i) &= \rho'(\sigma_t^\rho h u a u^*) \\ g(t) &= \rho'(u^* \sigma_t^\rho u a) & g(t+i) &= \rho'(\sigma_t^\rho u a u^*) \end{aligned}$$

Da $h \in \mathcal{M}_{s.a.}$ segue $f(t) = f(t+i)$ e quindi $f = g$.
Valutando questa funzione in zero si ottiene

$$\rho(u^* h u a) = \rho(h a)$$

Dall'unicità di h segue $u^* h u = h$. Questo deve valere per ogni unitario in \mathcal{M} e quindi $h \in \mathcal{M} \cap \mathcal{M}'$.

Nel caso generale, notiamo innanzitutto che σ è anche il gruppo modulare per $\rho + \rho'$; ne segue che esistono operatori $h, h' \in \mathcal{M} \cap \mathcal{M}'$ tali che

$$\rho(a) = (\rho + \rho')(h a), \quad \rho'(a) = (\rho + \rho')(h' a)$$

poiché ρ, ρ' sono fedeli, h e h' sono iniettivi. Ne segue che $k = h (h')^{-1}$ è affiliato a \mathcal{M} ed è tale che $\rho'(a) = \rho(h a)$.

♡

Possiamo ora studiare il caso di due stati ρ e τ .

Proposizione 15A.18

Siano ρ e τ due stati fedeli e normali di \mathcal{M} e siano σ_t^ρ e σ_t^τ i loro gruppi modulari.

Le seguenti condizioni sono tra loro equivalenti:

- 1) ρ è invariante sotto l'azione di σ^τ
- 2) τ è invariante sotto l'azione di σ^ρ
- 3) σ^τ e σ^ρ commutano fra loro.
- 4) esiste unico un operatore positivo iniettivo h affiliato a $\mathcal{M} \cap \mathcal{M}'$ tale che si abbia $\tau(a) = \sigma(h a) \quad \forall a \in \mathcal{M}$.
- 5) esiste unico un operatore positivo iniettivo k affiliato a $\mathcal{M} \cap \mathcal{M}'$ tale che si abbia $\sigma(a) = \tau(k a) \quad \forall a \in \mathcal{M}$.

◇

Dimostrazione

1) \leftrightarrow 3) e 2) \leftrightarrow 3)

Per il lemma 15A.15 il gruppo modulare associato a $\rho\sigma_t^\tau$ è $\sigma_{-s}^\tau\sigma_t^\rho\sigma_s^\tau$, $s \in R$.
Se ρ è invariante per σ^τ si ha

$$\sigma_{-s}^\tau\sigma_t^\rho\sigma_s^\tau = \sigma_t^\rho \tag{15A.33}$$

e quindi σ^τ e σ^ρ commutano.

Reciprocamente se i due gruppi modulari commutano segue da (15A.33)

$$\rho\sigma^t au(a) = \rho(ha)$$

per un operatore positivo h affiliato a $\mathcal{M} \cap \mathcal{M}'$.

L'unicità di h implica $h_{ns} = h_s^n$ per ogni $n \in N$. Questo implica $h_s = I$ per ogni s e ρ è invariante per σ_t^τ .

2) \leftrightarrow 4) e 1) \leftrightarrow 5)

Immediato

1) \leftrightarrow 4)

Consideriamo lo stato $\xi = \frac{1}{2}(\rho + \tau)$ e sia σ^ξ il suo gruppo modulare. Poiché ξ è invariante per σ^τ da 1) \leftrightarrow 2) segue che τ è invariante per σ^ξ .

Siccome $\tau \leq 2\xi$ esiste $0 \leq k \leq 2I$, invariante sotto σ^ξ tale che $\tau(a) = \xi(ha)$.

Dall'unicità e l'invarianza di ρ e di τ anche k è invariante.

Notando che $\rho(a) = \xi((2I - k)a)$ e che sia k e $2I - k$ sono iniettivi (sia ρ che τ sono fedeli) si deduce che $h \equiv \frac{k}{2I - k}$ è un operatore positivo iniettivo affiliato a $\mathcal{M} \cap \mathcal{M}'$.

D'altra parte $\rho(a) = \tau(ha)$.

♡

Nota 15A.4

La Proposizione 15A.19 è una specie di teorema di Radon-Nykodim non commutativo, e l'operatore h gioca il ruolo di derivata di Radon-Nykodim.

Per vedere questa analogia notiamo che per il teorema di Gelfand e Neumark, ogni algebra di Von Neumann commutativa può essere rappresentata fedelmente mediante l'algebra $\mathcal{A} \equiv L^\infty(X)$ degli operatori di moltiplicazione per funzioni a valori complessi essenzialmente limitate su uno spazio localmente compatto X .

In questo caso $\mathcal{A}' = \mathcal{A}$.

Nel caso $X = L^\infty(T^d)$ gli stati normali sono rappresentati dalle funzioni positive $f(x)$ misurabili su T^d che hanno integrale uno (più precisamente dalle misure $f(x)dx$).

Quelli ciclici e separanti sono rappresentati da funzioni strettamente positive.

Data una funzione strettamente positiva f lo stato ϕ_f su $L^\infty(T^d)$ è definito da

$$\phi_f(a) = \int a(x)f(x)dx, \quad a \in L^\infty \quad 15A.34$$

L'operatore j in questo caso è la coniugazione complessa. L'operatore Δ è l'identità.

Il cono positivo \mathcal{C}_f definito da f coincide con il cono positivo \mathcal{C}'_f ed è rappresentato dalle funzioni positive integrabili.

Infatti dato un elemento $g \in \mathcal{A}$ il funzionale ϕ_g è positivo se e solo se g è positivo. Se g ha integrale uno si tratta di uno stato.

Il funzionale positivo così definito è tale che

$$\phi_g(a) = \int a(x) \frac{g(x)}{f(x)} f(x) dx$$

Quindi $\frac{g(x)}{f(x)}$ è la derivata di Radon-Nikodym dello stato ϕ_g (i.e. della misura $g(x)dx$) rispetto allo stato ϕ_f (i.e. della misura $f(x)dx$).



Notiamo che nel caso commutativo la funzione identicamente uguale ad uno è un vettore ciclico e separante.

L'equazione (15A.34) può quindi essere interpretata in questo modo:

dato un elemento di $L^\infty \equiv \mathcal{A}'$ il funzionale lineare $a \rightarrow \phi_b(a)$ è positivo se e solo se b appartiene al cono positivo di \mathcal{A}

Esiste quindi una dualità tra il cono positivo in \mathcal{A}' e il cono positivo di \mathcal{A} originata dallo stato Ω .

Questa dualità è elementare nel caso commutativo, e sussiste qualunque sia lo stato ciclico e separante (determinato in questo caso da una funzione strettamente positiva).

Il formalismo introdotto in questa Appendice permette di estendere questa dualità al caso non commutativo (*dualità di Tomita*)

Dimostriamo preliminarmente

Proposizione 15A.19

Siano ρ e τ stati normali e fedeli \mathcal{M} e siano σ^ρ , e σ^τ i relativi gruppi modulari. I sistemi dinamici $\mathcal{M}, \sigma_t^\rho$ e $\mathcal{M}, \sigma_t^\tau$ sono equivalenti.



Dimostrazione

Definiamo uno stato fedele normale dell'algebra mediante

$$\xi(A) = \frac{1}{2}[\rho(a_{1,1}) + \tau(a_{2,2})]$$

dove abbiamo indicato con A la matrice di componenti $a_{i,j}$, $i, j = 1, 2$.

Indichiamo con σ_t^ξ il gruppo modulare associato a ξ . Per unicit  si ha

$$\sigma_t^\xi(A)_{1,1} \sigma_t^\rho(a_{1,1}) \quad \sigma_t^\rho(A)_{2,2} \sigma_t^\tau(a_{2,2})$$

L'equivalenza dei due sistemi segue dal fatto che il cociclo determinato da

$$\sigma_t^\xi(A)_{2,2} = u_t(A)_{1,1}, \quad \sigma_t^\xi(A)_{1,1} = 0$$

intralaccia σ^ρ e σ^τ .

♡

Sia data un'algebra di Von Neumann \mathcal{M} su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} con vettore ciclico e separante Ω . Indichiamo con Δ l'operatore modulare e con j la isometria invertibile antilineare associati.

Indichiamo con S_0 l'operatore densamente definito in $\mathcal{M}\Omega$ da $S_0 a\Omega = a^*\Omega$, $a \in \mathcal{M}$ e con F_0 l'operatore densamente definito in $\mathcal{M}'\Omega$ da $S_0 a\Omega = a^*\Omega$, $a \in \mathcal{M}'$. Indichiamo con S ed F le loro chiusure. Si ha la decomposizione polare $S = j\sqrt{\Delta}$ con $\Delta = S^*S$.

Se $\phi \in \mathcal{H}$ indichiamo X_ϕ su \mathcal{M} il funzionale lineare definito da

$$X_\phi(a) = (a\Omega, \phi) \tag{15A.34}$$

Analogamente denotiamo con $X_{\phi'}$ su \mathcal{M}' il funzionale lineare

$$X_{\phi'}(a') = (a'\Omega, \phi') \tag{15A.35}$$

Definizione 15A.4

Diciamo che $\phi \in \mathcal{M}_\Omega$ positivo se il funzionale X_ϕ   positivo.

♣

Indichiamo con \mathcal{C}_Ω il cono composto dai vettori che sono \mathcal{M}_Ω positivi. Analogamente indichiamo con \mathcal{C}'_Ω il cono dei vettori $\phi' \in \mathcal{H}$ che sono \mathcal{M}'_Ω positivi.

I risultati descritti in quest'appendice permettono di dimostrare

Teorema A.20

Il funzionale $X_{\phi'}$ su \mathcal{M}'   positivo se e solo se esiste un operatore autoaggiunto positivo h affiliato a \mathcal{M} tale che $\phi' = h\Omega$.

Questa   anche la condizione sotto la quale la rappresentazione $\Pi_p\mathcal{M}$ di \mathcal{M} generata attraverso la costruzione G.N.S. dallo stato p   equivalente alla rappresentazione $\Pi_\Omega(\mathcal{M}) \equiv \mathcal{M}$

Reciprocamente il funzionale X_ϕ su \mathcal{M}   positivo se e solo se esiste un operatore autoaggiunto positivo k affiliato a \mathcal{M}' tale che $\phi = k\Omega$

◇

Questo teorema mette in dualit  il cono \mathcal{C}_Ω con il cono degli elementi positivi in \mathcal{M}' e il cono \mathcal{C}'_Ω con il cono degli elementi positivi in \mathcal{M} .

Tutta la teoria che abbiamo descritto si può collocare nell'ambito della teoria dei coni positivi duali: un'analisi approfondita si può trovare su [P79]. Per ulteriori approfondimenti sulla teoria di Tomita-Takesaki e sulla teoria dei coni duali si può vedere [KR90]

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [G72] L.Gross *Existence and uniqueness of physical ground states* Journ. Funct. Analysis 10 (1972) 52-109.
- [K58] R.A.Kunz , *Fourier transforms on locally compact unimodular groups* Trans. Amer. Math. Soc. 89 (1958) 519-540
- [KR90] R.Kadison, R.Ringrose, *Fundamentals of the theory of operator algebras operator algebras* vol.I e II. AMS 1983.
- [P79] K.Pedersen, *Lecture Notes in Mathematics*,731, Springer 1979.
- [S53] I.Segal *A non-commutative extension of abstract integration* , Ann. of Math. 58 (1953) 401-457, Ann. of Math. 58 (1953) 595-596

CAPITOLO 16
ATOMI DI IDROGENO E IDROGENOIDI. STIME DEL
NUMERO DI STATI LEGATI.

In Meccanica Classica nel sistema di riferimento del baricentro il sistema a due corpi newtoniano per energia negativa ammette solo soluzioni periodiche e per energia positiva ha una teoria dello scattering piuttosto elementare.

Entrambe queste caratteristiche sono dovute alla presenza di un'ulteriore costante del moto (oltre a quelle dovute al fatto che le equazioni sono autonome e al teorema di Noether relativamente all'invarianza per traslazioni e rotazioni), cioè la proiezione del vettore di Runge-Lenz sul piano del moto.

Per energie negative l'algebra che le parentesi di Poisson inducono tra queste costanti del moto (opportunamente normalizzate) è l'algebra di Lie dal gruppo $SO(4)$; questo permette di determinare in forma chiusa il moto in corrispondenza a tutti i dati iniziali e di dimostrare che tutte le orbite corrispondenti ad energia negativa sono chiuse (moti Kepleriani).

Nel caso di energie positive, l'algebra indotta dalla parentesi di Poisson è l'algebra del gruppo $O(3, 1)$, le traiettorie sono aperte e si estendono all'infinito. Corrispondentemente è possibile determinare per via algebrica il loro comportamento asintotico nel tempo.

Nota 16.1

Come vedremo più avanti (Teorema 16.2) questa struttura appare anche nella versione quantistica del sistema Kepleriano, cioè nell'atomo di idrogeno) e porta ad analoghe semplificazioni.

L'analisi che fece Pauli della struttura quantistica dell'atomo di idrogeno mediante la struttura dell'algebra di Lie $so(4)$ fu uno dei primi successi della Meccanica Quantistica.

In particolare sono determinabili esattamente le energie degli stati legati (autovalori negativi della hamiltoniana) e le corrispondenti autofunzioni.

Questo permette anche di verificare il *principio di corrispondenza* secondo il quale, per energie sufficientemente vicine alla soglia di ionizzazione (e quindi *numeri quantici* molto grandi) la descrizione data dalla Meccanica Quantistica deve riflettere i risultati della Meccanica Classica.

In particolare il supporto delle autofunzioni che hanno un valore molto grande del momento angolare deve essere un intorno dell'orbita classica.



La hamiltoniana dell'atomo di idrogeno è

$$H = \frac{\hat{p}_1^2}{2 m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2 m_2} + \frac{e_1 e_2}{|x_1 - x_2|} \quad 16.1$$

dove e_1, e_2 sono le cariche dell'elettrone e del protone, m_1, m_2 le loro masse, $x_1, x_2, \in R^3$ le loro coordinate e $\hat{p}_i \equiv i \nabla_i$ (utilizziamo unità di misura nelle quali $\hbar = 1$).

L'operatore H agisce sullo spazio di Hilbert

$$\mathcal{H} \equiv L^2(R^3, dx_1) \otimes L^2(R^3, dx_2)$$

Utilizzando le coordinate del centro di massa X e coordinate relative x la hamiltoniana assume la forma

$$H = \frac{|\hat{p}_{cm}|^2}{2 M} + \frac{|\hat{p}|^2}{2 \mu} + \frac{e_1 e_2}{|x|} \quad \hat{p}_{cm} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \quad \hat{p} = \hat{p}_1 - \hat{p}_2 \quad 16.2$$

dove $M = m_1 + m_2, \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

Come in Meccanica Classica il primo addendo descrive il moto libero del baricentro.

Ci limiteremo dunque allo studio del moto relativo, e indicheremo ancora con il simbolo H la corrispondente hamiltoniana.

L'operatore H è autoaggiunto; infatti abbiamo visto nel corso dell'analisi degli operatori di Schroedinger che in tre dimensioni l'operatore $\frac{1}{|x|}$ è infinitesimo rispetto al laplaciano.

Inoltre H è essenzialmente autoaggiunto sull'intersezione del dominio dell'operatore Δ e di quello dell'operatore $\frac{1}{|x|}$, e lo spettro essenziale di H coincide con lo spettro essenziale del laplaciano, quindi con l'asse reale positivo.

Studiamo lo spettro puntuale di H . Definiamo $\alpha \equiv e_1 e_2$.

Teorema 16.1

Se $\alpha \geq 0$ lo spettro discreto è vuoto. Se $\alpha < 0$ lo spettro è limitato dal basso, gli autovalori di H sono tutti negativi, sono infiniti in numero e hanno 0 come solo punto di accumulazione.

◇

Dimostrazione

1)

Dimostriamo innanzitutto che se esiste $\phi \in L^2(R^3, dx)$ tale che $H\phi = E\phi$, allora deve essere $\alpha < 0, E < 0$.

Per questo consideriamo il gruppo unitario ad un parametro $U(\beta)$ delle dilatazioni

$$U(\beta) x U^*(\beta) = e^\beta x, \quad U(\beta) \hat{p} U^*(\beta) = e^{-\beta} \hat{p} \quad 16.3$$

E' facile vedere che il suo generatore è $\frac{1}{2}(x \widehat{p} + \widehat{p} x)$. L'azione di questo gruppo su H è

$$U(\beta) H U^*(\beta) = e^{-2\beta} H_0 + e^{-\beta} \frac{\alpha}{|x|}, \quad H_0 \equiv \frac{|\widehat{p}|^2}{2m} \quad 16.4$$

Dunque se $(H - E)\phi = 0$ si ha

$$\left(e^{-2\beta} H_0 + e^{-\beta} \frac{\alpha}{|x|} - E \right) U(\beta)\phi = 0 \quad 16.5$$

Se $\phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, prendendo il prodotto scalare con $U(\beta)\phi$ si ottiene

$$(U(\beta)\phi, [(1 - e^{-2\beta}) H_0 + (1 - e^{-\beta}) \frac{\alpha}{|x|}] U(\beta)\phi) = 0 \quad \forall \beta \neq 0 \quad 16.6$$

Dividendo per β e passando al limite $\beta \rightarrow 0$ si ottiene infine, tenendo conto del fatto che $\lim_{\beta \rightarrow 0} U(\beta)\phi = \phi$

$$(\phi, H_0\phi) = -\frac{\alpha}{2} \left(\phi, \frac{1}{|x|}\phi \right) \quad 16.7$$

Da (16.7) si deduce che deve essere $\alpha < 0$ (H_0 è un operatore positivo).

Utilizzando ancora il fatto che ϕ è autovettore di H relativo all'autovalore E da (16.7) si deduce

$$-\frac{\alpha}{2} \left(\phi, \frac{1}{|x|}\phi \right) = -E\|\phi\|^2 \quad 16.8$$

Da (16.7) e (16.8) segue che $\alpha < 0$, $E < 0$.

La (16.7) è nota come *teorema del viriale*.

Dalla deduzione fatta segue che risultati analoghi possono essere ottenuti per potenziali $|x|^{-\gamma}$, $0 < \gamma < 2$.

Per $\gamma \geq 2$ la conclusione è ancora $\alpha < 0$ ma ora si ottiene $E > 0$.

Conviene però notare che se $\gamma > 2$ il potenziale non è una piccola perturbazione di H_0 e quindi il problema della autoaggiuntezza va analizzato separatamente.

2)

Dimostriamo ora che esistono infiniti autovalori negativi.

Poichè lo spettro è limitato dal basso, e poichè lo spettro essenziale coincide con l'asse reale positivo, il punto di accumulazione non può essere che lo zero.

Per dimostrare l'affermazione costruiamo un sottospazio $\mathcal{K} \in \mathcal{H}$ di dimensione infinita e tale che si abbia

$$(\phi, H\phi) < 0 \quad \forall \phi \in \mathcal{K} \quad 16.9$$

La costruzione verrà effettuata utilizzando ancora una volta il gruppo delle dilatazioni.

Da (16.4) segue che per ogni $\phi \in \mathcal{H}$

$$(U(\beta)\phi, HU(\beta)\phi) = e^{-2\beta}(\phi, \frac{\widehat{p}^2}{2\mu}\phi) + \alpha e^{-\beta}(\phi, \frac{1}{|x|}\phi) \quad 16.10$$

Poichè $\alpha < 0$ per ogni ϕ esiste un $\beta_0(\phi) > 0$ tale che per $\beta > \beta_0$ il membro a destra è negativo. Fissiamo $0 < R_1 < R_2$ e scegliamo ϕ con supporto in $R_1 < r < R_2$.

Se denotiamo con S il supporto di ϕ , allora $U(\beta)\phi$ ha supporto in $e^\beta S_\phi$.

Ne segue che esiste una successione infinita crescente $\{N_i\}$ tale che i supporti di $U(N_i\beta)\phi$ siano due a due disgiunti (così che i vettori sono ortogonali) e $(U(N_i\beta)\phi, HU(N_i\beta)\phi) < 0 \forall N_i$.

Dal principio di min-max si conclude che esistono infiniti autovalori negativi.

3)

Le stesse considerazioni mostrano che comunque sia scelta $\epsilon > 0$ esiste un sottospazio \mathcal{K}_ϵ di dimensione infinita tale che

$$-\epsilon < \left(U(N_i\beta)\phi, \frac{1}{|x|}U(N_i\beta)\phi \right) < 0 \quad \forall \phi \in \mathcal{K}_\epsilon, \quad \|\phi\| = 1 \quad 16.11$$

Ne segue che esiste una successione ϕ_n di stati legati dell'atomo di idrogeno che hanno supporto essenziale fuori da una palla raggio R per R arbitrariamente grande, nel senso che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{|x| < R} |\phi_n(x)|^2 dx = 0 \quad 16.12$$

In questo senso il supporto degli stati legati dell'atomo di idrogeno *si estende all'infinito* e dobbiamo aspettarci che questo dia origine ad alcune peculiarità nella teoria dello scattering.

♡

Prima di analizzare in dettaglio la struttura algebrica che si può costruire mediante costanti del moto, enunciamo e dimostriamo un *Lemma Tecnico* che sarà utile ripetutamente in seguito.

Lemma Tecnico

Se l'operatore A è autoaggiunto e l'operatore B è essenzialmente autoaggiunto su un dominio \mathcal{D} che è invariante per il gruppo ad un parametro generato da A , e se

$$B e^{-iAt}\phi = e^{-iAt} B\phi, \quad \forall \phi \in \mathcal{D}, \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad 16.13$$

allora ogni funzione limitata di B commuta con ogni funzione limitata di A .

Se B non è chiuso, la (16.13) si estende alla chiusura di B .

◇

Dimostrazione

Poniamo $W \equiv (B - iI)(B + iI)^{-1}$. L'operatore W si estende ad un operatore unitario e per ogni $\psi \in \mathcal{H}$ esiste ϕ tale che $\phi = (B + iI)\psi$. Dunque

$$W e^{iAt}\phi = (B - iI)e^{iAt}\psi = e^{iAt}(B - iI)\psi = e^{iAt}W\phi$$

Per densità si ha $W e^{iAt} = e^{iAt}W$; passando alla risolvente e notando che ogni funzione limitata di B è una funzione limitata di W si dimostra l'asserto. \heartsuit

Utilizzando questo Lemma tecnico si dimostra

Teorema 16.2

I vettori L (momento angolare) e R (vettore di Runge-Lenz) così definiti

$$L = x \wedge p \quad R = \frac{1}{2}[p \wedge L + L \wedge p] + \mu\alpha \frac{x}{|x|} \quad x, p \in R^3 \quad 16.14$$

hanno componenti autoaggiunte (ed essenzialmente autoaggiunte sul dominio di H) che commutano con H nel senso del lemma tecnico precedente.

Si ha, sui domini di essenziale autoaggiuntezza comuni,

$$\begin{aligned} L \cdot R = R \cdot L = 0, \quad [L_n, L_l] &= \epsilon_{n,l,s} L_s, \\ [R_n, R_l] &= -2i\mu H \epsilon_{n,l,k} L_k, \quad [L_n, R_l] = i \epsilon_{n,l,k} L_k \end{aligned} \quad 16.15$$

dove abbiamo sottinteso sommazione su indici ripetuti ed abbiamo indicato con il simbolo $\epsilon_{n,l,k}$ il tensore di Ricci e con $L \cdot R$ la somma $\sum_l L_l R_l$, e analogamente per $R \cdot L$. Inoltre

$$|R|^2 = 2\mu H(|L|^2 + 1) + \mu^2 \alpha^2 \quad 16.16$$

\diamond

Dimostrazione

Si tratta di calcoli espliciti utilizzando le definizioni di L_k e di R_h e le relazioni di commutazione canoniche tra \hat{x}_h e \hat{p}_h .

Le relazioni di commutazione tra L_k ed R_h riflettono il fatto che R è un vettore. Le relazioni di commutazione tra R_k e R_h si verificano più facilmente se si tien conto che \hat{x} e \hat{p} sono vettori.

L'identità (16.16) sarà utile nel seguito. \heartsuit

Da (16.15) si riconosce che, per energie negative e se vengono opportunamente normalizzate, le L_k ed R_h generano l'algebra di Lie di $so(4)$.

Infatti, ponendo

$$A_k \equiv \frac{1}{2}[L_k + R_k(-2\mu H)^{-\frac{1}{2}}] \Pi_- \quad 16.17$$

$$B_k \equiv \frac{1}{2}[L_k - R_k(-2\mu H)^{-\frac{1}{2}}]\Pi_- \quad 16.18$$

(dove Π_- è il proiettore sulla parte negativa dello spettro di H) e utilizzando (16.15) si verifica che sul dominio di essenziale autoaggiuntezza comune valgono le relazioni di commutazione

$$[A_k, A_h] = i \epsilon_{k,h,l} A_l \quad [B_k, B_h] = i \epsilon_{k,h,l} B_l \quad 16.19$$

e inoltre

$$|A|^2 = |B|^2 = \left[\frac{1}{4} - \frac{\mu\alpha^2}{8H} \right] \Pi_- \quad 16.20$$

Ricordare che per la disuguaglianza di Hardy (principio di indeterminazione) $H > -\frac{m\alpha^2}{2}I$.

Questa realizzazione di SO_4 implica che $|A|^2$ e $|B|^2$ hanno autovalori $l(l+1)$ con l intero positivo o nullo.

Le rappresentazioni irriducibili corrispondono a sottospazi di dimensione minore o al più uguale a $(2N+1)^2$.

Da (16.20) e dal fatto che da (16.19) risulta che $|A|^2$ assume tutti i valori $\frac{1}{4}(n^2+1)$ si ottiene immediatamente

$$E_n = -\frac{\mu\alpha^2}{2n^2} \quad n = 1, 2, 3.. \quad 16.21$$

Possiamo adesso costruire gli autovettori di H .

Procediamo come nello studio del momento angolare.

Scelta una terna di assi cartesiani, consideriamo gli autovettori comuni di H , A_3 , B_3 (un insieme massimale di operatori che commutano fra loro).

Consideriamo innanzitutto, per fissati n, l , gli autovettori associati al più alto valore possibile per A_3 e B_3 . Questo è ottenuto imponendo le condizioni

$$R_+\phi = L_+\phi = 0 \quad 16.23$$

dove

$$R_{\pm} \equiv R_1 \pm iR_2 \quad L_{\pm} \equiv L_1 \pm iL_2$$

Gli altri autostati saranno poi ottenuti per applicazione successiva di potenze di A_- e di B_- .

Si può verificare che R può essere scritto nella forma

$$R = \frac{i}{2}[p, L^2] + \frac{\mu\alpha x}{|x|}$$

e quindi

$$R_+ = \frac{i}{2}[p_+, L^2] + \frac{\mu\alpha x_+}{|x|}$$

dove

$$p_{\pm} = p_1 \pm ip_2 \quad x_{\pm} = x_1 \pm ix_2 \quad 16.24$$

Da qui si deduce che, se $R_+\phi = 0$ e $H\phi = E_n\phi$, allora $L_+\phi = 0$ e quindi ϕ corrisponde al valor massimo che L^2 può assumere nel sottospazio associato all'autovalore E_n della hamiltoniana.

Se si utilizza come sistema massimale di osservabili che commutano fra loro gli osservabili

$$H, |L|^2, L_3, M_3$$

con autovalori

$$E_n, l(l+1), m, \nu$$

lo stato descritto da (16.23) è lo stato che corrisponde all' autovalore m sia di L_3 che di R_3 .

Per ottenere una rappresentazione esplicita come operatori in $L^2(R^3)$ occorre considerare la rappresentazione esplicita dell'operatore \widehat{p} .

Posto $z \equiv x_3$ utilizziamo coordinate polari

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

Per l'autofunzione $\phi_{n,l,l}$ in cui L_3 raggiunge il suo valore massimo l si ha

$$i\widehat{p}_+ \phi_{n,l,l} = \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right) \phi_{n,l+1,l+1}, \quad \frac{x_+}{|x_+|} \phi_{n,l,l} = \phi_{n,l+1,l+1} \quad 16.25$$

Utilizzando (16.24) si ha allora

$$R_+ \phi_{n,n-1,n-1} \equiv \left[-n \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{n-1}{r} \right) + \mu\alpha \right] \phi_{n,n-1,n-1} = 0 \quad 16.26$$

da cui si deduce

$$\phi_{n,n-1,n-1}(r, \theta, \psi) = cr^{n-1} e^{-\frac{\mu\alpha r}{2}} Y_{n-1}^{n-1}(\theta, \psi) \quad 16.27$$

dove $Y_{n-1}^{n-1}(\theta, \psi)$ sono le armoniche sferiche. Per $\alpha < 0$ la funzione trovata appartiene a

$$L^2(R^3, dx) \simeq L^2((0, \infty), r^2 dr) \otimes L^2(S^2)$$

Le rimanenti autofunzioni $\psi_{n,l,m}$ corrispondenti a $H = E_n$, $L^2 = l(l+1)$, $L_3 = m$ si ottengono come

$$\psi_{n,l,m} = L_-^{l-m} R_-^{n-1-l} \phi_{n,n-1,n-1} \quad 16.28$$

Si può verificare che queste autofunzioni formano una base ortogonale completa per il sottospazio corrispondente al valore E_n dell'energia.

Nota 16.2

Dalla forma esplicita (16.27) si può verificare che la funzione $\phi_{n,n-1,n-1}(x)$ raggiunge nella sua dipendenza dalla variabile radiale r il valor massimo per

$$r = \frac{n(n+1)}{\mu|\alpha|} = n(n+1)r_B \quad 16.29.$$

dove $r_B \equiv \frac{1}{\mu|\alpha|} \simeq 0.52910^{-8} \text{ cm}$ è il *raggio di Bohr*.

Per avere un'idea del supporto di $\psi_{n,n-1,n-1}(x)$ conviene calcolarne la media e la varianza.

Si ottiene

$$\int |\psi_{n,n-1,n-1}(x)|^2 |x| dx = n(n+1/2)r_B,$$

$$\int |\psi_{n,n-1,n-1}(x)|^2 |x|^2 dx = n(n+1/2)(n+1)r_B^2$$

Questo implica che per n grande la funzione tende a *concentrarsi su una corona sferica di raggio medio* $n(n+1/2)r_B$ e spessore $\simeq n^{\frac{3}{2}}$.

Ne segue che il rapporto tra raggio e spessore della corona decresce in n come $n^{-\frac{1}{2}}$.

Considerazioni analoghe possono essere fatte per le funzioni $\phi(n, l, m)$ per n grande.



Studiamo ora la parte positiva dello spettro di H . Vogliamo dimostrare in $[0, \infty)$ non vi è spettro discreto e neppure spettro singolare continuo.

Indichiamo con $U(\beta)$ il gruppo ad un parametro delle dilatazioni. La famiglia di operatori $U(\beta)$ può essere continuata come funzione di β nel piano complesso e definisce una funzione analitica in β per $\Im \beta \neq 0$.

Gli operatori $U(\beta)$ che si ottengono non sono limitati ma hanno un insieme comune denso e invariante \mathcal{D} di vettori analitici (ad esempio i vettori nei sottospazi spettrali limitati del generatore) su cui commutano.

Per $\phi, \psi \in \mathcal{D}$ si ha

$$\langle \phi, (H - z)^{-1} \psi \rangle = \left\langle U(\beta) \phi, \left[e^{-2\beta} \frac{|\hat{p}|^2}{2\mu} + e^{-\beta} \frac{\alpha}{|x|} - z \right]^{-1} U(\beta) \psi \right\rangle \quad z \notin R^+, i\beta \notin R \quad 16.30$$

Dal fatto che $\frac{1}{|x|}$ è compatto relativamente a \hat{p}^2 segue che lo spettro essenziale di $e^{2\beta} \hat{p}^2 + e^\beta \alpha \frac{1}{|x|}$ è dato da $e^{2\beta} R^+$ per ogni $\beta \notin iR$.

Dalla (16.30) deduciamo che per $\phi \in \mathcal{D}$ gli elementi di matrice

$$(\phi, (H - z)^{-1} \phi), \quad \phi \in \mathcal{D} \quad 16.31$$

possono essere continuati all'asse reale positivo sia nel semipiano complesso $\Im z > 0$ sia nel semipiano $\Im z < 0$.

Le due continuazioni definiscono due funzioni, che denotiamo $F_{\phi, H}^+(z)$ e $F_{\phi, H}^-(z)$ che sono analitiche in un intorno conico del semiasse $\Im z = 0$, $\Re z > 0$.

Naturalmente le due funzioni così definite sono *diverse tra loro* (se così non fosse, la funzione $\langle \phi, (H - z)^{-1} \phi \rangle$ per $\Im z = 0$, $\Re z > 0$) sarebbe analitica nell'intorno).

Ne segue che è non nulla e analitica in un intorno conico di $\Im z = 0$, $\Re z < 0$ anche a loro differenza $F_{\phi, H}^+(z) - F_{\phi, H}^-(z)$.

In particolare per $\phi \in \mathcal{S}$ il limite

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \phi, \Im(H - x - i\epsilon)^{-1} \phi \rangle \quad 16.32$$

è per ogni $x > 0$ una funzione infinitamente differenziabile.

Questo dimostra che lo spettro della hamiltoniana dell'atomo di idrogeno nell'intervallo $(0, \infty)$ è assolutamente continuo (in particolare non esistono stati legati con energia positiva).

Ricordiamo che lo spettro dell'operatore H in $(0, \infty)$ è assolutamente continuo nell'intervallo $(a, b) \subset [0, \infty)$ se per ϕ in un insieme denso in $L^2(R^3)$ (in particolare l'insieme \mathcal{S}) esiste una costante positiva $C(\phi) > 0$ tale che

$$\liminf_{\epsilon \rightarrow 0} \sup_{\Delta \subset (a, b)} \langle \phi, E_{\Delta} \phi \rangle \leq C(\phi) \quad 16.33$$

dove E_{Δ} è proiezione spettrale di H ristretta all'intervallo Δ .

La costante $C(\phi)$ può dipendere dall'intervallo.

Per il teorema di Stone, si ha per ogni $\phi \in L^2(R^3)$

$$\frac{1}{2} \langle \phi, (E_{[a, b]} + E_{(a, b)}) \phi \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_a^b \langle \phi, \Im(H - \lambda + i\epsilon)^{-1} \phi \rangle d\lambda \quad 16.34$$

dove il limite viene inteso nel senso delle distribuzioni.

Poichè $E_{(a, b)} \leq E_{[a, b]}$ da (16.33) segue

$$\langle \phi, E_{(a, b)} \phi \rangle \leq \frac{1}{\pi} C(\phi) |b - a|$$

per un insieme denso di elementi ϕ .

Se questo avviene per ogni intervallo aperto in $[0, \infty)$ la misura spettrale $d\mu_{\phi}$ di $\langle \phi, H \phi \rangle$ in R^+ è assolutamente continua.

Poichè questa proprietà è vera per un insieme denso in $L^2(R^3)$ lo spettro positivo di H è assolutamente continuo.

16.1 ATOMI IDROGENOIDI

Studieremo ora il sistema composto da un nucleo di massa M e carica Ze , e da due elettroni di massa m e carica e . Considereremo solo il caso $m \ll M$.

Conviene utilizzare il parametro $\alpha \equiv Z^{-1}$; vedremo che lo spettro dipende da α , che per il momento consideriamo un parametro (reale positivo).

Notiamo che il problema in esame ricalca il problema dei tre corpi in Meccanica Celeste e che l'analisi della struttura della orbite per questo sistema classico presenta difficoltà insormontabili.

Il fatto che invece molto possa essere detto sulla struttura dello spettro dell'atomo di elio mette in luce una differenza qualitativa tra le trattazioni classica e quantistica.

Prima di iniziare lo studio dell'atomo di elio conviene fare una breve digressione sul principio di esclusione di Pauli e sulla statistica di Fermi-Dirac.

16.1.1 PARTICELLE IDENTICHE, STATISTICA DI FERMI-DIRAC

Ricordiamo che in Meccanica Quantistica particelle *dotate di spin* vengono descritte da funzioni $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \otimes C^n$ dove il fattore C^n rappresenta lo spazio di spin.

Per una rotazione \mathcal{R} del sistema di riferimento le funzioni si trasformano secondo

$$\psi_k(x) \rightarrow U_{k,m}(\mathcal{R})\psi_m(\mathcal{R}x)$$

dove U è una rappresentazione irriducibile del gruppo $SU(2)$ (che è il gruppo di ricoprimento di $O(3)$) in C^n .

Questo riferirsi al gruppo di ricoprimento è una conseguenza del fatto che uno stato puro del sistema è rappresentato *dal raggio associato al vettore* ψ .

Si dice che *la particella ha spin* s (s può essere intero o semi-intero) se la rappresentazione $U_{k,m}$ irriducibile ha dimensione $2s + 1$.

Notiamo che una particella di spin $s \in \mathbb{Z}$ (spin intero) è descritta da una rappresentazione irriducibile del gruppo delle rotazioni.

Una particella di spin semi-intero ($s \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$) è descritta invece da una rappresentazione irriducibile di $SU(2)$ che *non è una rappresentazione di* $O(3)$.

In Meccanica Quantistica si introduce la definizione di *particelle identiche* nel seguente modo.

Se un sistema quantistico è costituito da N particelle *identiche* ciascuna delle quali *se fosse isolata* sarebbe descritta da un elemento (normalizzato) $\phi \in L^2(\mathbb{R}^3) \otimes C^n$, il sistema complessivo sarà rappresentato da un elemento di un sottospazio di $(L^2(\mathbb{R}^3) \otimes C^n)^{\otimes N}$ che corrisponde ad una rappresentazione unitaria irriducibile di dimensione uno del gruppo delle permutazioni (delle coordinate spaziali e simultaneamente dei vettori rappresentativi in C^n).

Se indichiamo con Π_N il gruppo delle permutazioni di N elementi e con g un elemento del gruppo, le sole rappresentazioni *di dimensione uno* con queste caratteristiche sono $g \rightarrow U(g) \equiv I$ e $g \rightarrow U(g) \equiv (-1)^{p(g)}$ dove $p(g)$ è la *parità* della permutazione.

Nel primo caso si dice che il sistema di particelle identiche soddisfa la statistica di Bose-Einstein, nel secondo caso si dice che il sistema di particelle identiche soddisfa la statistica di Fermi-Dirac.

Secondo questa definizione, due particelle possono avere identiche caratteristiche fisiche *senza essere identiche*. La definizione di particelle identiche *non ha controparte* in Meccanica Classica.

E ha una rilevanza notevolissima in Meccanica Quantistica.

Ad esempio *non può esistere* una funzione d'onda che descriva due fermioni nello stesso stato.

Questo *principio di esclusione di Pauli* è alla base della dimostrazione fatta da Lieb della stabilità della materia (se le particelle fossero bosoni, al contrario, si avrebbe il fenomeno della condensazione di Bose-Einstein).

Notiamo che questo principio ha portato Pauli ad ipotizzare la presenza di un nuovo grado di libertà, lo *spin per avere la possibilità di spiegare la struttura iperfina degli spettri atomici*.

I dati sperimentali sono compatibili con il fatto che le particelle che possono essere descritte individualmente con elementi di $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes C^{2n+1}$ (particelle di spin intero) soddisfano la statistica di Bose-Einstein mentre le particelle che possono essere descritte individualmente con elementi di $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes C^{2n}$ (particelle di spin semi-intero) soddisfano la statistica di Fermi-Dirac

Questo ha portato a stabilire il principio di connessione tra spin e statistica che può essere formulato nel seguente modo :

Particelle di spin intero soddisfano la statistica di Bose-Einstein, particelle di spin semi-intero soddisfano la statistica di Fermi-Dirac.

Notiamo che questo principio ha portato Pauli ad ipotizzare la presenza di un nuovo grado di libertà, lo *spin*.

Nota 16.3

E' importante notare che in Meccanica Quantistica non-relativistica la formulazione di questo principio è dettata da considerazioni empiriche e *non è deducibile dai rimanenti assiomi*.

In Teoria Relativistica dei Campi Quantizzati tale relazione è invece una conseguenza delle seguenti due ipotesi: lo spettro dell'energia è contenuto in R^+ e commutano fra loro operatori associati a osservazioni che hanno luogo in regioni al di fuori dal cono luce una dell'altra (a distanze di Minkowski *di tipo spazio*).



Nota 16.4

Ne segue che nella descrizione quantistica in un sistema di N particelle *identiche* le singole particelle *perdono la loro individualità* (per cui, a stretto rigore, la dizione *sistema di N particelle identiche* è imprecisa).

In Meccanica Classica, al contrario, i punti materiali mantengono la propria individualità (ciascuno di loro viene individuato da una terna di coordinate) ma se hanno le stesse proprietà fisiche sono *indistinguibili per quanto riguarda la dinamica*.

Questo porta a una difficoltà concettuale, perchè in linea di principio si dovrebbe utilizzare una funzione d'onda simmetrica (o antisimmetrica) per permutazione *di tutte le particelle tra loro identiche*. Ad esempio si dovrebbe antisimmetrizzare rispetto alle coordinate di tutti gli elettroni dell'universo.

Viene in aiuto il fatto che le osservazioni riguardano regioni limitate dello spazio, nel senso che le osservabili di interesse sono rappresentate da operatori il cui nucleo integrale ha supporto limitato.

A *tutti gli effetti pratici* è sufficiente quindi considerare la funzione d'onda come dipendente dalle coordinate dei soli elettroni la cui interazione è considerata rilevante e richiedere che sia antisimmetrica rispetto a queste coordinate.



Dai dati sperimentali si deduce che gli elettroni hanno spin $1/2$ e soddisfano la statistica di Fermi-Dirac.

Uno stato puro di un sistema di N elettroni sarà rappresentato quindi da una funzione

$$\phi_{k_1, \dots, k_N}(x_1, \dots, x_N) \tag{16.33}$$

antisimmetrica per scambio di indici (sia l'indice associato alla variabile x che quello associato allo spin.)

Poichè l'indice k può assumere solo due valori (la rappresentazione di $SU(2)$ considerata ha dimensione due) se $N > 2$ la funzione in (16.33) non può essere simmetrica rispetto alla permutazione delle sole variabili spaziali.

Se $N = 2$ invece, la funzione $\phi_{k_1, k_2}(x_1, x_2)$ può essere simmetrica in x_1, x_2 , ma allora deve essere antisimmetrica in k_1, k_2 .

Riprendiamo ora l'analisi dell'atomo di elio.

Gli elettroni hanno spin $1/2$ e sono fermioni. Consideriamo solo il caso in cui la massa del nucleo è infinita.

La hamiltoniana è

$$H = \frac{1}{2m}(|\hat{p}_1|^2 + |\hat{p}_2|^2) - Z e^2 \left(\frac{1}{|x_1|} + \frac{1}{|x_2|} \right) + \frac{e^2}{|x_1 - x_2|} \tag{16.34}$$

Come operatore il termine potenziale è piccolo (anzi, infinitesimo nel senso di Kato) rispetto alla hamiltoniana libera.

Notiamo che la hamiltoniana è invariante per rotazioni e per permutazione degli indici 1 e 2 (commuta con i generatori del gruppo delle rotazioni e con l'operazioni di permutazione degli indici).

Poichè gli elettroni soddisfano la statistica di Fermi-Dirac, lo spazio di Hilbert in cui viene descritto il sistema è

$$\mathcal{H}^2 \equiv (\mathcal{H}^1 \otimes \mathcal{H}^1)_a, \quad \mathcal{H}^1 \equiv L^2(R^3) \otimes C^2$$

dove il pedice $_a$ indica che si prende solo la parte del prodotto che è antisimmetrica rispetto allo scambio dei due indici.

E' facile verificare che

$$\mathcal{H}^2 = [(L^2(R^3) \otimes L^2(R^3))_s \otimes (C^2 \otimes C^2)_a] \oplus [(L^2(R^3) \otimes L^2(R^3))_a \otimes (C^2 \otimes C^2)_s] \quad 16.35$$

dove il pedice $_s$ indica che si prende solo la parte simmetrica del prodotto.

Lo spazio $(C^2 \otimes C^2)_a$ è un spazio di dimensione (complessa) uno nel quale le rappresentazioni di spin 1/2 inducono una rappresentazione banale di $SU(2)$ (tutti gli operatori unitari associati al gruppo vengono rappresentati dalla matrici I). Lo spazio di Hilbert $(C^2 \otimes C^2)_s$ ha dimensione (complessa) tre e su di esso è indotta una rappresentazione *vettoriale* di $SU(2)$ (in effetti si tratta di una rappresentazione anche di $O(3)$).

Da (16.34) si vede che, per operatori che agiscono banalmente su $C^2 \otimes C^2$ (come è il caso della hamiltoniana che stiamo analizzando) si possono trascurare i gradi di libertà associati allo spin e studiare direttamente il problema su

$$(L^2(R^3) \otimes L^2(R^3))_s \oplus (L^2(R^3) \otimes L^2(R^3))_a \equiv L^2(R^3) \otimes L^2(R^3)$$

Studieremo quindi la hamiltoniana (18.34) come operatore autoaggiunto in $L^2(R^3) \otimes L^2(R^3)$.

Conviene utilizzare coordinate che mettano in luce il ruolo giocato da Z . Introduciamo per questo la trasformazione unitaria di dilatazione

$$U\hat{p}U^* = Z m e^2 \hat{p}, \quad UxU^* = (Z m e^2)^{-1}x$$

e ridefiniamo la hamiltoniana mediante un riscaldamento

$$Z^{-2}e^4m^2H \equiv H(\alpha) = \frac{1}{2}(|\hat{p}_1|^2 + |\hat{p}_2|^2) - \frac{1}{|x_1|} - \frac{1}{|x_2|} + \frac{\alpha}{|x_1 - x_2|}, \quad \alpha = Z^{-1} \quad 16.36$$

Notiamo che il riscaldamento non cambia la struttura spettrale di H ma se λ è un autovalore di $H(\alpha)$ l'autovalore corrispondente di H è $\frac{Z^2\lambda}{e^4m^2}$.

E' naturale scrivere $H(\alpha)$ come

$$H(\alpha) = H(0) + \alpha H', \quad H(0) = \frac{1}{2}(|\hat{p}_1|^2 + |\hat{p}_2|^2) - \frac{1}{|x_1|} - \frac{1}{|x_2|} \quad H' = \frac{1}{|x_1 - x_2|} \quad 16.37$$

Dalla definizione data di α segue che i valori *fisici* possibili per questo parametro sono $\alpha = 1, 1/2, 1/3, \dots$

Ad esempio $\alpha = 1/2$ corrisponde all'atomo di elio, $\alpha = 1/3$ corrisponde ad un atomo di litio ionizzato, Per la trattazione matematica tuttavia conviene riguardare α come parametro reale positivo.

Notiamo che $H(0)$ descrive un sistema composto da due atomi di idrogeno non interagenti tra loro.

Nella parte di questo capitolo dedicata allo studio dell'atomo di idrogeno abbiamo visto che lo spettro dell'operatore

$$H_1(0) \equiv \frac{1}{2}|\hat{p}|^2 - \frac{1}{|x|} \tag{16.38}$$

è composto da una parte assolutamente continua che coincide con l'asse reale positivo, e da un numero infinito di punti

$$-\frac{1}{2} \equiv \epsilon_0 < \epsilon_1 \leq \epsilon_2 \leq \epsilon_3 \dots < 0 \qquad \lim_{n \rightarrow \infty} \epsilon_n = 0$$

Ne segue che lo spettro di $H(0)$ ha una parte assolutamente continua, che coincide con $[-\frac{1}{2}, \infty)$ e da una parte puntuale data da $\{\epsilon_{i,j} = \epsilon_i + \epsilon_j\}$. Notare che per alcuni (in effetti un numero infinito) di valori degli indici i e j si ha $\epsilon_i + \epsilon_j \geq \frac{1}{2}$. Quindi *ci possono essere elementi dello spettro puntuale di $H(0)$ che sono immersi nella parte continua dello spettro*.

Denotiamo con ϕ_0 l'autofunzione corrispondente all'autovalore $-\frac{1}{2}$. Ne abbiamo data la forma esplicita in (16.27) (prendendo $n = 1$).

L'estremo inferiore della spettro è l'autovalore semplice -1 che corrisponde a una funzione d'onda

$$\Phi_0(x_1, x_2, i_1, i_2) = \phi_0(x_1)\phi_0(x_2)\xi_{i_1, i_2}$$

dove ξ è una matrice 2×2 antisimmetrica.

Notiamo che la parte di Φ_0 che dipende dalle coordinate spaziali è una funzione simmetrica, e quindi l'intera funzione è antisimmetria per permutazione degli indici 1 e 2.

Se l'elettrone non avesse spin (e quindi la sua funzione d'onda fosse uno scalare) l'energia più bassa sarebbe $-\frac{3}{4}$ e il corrispondente sottospazio avrebbe dimensione 3.

Dimostriamo ora il seguente Teorema

Teorema 16.3

Lo spettro essenziale di $H(\alpha)$ coincide per ogni valore del parametro α con lo spettro essenziale di $H(0)$.

◇

Dimostrazione

Poichè $H(\alpha)$ per $\alpha \neq 0$ non è una perturbazione relativamente compatta di $H(0)$ non possiamo utilizzare il teorema di Weyl.

Per dimostrare il Teorema sarà però sufficiente dimostrare che, per ogni $E \in [-\frac{1}{2}, \infty)$ è possibile trovare una successione ortonormale di vettori ϕ_n tale che $(H - E)\phi_n \rightarrow 0$ in $L^2(R^3)$ quando $n \rightarrow \infty$.

Questi vettori verranno costruiti come prodotto (antisimmetrizzato) dello stato fondamentale ψ_0 di $H_1(0)$ per vettori ξ_n che in trasformata di Fourier si concentrano sempre più in un intorno del punto $|p|^2 = E + \frac{1}{2}$; questa procedura produce vettori che hanno energia (rispetto ad $H(0)$) sempre più concentrata intorno ad E .

Si può a questo scopo scegliere una successione di funzioni normalizzate η_n tali che $(|p|^2 - 2E - 1)\hat{\eta}_n \rightarrow 0$ in L^2 e che abbiano supporto contenuto in $(2^n, 2^{n+1})$ (così da essere due a due ortogonali).

Notare che la condizione sul supporto nello spazio degli impulsi è compatibile con il concentrarsi del supporto nello spazio delle configurazioni perchè il vettore \hat{p} è invariante per traslazione e il diametro della corona sferica nello spazio della configurazioni cresce senza limite quando $n \rightarrow \infty$.

La condizione sul supporto gioca un ruolo importante perchè, essendo $\phi_0(x_1)$ un vettore in $L^2(R^3)$, dalla disuguaglianza di Schwartz si deduce che, in $L^2(R^3 \otimes R^3, dx)$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int \frac{1}{\|x_1 - x_2\|} [\phi_0(x_1)\eta_n(x_2) - \eta_n(x_1)\phi_0(x_2)]^2 dx_1 dx_2 = 0,$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int \frac{1}{\|x_1\|} [\phi_0(x_1)\eta_n(x_2) - \eta_n(x_1)\phi_0(x_2)]^2 dx_1 dx_2 = 0,$$

Tenuto conto di

$$H_1(0)\phi_0 = -\frac{1}{2}\phi_0, \quad (|p|^2 - 2E - 1)\hat{\eta}_n \rightarrow 0$$

si deduce

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(H(\alpha) - E)\phi_0 \eta_n\| = 0 \tag{16.39}$$

♡

Notiamo che lo spettro continuo di $H(\alpha)$ contiene certamente l'intervallo $[-1/2, \infty)$ come si vede considerando il caso in cui un elettrone si trovi nello stato fondamentale e l'altro sia molto lontano e abbia energia positiva arbitrariamente piccola.

E'anche chiaro che per $\alpha = 0$ il sistema ammette un'infinità di stati legati nell'intervallo $[-1, 0]$ in corrispondenza a tutte le possibili energie $-\frac{1}{2m} - \frac{1}{2n}$, $m, n \in \mathbb{Z}^+$.

Dimostreremo che, anche quando α è positivo ma sufficientemente piccolo, vi è una parte puntuale dello spettro in $[-\frac{1}{2}, 0]$.

Iniziamo con la dimostrazione del seguente Teorema

Teorema 16.4

Se $\alpha < 1$ vi sono infiniti autovalori di molteplicità finita nell'intervallo $[-1, -1/2)$

◇

Nota 16.5

La condizione $\alpha < 1$ è equivalente a $N > 1$ (nel caso di interesse fisico $N = 2, 3, \dots$).

Nel caso dell'atomo di elio si ha $\alpha = 2$ e le energie degli infiniti stati legati della hamiltoniana H sono comprese nell'intervallo $[-\frac{4}{e^4 m^2}, -\frac{2}{e^4 m^2}]$.

E' interessante notare che dal punto di vista fisico la condizione $Z > 1$ può essere interpretata dicendo che gli stati legati così ottenuti corrispondono a configurazioni in cui uno degli elettroni forma uno stato legato con il nucleo, e la sua distribuzione di carica *scherma parzialmente* il nucleo. Il sistema così composto ha carica $Z - 1 > 0$ e questa carica residua è sufficiente a legare l'altro elettrone.

♣

Dimostrazione del teorema 16.4

La dimostrazione seguirà la traccia delle considerazioni qualitative fatte nella nota precedente.

Poichè sappiamo che lo spettro continuo di $H(\alpha)$ coincide con $[-1/2, \infty)$ sarà sufficiente dimostrare che è possibile trovare un sottospazio \mathcal{K} di dimensione infinita tale che per ogni $\phi \in \mathcal{K}$ di norma uno si abbia

$$(\phi, H\phi) < -\frac{1}{2}\|\phi\|^2 \tag{16.40}$$

Utilizzeremo come *funzioni di prova* f il prodotto *antisimmetrizzato* della stato fondamentale dell'atomo di idrogeno con una funzione $\eta(x)$ che soddisfa $\int |\hat{\eta}(p)| p^2 dp \leq \epsilon$ dove ϵ è un parametro che sceglieremo sufficientemente piccolo. Utilizzando l'invarianza per traslazione di della condizione utilizzata potremo ancora scegliere η in modo tale che

$$\left| \int \bar{\phi}_0(x_1)\bar{\eta}(x_2) \frac{1}{|x_1 - x_2|} \phi_0(x_2)\eta(x_1) dx_1 dx_2 \right| < \epsilon$$

Come abbiamo visto precedentemente, nel caso di due particelle di spin $1/2$ possiamo prendere il prodotto di una funzione ψ simmetrica delle variabili posizione con la componente totalmente antisimmetrica di spin (stato a momento angolare interno zero).

Poniamo allora

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_0(x_1)\eta(x_2) + \phi_0(x_2)\eta(x_1)]$$

(dove ϕ_0) è la funzione d'onda dello stato fondamentale dell'atomo di idrogeno) e notiamo che la hamiltoniana non dipende dalle variabili di spin. Abbiamo

$$\begin{aligned} \langle \psi, H(\alpha)\psi \rangle &= -\frac{1}{2}\|\psi\|^2 + \int \bar{\eta}(x) \left(\frac{\widehat{p}^2}{2} - \frac{1}{|x|} \right) \eta(x) d^3x \\ &+ \alpha \int \bar{\phi}_0(x_1) \bar{\eta}(x_2) \frac{1}{|x_1 - x_2|} \phi_0(x_1) \eta(x_2) d^3x_1 d^3x_2 + 2\epsilon \end{aligned} \quad 16.41$$

Per il calcolo dell'ultimo termine in (16.41) utilizziamo la forma esplicita di ϕ_0 e otteniamo

$$\int |\phi_0|^2 \frac{1}{|x - y|} d^3x = \frac{1}{|y|} - e^{-2y} \left(1 + \frac{1}{|y|} \right)$$

e dunque

$$\begin{aligned} \langle \psi, H(\alpha)\psi \rangle &= -1/2\|\psi\|^2 + \int \bar{\eta}(x) \frac{\widehat{p}^2}{2} \eta(x) d^3x \\ &- (1 - \alpha) \int |\eta|^2(y) \frac{1}{|y|} d^3y - \alpha \int |\eta|^2(y) e^{-2y} \left(1 + \frac{1}{|y|} \right) d^3y + 2\epsilon \end{aligned}$$

Ne deduciamo che pur di scegliere ϵ abbastanza piccolo, $\langle \psi, H(\alpha)\psi \rangle < -\frac{1}{2}$. Possiamo ripetere questa stima scegliendo funzioni η_m aventi supporto disgiunto e che tutte soddisfano le condizioni che abbiamo imposto alla funzione η che abbiamo utilizzato.

Questo conclude la dimostrazione del Teorema 16.4

♡

Studiamo ora la possibile esistenza di spettro discreto nell'intervallo $[-1/2, +\infty)$. Iniziamo dimostrando

Teorema 16.5

L'operatore $H(\alpha)$ non ha spettro discreto nell'intervallo $[0, +\infty)$.

◇

Dimostrazione

Come nel caso dell'atomo di idrogeno (e di tutti gli atomi idrogenoidi) utilizzando le dilatazioni e procedendo come si è fatto nei teremi precedenti si dimostra che se $\phi \in L^2(\mathbb{R}^6)$ soddisfa $H(\alpha)\phi = E\phi$ allora si ha (teorema del viriale)

$$2\langle \phi, T\phi \rangle = \int |\phi(x_1, x_2)|^2 \left(\frac{1}{|x_1|} + \frac{1}{|x_2|} - \frac{1}{|x_1 - x_2|} \right) dx_1 dx_2 \quad 16.42$$

da cui si deduce

$$E = -\langle \phi, T\phi \rangle < 0$$

♡

Affrontiamo infine il problema dell'esistenza di uno spettro discreto nell'intervallo $[-1/2, 0]$.

Poichè lo spettro continuo copre tutte quest'intervallo, la presenza di uno spettro discreto può essere dovuta unicamente a *regole di superselezione* che impediscono di esprimere lo stato legato come integrale di autovettori generalizzati appartenenti allo spettro continuo.

Nell'atomo di elio questa regola di superselezione è dovuta all'azione congiunta dell'invarianza per rotazione, della statistica di Fermi e del fatto che la hamiltoniana *non dipende dalle variabili di spin*.

L'invarianza per rotazione fra sì che sia conservato il momento della quantità di moto rispetto all'origine; ricordiamo che nell'approssimazione che stiamo utilizzando, la massa del nucleo è infinita, e quindi il baricentro coincide con la posizione del nucleo (puntiforme) che abbiamo assunto essere l'origine.

Definiamo un operatore di *simmetria spaziale* P mediante

$$(P \phi_{h,k})(x_1, x_2) = \phi_{h,k}(x_2, x_1) \quad 16.43$$

L'operatore P agisce come identità nel sottospazio che descrive lo spin, e commuta quindi con quella parte del generatore delle rotazioni che proviene dall'esistenza dello spin.

Commuta anche con la hamiltoniana e con la parte del generatore del gruppo delle rotazioni che descrive le rotazioni nello spazio tridimensionale.

Dunque lo spettro di $H(\alpha)$ può essere analizzato separatamente nei sottospazi individuati dall'autovalore $l(l+1)$ di L^2 e dall'autovalore $p = \pm 1$ di P (questi sottospazi sono invarianti per il flusso di $H(\alpha)$).

Conviene introdurre la seguente notazione: il sottospazio di \mathcal{H} in cui vale la relazione $p = (-1)^l$ è detto *sottospazio di parità naturale*, quello in cui vale la relazione $p = -(-1)^l$ è detto *sottospazio di parità non naturale*.

Al sottospazio di parità non naturale appartengono gli stati che sono antisimmetrici nelle variabili spaziali pur avendo momento angolare pari, e quelli che sono simmetrici pur avendo momento angolare dispari.

Segue dalla definizione che la parità di uno stato di singolo elettrone è $(-1)^l$ dove l è il valore assoluto del momento angolare.

La parità di uno stato prodotto di due elettroni è allora $(-1)^{l_1+l_2}$.

Gli autovalori di $H(0)$ corrispondenti alla scelta $n_1 = 0$ ed $n_2 \geq 0$ (e quindi $l_1 = 0$ oppure $l_2 = 0$) sono stati a parità naturale.

L'energia più bassa che corrisponde ad uno stato a parità non naturale si ottiene ponendo $l_1 = 1, l_2 = 1$ (e quindi $n_1 = 2, n_2 = 2$).

La corrispondente funzione d'onda, tenuto conto della statistica di Fermi, è della forma (i pedici i, j individuano la forma nello spazio di spin)

$$\psi_{i,j}(x_1, x_2) = (x_i \wedge x_2) f(|x_1|, |x_2|) \delta_{i,j} \quad 16.44$$

dove la funzione f è simmetrica nei due argomenti.

Lo stato descritto da (16.44) ha energia $-\frac{1}{4}$ e ogni stato a parità non-naturale ha energia maggiore.

La partizione in stati a simmetria naturale e a simmetria non naturale riduce $H(0)$.

Lo stato descritto da (16.44) è isolato dallo spettro continuo della restrizione di $H(0)$ al sottospazio di stati a simmetria non-naturale, e quindi si tratta di un autovettore di $H(0)$.

Notare che lo spettro continuo della restrizione di $H(0)$ al sottospazio a simmetria naturale copre $(-\frac{1}{4}, \infty)$.

Anche per $H(\alpha)$ vale la riduzione rispetto alla parità dei sottospazi.

Poichè la perturbazione $\frac{1}{|x_1-x_2|}$ è piccola rispetto ad $H(0)$, e gli autovalori variano in modo continuo rispetto al parametro α (fintanto che rimangono isolati).

Quindi vi è, per piccoli valori di α , un autostato di $H(\alpha)$ che ha parità non-naturale e il cui autovalore è immerso nello spettro continuo di $H(\alpha)$.

Un calcolo esplicito dimostra che questo avviene per $\alpha < \frac{1}{2}$. Pertanto questo stato esiste per $\alpha = \frac{1}{n}$, $n = 3, 4, ..$ (atomo di Litio ionizzato, atomo di Berillio ionizzato, ..) ma non per l'atomo di Elio ionizzato (che corrisponde a $n = 2$).

Abbiamo dimostrato la seguente proposizione

Proposizione

Se $\alpha < 1/2$ l'operatore H_α ha spettro discreto nell'intervallo $[-1/2, 1]$ immerso nel continuo.

Nota 16.6

La regola di superselezione che è data dalla riduzione di $H(0)$ ai sottospazi naturale e non-naturale è valida solo nell'approssimazione in cui si trascura il moto del nucleo (abbiamo posto $\frac{1}{M} = 0$ dove M è la massa del nucleo) e inoltre si trascura l'interazione con il campo elettromagnetico.

Se si considerano queste correzioni, anzichè uno stato legato si ha una risonanza.

Grosso modo quello che risulta è che quando si tiene conto di queste correzioni, la funzione $(e^{itH(\alpha)}\psi)(x)$ rimane essenzialmente localizzata in un insieme limitato per $0 < t < \tau$ con τ molto grande, ma per ogni $R > 0$ si ha

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{|x_1|^2 + |x_2|^2 \leq R^2} |(e^{itH(\alpha)}\psi)(x)|^2 dx = 0 \tag{16.45}$$

Più precisamente si può dimostrare che il comportamento asintotico di $(e^{itH(\alpha)}\psi)(x)$ si riduce a quello di un elettrone libero e un atomo idrogenoide nello stato fondamentale.

Questo fenomeno è noto come effetto Auger.

16.2 STIME DEL NUMERO DI AUTOVALORI DELL'OPERATORE DI
SCHRÖDINGER

Il problema che tratteremo ora è determinare il numero di autovalori nello spettro discreto dell'operatore $-\Delta + V$ in $L^2(\mathbb{R}^d)$ sotto opportune ipotesi su $V(x)$.

Faremo sempre l'ipotesi che il potenziale si annulli all'infinito abbastanza rapidamente, così che lo spettro continuo sia $[0, +\infty)$.

Il nostro scopo sarà stimare il numero di autovalori che soddisfano $\epsilon_n \leq E_0$ in termini di semplici funzioni di V , ad esempio la sua norma in L^p per qualche valore di p .

Daremo anche condizioni sufficienti affinché esistano autovalori strettamente negativi e anche stime del numero $N_-(V)$ di autovalori negativi dell'operatore $-\Delta + \lambda V(x)$, $x \in \mathbb{R}^3$ quando λ è molto grande.

Ponendo $\lambda = \hbar^{-2}$ si vede che queste ultime stime sono in qualche modo connesse con il limite semiclassico.

Iniziamo con alcuni semplici teoremi di confronto.

Proposizione 16.7

Sia $A \geq 0$, autoggiunto, e sia B autoaggiunto.

Detto $Q(A)$ il dominio della forma quadratica $q(A)$ associata ad A , assumiamo che $Q(A) \cap Q(B)$ sia denso nello spazio di Hilbert \mathcal{H} e che la parte negativa di B sia infinitesima rispetto ad A nel senso delle forme quadratiche.

Supponiamo inoltre che per ogni $\beta \geq 0$ sia

$$\sigma_{ess}(A + \beta B) = [0, +\infty) \tag{16.46}$$

Allora ciascun autovalore negativo $\mu_n(\beta)$ di $A + \beta B$ è una funzione monotona di β , non crescente.

◇

Dimostrazione

Dal principio di mini-max

$$\begin{aligned} \mu_n(A + \beta_0 B) = \\ \max_{\phi_1, \dots, \phi_{n-1}} \min_{\psi \in Q(A) \cap Q(B), |\psi|=1, (\phi_i, \psi)=0} \min\{0, (\psi, (A + \beta_0 B)\psi)\} \end{aligned} \tag{16.47}$$

Poichè $A \geq 0$ da $(\psi, (A + \beta B)\psi) < 0$ e $\beta \geq 0$ si deduce $(\psi, B\psi) < 0$. Quindi

$$\beta_1 < \beta_2 \rightarrow (\psi, (A + \beta_1 B)\psi) \geq (\psi, (A + \beta_2 B)\psi) \tag{16.48}$$

L'asserto della Proposizione 16.7 segue da (16.47) e (16.48).

♡

Esempio

Sia $V \in L^2 + (L^\infty)_\epsilon$. Ricordiamo che con questa notazione si intende

$$V = V_1 + V_2, \quad V_1 \in L^2, \quad V_2 \in L^\infty, \quad |V_2|_\infty < \epsilon$$

Allora $\sigma_{ess}(-\Delta + V) = [0, +\infty)$. Dunque, se V ha una parte negativa, gli autovalori negativi, quando esistono, sono funzioni *non crescenti* di β .



Un'altra disuguaglianza che trova frequente applicazione è data dal seguente Teorema, di cui non diamo la semplice dimostrazione basata sul principio del mini-max e sul fatto che il sottospazio generato dai primi n autovettori di H ha dimensione n .

Teorema 16.8 (Raileigh-Ritz)

Sia H limitato inferiormente e autoaggiunto su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} . Indichiamo con μ_n i suoi autovalori, ordinati in ordine crescente.

Sia M_n un sottospazio di \mathcal{H} di dimensione n contenuto nel dominio di H .

Sia P la proiezione ortogonale su M_n . Definiamo PHP nel senso delle forme quadratiche, e indichiamo con $\hat{\mu}_n$ i suoi autovalori, ordinati in ordine decrescente.

Allora per $m = 1, \dots, n$ si ha $\hat{\mu}_m \geq \mu_m$.



Quando si consideri una successione crescente di sottospazi che invadono \mathcal{H} si ha *convergenza almeno dell'autovalore più basso*.

Questo è il contenuto del teorema seguente

Teorema 16.8

Sia $H \geq 0$ e sia $\{\eta_i\}$ una base ortonormale completa di \mathcal{H} i cui elementi appartengono al dominio di H . Sia E_0 l'estremo inferiore della spettro di H , e supponiamo che si abbia

$$\inf_{\psi \in \mathcal{H}} \lim_{N \rightarrow \infty} (P_N \psi, H P_N \psi) = E_0$$

dove P_N è la proiezione ortogonale sul sottospazio sotteso da η_1, \dots, η_N . Allora

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \hat{\mu}_0^N = E_0 \tag{16.49}$$

dove abbiamo indicato con $\hat{\mu}_0^N$ l'autovalore più basso (nell'ordine naturale dell'asse reale) di $P_N H P_N$.



Dimostrazione

La successione $\hat{\mu}_0^N$ è crescente, e limitata dall'alto da 0. Indichiamo con $\hat{\mu}_0$ il suo limite.

Per il Teorema 16.8 deve essere $\widehat{\mu}_0 \geq \mu_0$. D'altra parte, se fosse $\widehat{\mu}_0 > \mu_0$ si otterrebbe una contraddizione utilizzando una successione ψ_k minimizzante per $(\psi, H\psi)$ e scegliendo la successione $P_k\psi_k$.

Dunque $\widehat{\mu}_0 = \mu_0$.

♡

Conviene notare che le stime dell'autovalore più basso ottenute in questo modo (cioè applicando direttamente il principio del min-max) sono sempre stime per eccesso (stime dall'alto).

Un'utile stima per difetto (stima dal basso) è contenuta nel teorema seguente

Teorema 16.10 (Temple)

Sia $H \geq cI$, sia μ_0 l'autovalore più basso isolato e semplice.

Supponiamo che $\psi \in D(H)$, $|\psi| = 1$ soddisfi $(\psi, H\psi) < \mu_1$ dove μ_1 è il secondo autovalore.

Allora

$$\mu_0 \geq (\psi, H\psi) - \frac{(\psi, H^2\psi) - (\psi, H\psi)^2}{\mu_1 - (\psi, H\psi)} \quad 16.50$$

◇

Dimostrazione

Notiamo che per ipotesi

$$(H - \mu_0 I)(H - \mu_1 I) \geq 0 \quad 16.51$$

Infatti (16.51) vale sull'autovettore all'autovalore μ_0 e vale anche su qualunque vettore nella proiezione spettrale di H su $[\mu_1, +\infty)$. Dunque vale su tutto \mathcal{H} .

Prendendo il valore d'aspettazione di (16.49) in un vettore ψ generico

$$\mu_0\mu_1 - \mu_0(\psi, H\psi) \geq \mu_1(\psi, H\psi) - (\psi, H^2\psi) \quad 16.52$$

Se il vettore ψ soddisfa le condizioni del teorema, aggiungendo e sottraendo $(\psi, H\psi)^2$ a destra, e dividendo per $\mu_1 - (\psi, H\psi)$ si ottiene (16.50)

♡

Notiamo che come applicazione del teorema di Temple si può scegliere per $\widehat{\mu}_1$ il secondo autovalore di un operatore K che sia più piccolo di H e poi scegliere per ψ l'autovettore di H relativo al primo autovalore di K .

Esempio

Diamo un semplice esempio di questo procedimento.

Sia

$$H = A + \frac{1}{|x_1 - x_2|}, \quad A = -\Delta_1 - \Delta_2 - \frac{2}{|x_1|} - \frac{2}{|x_2|}$$

Si ha

$$H \geq A, \quad \mu_1(H) \geq \mu_1(A) = -\frac{5}{4}$$



Un altro Teorema utile per stimare il numero di stati legati per un operatore di Schrödinger è il seguente.

Teorema 16.11

Sia $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, $\sigma_{ess}(-\Delta + V) = [0, +\infty)$.

Se esistono costanti positive R_0, a, ϵ tali che $V(x) < -\frac{a}{|x|^{2-\epsilon}}$, $a, \epsilon > 0$ quando $|x| > R_0$, allora $-\Delta + V$ ha un numero infinito di autovalori negativi.



Dimostrazione

Dobbiamo dimostrare che $\mu_n < 0 \forall n \in \mathbb{N}$.

Sia $\psi \in C^\infty$ e supponiamo che il supporto di ψ sia contenuto nell'insieme $1 < |x| < 2$.

Definiamo

$$\psi_R(x) \equiv R^{\frac{3}{2}}\psi(R^{-1}x)$$

Se $|x| > R_0$

$$\begin{aligned} (\psi_R, H\psi_R) &\leq (\psi_R, -\Delta\psi_R) - a(\psi_R, |x|^{-2+\epsilon}\psi_R) = \\ &= R^{-2}(\psi, -\Delta\psi) - aR^{-2+\epsilon}(\psi, |x|^{-2+\epsilon}\psi) \end{aligned}$$

Poichè $\epsilon > 0$ esiste R_1 tale che il termine a destra è negativo per $|x| > R_1$.

D'altra parte per costruzione i vettori $\phi_n \equiv \psi_{2^n R}$ sono tra loro ortogonali per valori dell'indice diversi tra loro, e si ha

$$n \neq m \rightarrow (\phi_n, H\phi_m) = 0 \tag{16.53}$$

Ma

$$\mu_n(H) \leq \sup_{1 \leq m \leq n} (\phi_m, H\phi_m) < 0$$



Se la parte negativa del potenziale decade più rapidamente all'infinito il numero di autovalori può essere finito.

Teorema 16.12

Sia $V \in R + L^\infty_\epsilon$ e per $|x| > R_0$ sia $V(x) \geq -\frac{1}{4}b|x|^{-2}$, $b < 1$.

Allora $-\Delta + V$ ha solo un numero finito di autovalori negativi.



Dimostrazione

Poniamo $W \equiv V + \frac{1}{4}b|x|^{-2}$.

Notando che $(\phi, \Delta\phi) > \frac{1}{4}(\phi, |x|^{-2}\phi)$ si vede che

$$(\phi, (-\Delta + V)\phi) \geq -(1-b)(\phi, \Delta\phi) + (\phi, \widetilde{W}\phi), \quad \widetilde{W}(x) = \inf\{0, W(x)\}$$

Dunque

$$\mu_n(-\Delta + V) \geq (1 - b)\mu_n(-\Delta + \frac{\widetilde{W}}{1 - b}) \quad 16.54$$

Se $V \in \mathcal{R} + (L^\infty)_\epsilon$ allora $W \in \mathcal{R}$ (classe Rollnik).

Basterà dunque dimostrare che se $V \in \mathcal{R}$ l'operatore $-\Delta + V$ ha un numero finito di autovalori isolati distinti, e la loro molteplicità è finita.

La conclusione del teorema (16.12) segue allora dall' importante Teorema di Birman-Schwinger che ora enunciamo e dimostriamo.

♡

Teorema 16.13 (Birman-Schwinger, forma debole)

Per $d = 3$ sia $V \in \mathcal{R}$. Allora $N_-(V)$ (numero di autovalori isolati negativi contati con la loro molteplicità) soddisfa la limitazione

$$N_-(V) \leq \frac{1}{(4\pi)^2} \int \frac{|V(x)||V(y)|}{|x - y|^2} d^3x d^3y < \infty \quad 16.55$$

◇

Nota 16.7

Per dimostrare questo Teorema sarà sufficiente dimostrarlo per $V \leq 0$ e assumere $V \in C_0^\infty$; il caso in cui V è più singolare ma appartiene a \mathcal{R} segue mediante un processo di limite.

♣

Dimostrazione del teorema 16.13

Sia $N_E(V)$ la dimensione del codominio di $P_{(-\infty, E)}$ (il proiettore spettrale sull'intervallo indicato).

Poniamo $\mu_n(\lambda) \equiv \mu_n(-\Delta + \lambda V)$ (quindi $N_E(V)$ è il numero di autovalori di indici n per i quali si abbia $\mu_n(1) < E$).

L'operatore V è infinitesimo rispetto a $-\Delta$, la successione μ_n è monotona e continua in λ e $\mu_n(0) = 0$.

Si ha che $\mu_n(1) < E$ se e solo se esiste $\lambda \in (0, 1)$ tale che $\mu_n(\lambda) = E$.

Dunque

$$N_E(V) \leq \sum_{\lambda: \mu_k(\lambda)=E, k=1, \dots, N_E(V)} \lambda^{-2} \leq \sum_{\lambda: \mu_k(\lambda)=E} \lambda^{-2} \quad 16.56$$

D'altra parte, posto $H_0 = -\Delta$

$$(H_0 + \lambda V - E)\psi = 0 \Rightarrow \lambda \sqrt{|V|}(H_0 - E)^{-1} \sqrt{|V|} \sqrt{|V|} \psi = \sqrt{|V|} \psi$$

il che implica

$$\lambda \int \frac{\sqrt{|V(x)} e^{-\sqrt{-E}|x-y|} \sqrt{|V(y)|}}{4\pi|x-y|} \phi(y) dy = \phi(x), \quad \phi \equiv \sqrt{|V|} \psi \quad 16.57$$

Poichè $V \in \mathcal{R}$, il nucleo integrale K dell'operatore che compare a primo membro è di Hilbert-Schmidt e dunque detti λ_k^{-1} i suoi autovalori si ha

$$\sum_k \lambda_k^{-2} = \text{Tr } K^* K = \frac{1}{(4\pi)^2} \int e^{-2\sqrt{-E}|x-y|} \frac{\sqrt{|V(x)|}\sqrt{|V(y)|}}{|x-y|^2} dx dy \quad 16.58$$

Tenuto conto del fatto che $N_-(V) = \lim_{E \rightarrow 0} N_E(V)$ la dimostrazione del Teorema di Birman-Schwinger è completa; questo completa anche la dimostrazione del Teorema 16.13.

♡

Nota 16.8

Dal Teorema di Birman-Schwinger discende in particolare che *in dimensione maggiore o eguale a tre* se $\|V\|_{\mathcal{R}} < 1$ l'operatore $-\Delta + V$ non ha autovalori negativi.

♣

Conviene notare esplicitamente che questo risultato vale solo in dimensione maggiore o uguale a tre. In dimensione uno o due si ha invece

Teorema 16.14

Sia

$$V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d), \quad V(x) \leq 0, \quad V(x) \neq 0, \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad d = 1, 2$$

Allora $-\Delta + \beta V$ ha almeno un autovalore negativo per ogni $\beta > 0$.

◇

Dimostrazione

Dalla dimostrazione del Teorema di Birman-Schwinger si vede che basta dimostrare che per ogni $\beta > 0$ esiste un k tale che $\sqrt{-V}(-\Delta + k^2)^{-1}\sqrt{-V}$ ha un autovalore maggiore di β^{-1} .

D'altra parte, in dimensione uno e due quest'operatore è un operatore di Hilbert-Schmidt e quindi l'autovalore più grande coincide in valore assoluto con la norma di Hilbert-Schmidt.

Basta allora dimostrare

$$\lim_{k^2 \rightarrow 0} \|\sqrt{-V}(-\Delta + k^2)^{-1}\sqrt{-V}\|_{H-S} = \infty \quad 16.59$$

e per questo è sufficiente dimostrare che esiste $\eta \in L^2$ tale che

$$\lim_{k^2 \rightarrow 0} (\eta, \sqrt{-V}(-\Delta + k^2)^{-1}\sqrt{-V}\eta) = \infty \quad 16.60$$

Supponiamo che $V < 0$ e scegliamo η tale che $\int \sqrt{-V(x)}\eta(x)dx > 0$.

Passando alle trasformate di Fourier il termine a sinistra in (16.60) è

$$\int |\widehat{\phi}(p)|^2 \frac{1}{p^2 + k^2} dp, \quad \phi(x) \equiv \eta \sqrt{-V}$$

Per costruzione $|\widehat{\phi}(0)| > 0$. Dunque

$$\lim_{k^2 \rightarrow 0} \int |\widehat{\phi}(p)|^2 \frac{1}{p^2 + k^2} dp = +\infty$$

♡

Il Teorema 16.14 ha una generalizzazione nella seguente Proposizione

Proposizione 16.15

Se $V \in L^d(\mathbb{R}^d) + (L^\infty(\mathbb{R}^d))_\epsilon$, $d = 1, 2$ allora l'operatore $H = \Delta + V$ ha almeno un autovalore negativo se è soddisfatta *almeno una* delle seguenti disuguaglianze

i)

$$V \leq 0, \quad V \neq 0$$

ii)

$$\int |V(x)| dx < +\infty, \quad \int V(x) dx < 0$$

iii)

$$\int V_+(x) dx < \infty, \quad \int V_-(x) dx = +\infty$$

◇

Dimostrazione

Aggiungendo a $V(x)$ un'opportuna costante ci si può ricondurre al caso ii), che è quindi il solo caso che discuteremo.

Dalle ipotesi fatte segue che lo spettro essenziale è $[0, +\infty)$. Dunque basta dimostrare che esiste $\psi \in L^2$ tale che risulti $(\psi, H\psi) < 0$.

Trattiamo separatamente i casi $d = 1$ e $d = 2$.

$d = 1$

$$\text{Poniamo } \psi_a = e^{-a|x|}, \quad a > 0$$

Allora

$$\int |\nabla \psi_a|^2 dx = a, \quad \lim_{a \rightarrow 0} \int V(x) |\psi_a(x)| dx = \int V(x) dx < 0$$

Dunque $(\psi_a, H\psi_a) < 0$ se a è abbastanza piccolo.

$d = 2$

Il caso $d = 2$ segue il caso $d = 1$ considerando solo funzioni invariati per rotazione attorno ad un punto e passando a coordinate polari. Si usa il fatto

che $\frac{1}{|x|} \in L^2_{loc}$. Questo procedimento fallisce per $d \geq 3$ perchè in quel caso $\frac{1}{|x|} \notin L^2_{loc}$

♡

Nota

La differenza tra i casi $d = 1, 2$ ed il caso $d \geq 3$ è conseguenza del fatto che in dimensione 1 e 2 il moto Browniano è ricorsivo (le traiettorie tornano con probabilità uno in un intorno arbitrariamente piccolo del punto di partenza) mentre in dimensione $d \geq 3$ il moto è dispersivo (le traiettorie escono asintoticamente con probabilità uno da qualunque compatto). La relazione tra moto browniano e soluzioni dell'equazione di Schrödinger \hat{R} stata trattata nel Capitolo 14. In quel Capitolo è stato dimostrato che aggiungere un potenziale è equivalente ad aggiungere al generatore del moto browniano un campo vettoriale, che è attrattivo se il potenziale V è negativo. Stati legati di $-\Delta + V$ corrispondono a misure stazionarie del moto così ottenuto. In questo contesto il contenuto della Proposizione 16.15 è allora questo: se il moto browniano è ricorsivo, basta un piccolo campo vettoriale attrattivo per produrre un moto che ammette una misura invariante. Se viceversa il moto è dispersivo, occorre un forte campo vettoriale attrattivo per contrastare la diffusione, quindi per poter produrre uno stato legato il potenziale deve avere una parte negativa sufficientemente grande. Questo può essere dimostrato anche con tecniche relative a equazioni differenziali stocastiche. La controparte nella teoria dell'equazione di Schrödinger di quest'ultima affermazione sono il teorema di Birman forte e la disuguaglianza di Hardy.

Per dare un ulteriore esempio del metodo di stima di $N(V)$ che abbiamo finora seguito, dimostriamo il seguente Teorema

Teorema 16.16

Se $E < 0$ si ha

$$N_E(V) \leq 2 \int_0^\infty \text{Tr } V_- [e^{-tH_0} - e^{-t(H_0+V_-)}] e^{Et} dt \tag{16.61}$$

(abbiamo indicato con $-V_-$ la parte negativa di V).

◇

Dimostrazione

Per mini-max, $N_E(V) \leq N_E(V_-)$. D'altra parte se $(H_0 - \lambda V_-)\phi = E\phi$ allora $\psi \equiv \sqrt{V_-}\phi$ soddisfa

$$\sqrt{V_-}(H_0 + V_- + k^2)^{-1}\sqrt{V_-}\psi = (1 + \lambda)^{-1}\psi, \quad k^2 = -E$$

e quindi si ha

$$W\psi = [\lambda^{-1} - (1 + \lambda^{-1})\psi, \quad W \equiv \sqrt{V_-}[(H_0 + k^2)^{-1} - (H_0 + V_- + k^2)^{-1}]\sqrt{V_-} \quad 16.62$$

Ne segue che $N_E(V_-)$ è minore del numero di autovalori di W maggiori di $1/2$ (per $0 < \lambda < 1$ si ha $\lambda^{-1} - (1 + \lambda)^{-1} \geq 1/2$).

Quindi il numero di autovalori λ_i maggiori di $1/2$ è minore di $2TrW$. Infatti si ha

$$Tr W = \sum_i \lambda_i \geq \sum_{i:\lambda_i > 1/2} \lambda_i \geq \frac{1}{2} \#\{\lambda_i \geq \frac{1}{2}\}$$

Tenendo conto del fatto che il semigruppò è la trasformata di Laplace del risolvete ed esplicitando l'integrazione rispetto a t in (16.61) si completa la dimostrazione del teorema.

♡

Nota 16.9

La forma esplicita della funzione di H_0 scelta per stimare $N_E(V)$ è utile perchè si può far uso della formula di Feynmann-Kac per stimare il termine a destra. .

Altre stime possono essere ottenute utilizzando opportune funzioni definite sugli interi positivi e che hanno valore maggiore di uno su ciascuno di essi.

♣

Un secondo tipo di stime che vogliamo analizzare coinvolgono qualche norma di V (ad esempio la norma come elemento di uno spazio L^p).

Converrà per questo stimare, anzichè il numero di stati legati, la somma dei valori assoluti degli autovalori, o di loro potenze. Da questo si potrà risalire ad una stima del loro numero.

In molti problemi (ad esempio nel determinare la stabilità della materia, e in generale nel caso di un sistema composto da N fermioni identici) la quantità più interessante è una stima della somma dei primi N autovalori.

Introduciamo quindi la *funzione somma*

$$S_\gamma(V) \equiv \sum_{E_j \leq 0} |E_j|^\gamma, \quad S_0(V) = N^0\{E_j : E_j \leq 0\}$$

Vale il seguente Teorema, che non dimostreremo.

Teorema 16.17

Se $-\Delta + V$ è un operatore su $L^2(R^d)$ per ogni $\gamma \geq 0$ si ha

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{S_\gamma(\lambda V)}{\lambda^{d/2}} = C_{d,\gamma} \int dx (V_-(x))^{\frac{d}{2} + \gamma}, \quad C_{d,\gamma} = \int_{|y| < 1} |y|^{d-1} (1 - y^2)^\gamma dy$$

◇

Per la dimostrazione di questo teorema si può vedere [RS86]
 Per un commento vedere alla fine di questo capitolo.

Notiamo che stime per $S_\gamma(V)$ possono essere date in funzione delle stime per $N_E(V)$, il numero di stati legati che hanno energia minore di E .

La funzione $N_E(V)$ viene anche detta *funzione di conteggio*; essa è la dimensione spettrale del proiettore $P_{(-\infty, E]}$ della schiera spettrale di $H = -\Delta + V$.

La funzione $N_E(V)$ è naturalmente monotona in E e si ha, per costruzione

$$S_\gamma(V) = \sum_{E_j < 0} |E_j|^\gamma = \gamma \int_0^\infty |E|^{\gamma-1} N_E(V) d|E| \quad 16.64$$

Notiamo qui due semplici disuguaglianze soddisfatte da N_E

a)
$$V(x) \leq W(x) \forall x \Rightarrow N_E(V) \leq N_E(W), \quad E \leq 0$$

b)

$$\forall \alpha \in (0, 1], E \leq 0 \quad N_E(V) \leq N_{\alpha E}[(1 - \alpha)E - V] \quad 16.65$$

La dimostrazione del punto a) è immediata. Per il punto b) notare che

$$(\psi, [-\Delta + V]\psi) \leq E(\psi, \psi) \Rightarrow (\psi, [-\Delta + V - (1 - \alpha)E]\psi) \leq \alpha E|\psi|^2$$

Poichè $E \leq 0$, si deduce $V - (1 - \alpha)E \geq V$ e ne segue b) utilizzando il principio del min-max poichè il sottospazio in cui $H \leq E$ contiene (magari non strettamente) il sottospazio in cui $-\Delta + V - (1 - \alpha)E$ è minore di αE come forma quadratica:

Uno strumento importante nella stima del numero di stati legati è un ulteriore Teorema di Birman-Schwinger che afferma la uguaglianza tra $N_E(V)$ e il numero di autovalori maggiori di 1 di un opportuno operatore integrale costruito a partire da V .

Poniamo

$$K_E \equiv \sqrt{|V|}(-\Delta + E)^{-1} \sqrt{|V|} \quad 16.66$$

Chiameremo K_E *operatore di Birman-Schwinger*.

Si ha allora

Teorema 16.18 (Birman-Schwinger, versione forte)

Se $V \leq 0$, $E < 0$ allora $N_E(V)$ coincide con il numero di autovalori di K_E in $(1, \infty)$.

◇

Dimostrazione

Dalla mononicità e continuità degli autovalori segue che $N_E(V)$ coincide con il numero di $\lambda \in (0, 1)$ tale che $\Delta + \lambda V$ ha autovalore E e quindi, da facili calcoli, al numero di $\lambda \in (0, 1)$ tali che λ^{-1} sia autovalore di K_E .

♡

Se l'operatore di Birman-Schwinger risulta essere di tipo Hilbert-Schmidt (come accade in molti casi di interesse fisico) il numero dei suoi autovalori maggiori o eguali ad uno è stimato per eccesso (dall'alto) dalla sua norma di Hilbert-Schmidt.

Infatti se X è di classe Hilbert-Schmidt e indichiamo con $\{\lambda_i\}$ i suoi autovalori (contando anche la molteplicità) si ha

$$\text{Tr } X^* X = \sum_i |\lambda_i|^2 \geq \sum_{i, \lambda_i \geq 1} |\lambda_i|^2 \geq \sum_{i, \lambda_i \geq 1} 1 = N^o(\lambda_i : \lambda_i > 1) \quad 16.67$$

Nota 16.10

Dal teorema di Birman-Schwinger segue

$$N_E(V) \leq \text{Tr } K_E^* K_E \quad 16.68$$

Tenuto conto di (16.66) e passando in trasformata di Fourier la (16.68) assume la forma

$$N_E(V) \leq \frac{1}{(4\pi)^3} \int_{R^3} \frac{|\widehat{V}(p)|^2}{|p|} \arctg \frac{|p|}{2\sqrt{|E|}} dp$$

In particolare, sempre in dimensione 3 si ha

$$\frac{1}{(4\pi)^3} \int_{R^3} \frac{|\widehat{V}(p)|^2}{|p|} dp < \frac{\pi}{2} \Rightarrow N_0(V) = 0$$

♣

Raffinamenti ed estensioni di questi risultati si possono ottenere utilizzando opportune disuguaglianze, in particolare quelle di Hölder e di Sobolev.

Posto

$$K_{d,r} \equiv \omega_{d-1}^{-\frac{1}{2r}} (d-2)^{\lfloor \frac{1}{2r-1} \frac{r-1}{r} \rfloor} \frac{r-1}{2r} \left[\frac{\Gamma(2r)}{\Gamma(r+1)\Gamma(r)} \right]^{\frac{1}{2r}}$$

dove ω_{d-1} è l'area della sfera unitaria in R^d , si può ad esempio dimostrare il teorema seguente, di cui non diamo la dimostrazione (vedi Reed-Simon vol IV)

Teorema 16.19

Se $d \geq 2$, allora

a)

Se $r \geq \frac{d}{2}$ si ha

$$\inf_{x \in R^d} \int |x-y|^{2r-d} |V_-(y)|^2 dy < \frac{1}{K_{d,r}^{2r}} \Rightarrow N_0(V) = 0 \quad 16.69$$

b)

Se $1 \leq r < \frac{d}{2}$, e inoltre se $V(x) = v(|x|)$ si ha

$$\int |x|^{2r-d} V_-(|x|) dx < \frac{1}{K_{d,r}^{2r}} \Rightarrow N_0(V) = 0 \tag{16.70}$$

◇

Abbiamo dimostrato in 16.58 che per ogni $\alpha \in [0, 1)$ se $d = 3$ si ha

$$N_E(V) \leq \text{Tr } K_E^* K_E = \frac{1}{4\pi^2} \int |V_\alpha(x)| |V_\alpha(y)| |x-y|^{-2} e^{-2\sqrt{\alpha(E)}|x-y|} dx dy \tag{16.71}$$

dove

$$V_\alpha(E) = V(x) - (1 - \alpha)E$$

Da questo si deduce, utilizzando la disuguaglianza di Young, con $p = r = 2$, $q = 1$ (e quindi $p' = r' = 2$, $q' = \infty$) ed esplicitando l'integrazione rispetto ad y

$$N_E(V) \leq \frac{1}{8\pi\alpha(|E|)} \int |V_\alpha(x)|^2 dx \tag{16.72}$$

Per stimare la somma degli autovalori negativi

$$S_1(V) \equiv \sum_{E_k < 0} |E_k| = E_1 N_{E_1} + (E_2 - E_1) N_{E_2} + \dots$$

(ricordare che N_E è il numero di autovalori minori o uguali ad E) si domina questa somma con il corrispondente integrale (la funzione N_E è crescente) $\int N_E(V) dE$.

Eseguendo il cambiamento di variabile $E \rightarrow \frac{|V(x)|}{1-\alpha} - \beta$ e ottimizzando rispetto ad α (il minimo è raggiunto per $\alpha = 1/2$) si ottiene

$$S_1(V) \leq \frac{1}{4\pi} \frac{\Gamma(3)\Gamma(1/2)}{\Gamma(3/2)} \int |V_-(x)|^{5/2} dx \tag{16.73}$$

In generale, in dimensione d si ottiene con procedimento analogo

$$\sum_{E_k < 0} |E_k| \leq L_{d,\alpha} \int_{R^d} |V_-(x)|^{1+d/2} dx \tag{16.74}$$

Teorema 16.20

Sia $2 < p < 2^*$ $d \geq 3$. Sia $r \equiv \frac{p}{p-2}$, $0 < \gamma = \frac{p}{p-2} - \frac{d}{2}$
Allora $N_E(V) = 0$ se per $E < 0$

$$g_p^{-r} \int_{R^d} (V(x))^{\frac{d}{2} + \gamma} dx < |E|^\gamma \quad g_p = \inf_u \frac{\|\nabla u\|_2^2 + \|u\|_2^2}{\|u\|_p^2} \tag{16.76}$$

◇

Dimostrazione

Si ha, utilizzando le disuguaglianze di Hölder

$$(\psi, H\psi) \geq \|\nabla\psi\|_2^2 - \|V_-\|_r \|\psi\|_p^2$$

Definiamo

$$f_p \equiv \inf_u F_p(u), \quad F_p(u) = \|\nabla u\|_2^\alpha \|u\|_2^{2-\alpha}, \quad \alpha = \frac{d}{2r}$$

Per compattezza il minimo viene raggiunto: denotiamo con \hat{u} il punto di minimo. Allora

$$(\psi, H\psi) \geq \|\nabla\psi\|_2^2 - f_p^{-1} \|V_-\|_2 \|\nabla\psi\|_2^{2\alpha} \|\psi\|_2^{2-2\alpha} \quad 16.77$$

Riscalando \hat{u} si nota che

$$g_p(\hat{u}) = \alpha^{-\alpha} (1 - \alpha)^{\alpha-1} f_p(\hat{u}) \quad 16.78$$

Dalla (16.77) e (16.78) si ottiene

$$H \geq -g_p^{-\frac{r}{\alpha}} \|V_-\|_2^{\frac{r}{\alpha}}$$

Confrontando con (16.75) si ha la dimostrazione del teorema 16.20.

♡

Nel caso di *potenziali centrali* ulteriori stime possono essere date sfruttando il fatto che il problema agli autovalori per la hamiltoniana di Schrödinger può essere formulato come problema per un'equazione differenziale ordinaria, e corrispondenti tecniche possono essere utilizzate.

Noi tratteremo brevemente solamente il caso di dimensione spaziale tre.

Se il potenziale è radiale, la hamiltoniana commuta con il momento angolare.

Utilizzando coordinate sferiche una base di autostati ha la forma $\phi_l(|k|^2, r) Y_{l,m}(\omega)$ dove $Y_{l,m}(\omega)$ sono le funzioni armoniche sferiche.

Le funzioni ϕ_l appartengono a $L^2(R^+, r^2 dr)$. Tradizionalmente si preferisce porre $\phi_l(r) \equiv r u_l(r)$ con $u_l \in L^2(R^+, dr)$ prestando attenzione alle condizioni su u_l a $r = 0$ e $r = \infty$.

L'equazione agli autovalori per la hamiltoniana di Schrödinger si riduce allora all'equazione differenziale ordinaria

$$u_l''(|k|^2, r) = [|k|^2 + V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}] u_l(|k|^2, r) \quad 16.79$$

Il problema agli autovalori per questa O.D.E. va supplementato con la condizione che la funzione si annulli all'origine e all'infinito.

La ricerca degli autovalori negativi è così ricondotta ad un problema di Sturm-Liouville.

Le stime vengono spesso ottenute con metodi variazionali, e in questo caso *sonostime dall'alto*. Così in particolare, denotando con N_l il numero di stati legati di energia negativa con momento angolare di modulo l (stati in *onda* l) e indicando con V^- la parte negativa del potenziale ($V = V_+ - V_-$), si ottiene [B52]

$$N_l < \frac{1}{2l+1} \int_0^\infty r V_-(r) dr \quad 16.80$$

Altre stime sono state date da A.Martin [M7]

$$N_l < \left[\int_0^\infty V_{l,eff}^{(-)}(r) r^2 dr \int_0^\infty V_{l,eff}^{(-)}(r) dr \right]^{\frac{1}{2}} \quad 16.81$$

dove $V_{l,eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}$ e da V.Glaser et al.[G76]

$$\forall p > 1 \quad N_l < (2l+1)^{1-2p} C_p \int_0^\infty [-r^2 V^-(r)]^{\frac{1}{p}} \frac{dr}{r} \quad 16.82$$

Stime più accurate e stime dal basso possono essere ottenute facendo più dettagliate richieste sulla forma del potenziale.

APPENDICE 16A: IL METODO DI FESHBACH

Consideriamo ora brevemente un metodo per determinare gli autovalori di un operatore autoaggiunto H su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} risolvendo un problema *non-lineare* in uno spazio di Hilbert \mathcal{K} *più piccolo* (in generale, nelle applicazioni, lo spazio \mathcal{K} ha dimensione finita e la soluzione viene ottenuta con metodi algebrici).

Questo metodo è noto in Fisica (soprattutto in Fisica atomica) come *Metodo di Feshbach* (o *Applicazione di Feshbach*, Feshbach map).

Il metodo è stato introdotto da Feshbach [F58] per studiare la hamiltoniana che descrive lo scattering di una particella da un nucleo.

Nello stato finale del sistema saranno presenti molti canali, corrispondenti in generale ad un cambiamento dello stato del nucleo (urto anelastico).

Se noi siamo interessati esclusivamente a descrivere lo scattering elastico, possiamo utilizzare un metodo simile al metodo di sostituzione di Gauss per eliminare in forma implicita lo scattering inelastico.

Descriviamo brevemente il problema concreto di Fisica Nucleare che ha dato origine al metodo di Feshbach; ne daremo poi la versione astratta.

Il sistema complessivo che studiamo è composto da un nucleo A di numero atomico N e da una particella incidente.

Indichiamo con $x \in R^3$ le coordinate della particella, con $x_k, k = 1, \dots, N$ le coordinate delle componenti del nucleo. Lo spazio in cui lavoriamo è

$$L^2(R^{3N+3}) \equiv \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2, \quad \mathcal{H}_1 = L^2(R^3), \quad \mathcal{H}_2 = L^2(R^{3N}) \quad 16A.1$$

Vogliamo risolvere l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo

$$H\Phi = E\Phi, \quad H = H_A \oplus I + I \oplus T_0 + V(x, X) \quad X \equiv (x_1, \dots, x_N) \quad T_0 = -\frac{1}{2m} \Delta_x \quad 16A.2$$

Supponiamo che H_A abbia spettro discreto e sia ψ_k una base di sue autofunzioni. Un generico elemento Ψ di \mathcal{H} può allora essere scritto nella forma

$$\Psi = \sum_k u_k(x) \psi_k(X), \quad u_k \in \mathcal{H}_1, \quad \psi \in \mathcal{H}_2 \quad k = 0, 1, \dots$$

Le proprietà di ortonormalità delle ψ_k nello spazio \mathcal{H}_2 permettono di tradurre la (16A.2) nell'equazione matriciale

$$(T_0 + V_{k,k}(x) + \epsilon_k - E)u_k(x) = - \sum_{j \neq k} V_{j,k}(x)u_j(x) \quad 16A.3$$

dove

$$V_{j,k}(x) = (\phi_j, V\psi_k) = \int \bar{\phi}_j(x, X) V(x, X) \phi_k(x, X) dX$$

Se consideriamo l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo nell'ambito della teoria dello scattering possiamo pensare che in un remoto passato l'atomo si trovi nello stato $\psi_{0,t}$

Traducendo questo (cum grano salis) nella teoria indipendente dal tempo (considerando cioè le autofunzioni) è utile estrarre da (16A.3) un'equazione per la sola funzione $u_0(x)$.

Indicando con Φ il vettore colonna composto dalle $u_k, k \geq 1$ la (16A.3) si riscrive con $W_0 \equiv (V_{0,1}, V_{0,2}, \dots)$

$$(T_0 + V_{0,0} - E)u_0 = -W_0 \cdot \Phi, \quad (H - E)\Phi = -\widehat{W}_0 u_0 \quad 16A.4$$

Risolvendo la seconda equazione in (16A.4) e sostituendo nella prima si ottiene infine

$$[T_0 + V_{0,0} + W_0(E - H)^{-1} \widehat{W}_0 - E]u_0 = 0 \quad 16A.5$$

che è l'equazione stazionaria cercata.

In (16A.5) il termine $W_0(E - H)^{-1} \widehat{W}_0$ è un operatore su $L^2(R^3)$ che gioca il ruolo di *interazione effettiva*.

Poiché il problema che si poneva Feshbach era un problema di scattering e quindi una parte almeno dello spettro era continua, alcuni accorgimenti dovevano essere utilizzati per rendere rigoroso il metodo.

Il metodo di Feshbach è stato raffinato e utilizzato da [BCFS03] per studiare gli stati legati (o le risonanze) di un atomo in interazione con il campo elettromagnetico (quantizzato).

Diamo ora la versione astratta di questo metodo.

Nella letteratura matematica questo procedimento va spesso sotto il nome di metodo del complemento di Schur (Schur complement formula) e nella sua applicazione a equazioni differenziali lineari è conosciuto come problema di Grushin .

Supponiamo che lo spazio di Hilbert \mathcal{H} sia decomponibile in modo naturale nella somma diretta di due spazi di Hilbert

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$$

e decomponiamo conseguentemente l'operatore H di cui vogliamo studiare lo spettro ottenendo la matrice

$$H = \{H_{h,k}\} \quad h, k = 1, 2 \tag{16A.6}$$

Supponiamo che esista un insieme Ω tale che l'operatore $H_{2,2} - zI_{2,2}$ sia invertibile per $z \in \Omega$. Definiamo la *funzione di risonanza* (la terminologia proviene dalla Fisica Nucleare) come l'operatore definito su \mathcal{H}_1 da

$$G_1(z) = zI_{1,1} - H_{1,1} - H_{1,2}(zI_{2,2} - H_{2,2})^{-1}H_{2,1} \tag{16A.7}$$

Nella terminologia usata spesso in matematica, questa funzione è detta *complemento di Schur*.

E' facile vedere per sostituzione che

$$z \in \sigma(H) \Leftrightarrow 0 \in \sigma(G_1(z)) \tag{16A.8}$$

e le molteplicità si corrispondono poichè

$$tr \int_{\gamma_z} (\zeta - H)^{-1} d\zeta = tr_{\gamma_z} [\partial G_1(\zeta)(G^{-1}(\zeta))] d\zeta \tag{16A.9}$$

dove $\gamma_z = z + \epsilon e^{it}$, $0 \leq t \leq 2\pi$ con ϵ abbastanza piccolo.

Il metodo di Feshbach provvede quindi un modo per determinare gli autovallori dell'operatore H dalla conoscenza delle soluzioni del problema non-lineare $G_1(z) = 0$.

Questo è un problema algebrico se lo spazio H_1 ha dimensione finita.

La versione del metodo di Feshbach che risale a Schur è la seguente: se vale

$$H_{1,1} = P, \quad H_{1,2} = R \quad H_{2,1} = -R \tag{16A.10}$$

allora P è invertibile se e solo se $H_{2,2}$ è invertibile e si ha

$$P^{-1} = H_{1,1} - H_{1,2}H_{2,2}^{-1}H_{2,1}, \quad H_{2,2}^{-1} = -R_+P^{-1}R_- \tag{16A.11}$$

Il metodo di Feshbach può essere generalizzato in vari modi.

Ad esempio la decomposizione dello spazio \mathcal{H} può essere fatta mediante operatori che soddisfano $P^2 = P$ ma non necessariamente $P^* = P$. La decomposizione non risulta ortogonale, ma è univocamente determinata)

Per ogni operatore chiuso e densamente definito H il cui dominio contene il codominio di P definiamo

$$H_1 \equiv PHP, \quad H_2 = (I - P)H(I - P) \quad 16A.12$$

Riguardiamo H_2 come operatore su $(I - P)\mathcal{H} = \mathcal{H}_2$ e assumiamo (che abbiamo scelto P così che) l'inverso H_2^{-1} esista su \mathcal{H}_2 e sia limitato.

Supponiamo inoltre che

$$(I - P)H_2^{-1}(I - P)HP \quad PH(I - P)(H_2)^{-1}(I - P)$$

siano operatori limitati.

Sul codominio di P l'applicazione di Feshbach è

$$F_P = PHP - PH(I - P)(H_2)^{-1}(I - P)HP \quad 16A.13$$

e l'operatore di risonanza risulta

$$S_P = P - (I - P)(H_2)^{-1}(I - P)HP \quad 16A.14$$

Si ha l'identità

$$P\phi = [I + (I - P)(H_2)^{-1}(I - P)HP]S_P\phi \quad \forall \phi \in \mathcal{H}$$

e quindi $\text{Ker}S_P = \text{Ker}P$

L'applicazione di Feshbach così definita è *isospettrale* nel senso che se z appartiene all'insieme risolvente di H_2 (quindi $H_2 - z$ è invertibile) allora

$$\sigma_*(H - z) = \sigma_*(F_{P_1}(H - z)) \quad 16A.15$$

dove σ_* indica indifferentemente lo spettro o anche lo spettro puntuale.

Inoltre si ha

$$P \text{Ker}(H - z) = \text{Ker}(F_P(H - z)) \quad \dim \text{Ker}(H - z) = \dim \text{Ker}(F_P(H - z)) \quad 16A.16$$

e le autofunzioni di $H - z$ e di $F_P(H - z)$ si corrispondono secondo

$$\text{Ker}[(H - z)S_P] = \text{Ker}F_P(H - z) \quad S_P(z) = P - (I - P)(H_2 - z)^{-1}(I - P)HP$$

Queste relazioni si ottengono in modo elementare facendo uso della relazione

$$H = H_1 + H_2 + P_1H(I - P) + (I - P)HP$$

e delle identità di risolvente

$$\frac{1}{H-z} - \frac{1}{K-z} = \frac{1}{H-z}(K-H)\frac{1}{K-z}$$

valida quando tutti i termini sono ben definiti.

Il metodo di Feshbach può essere messo in un contesto più generale, è spesso utilizzato nello studio di sistemi che dipendono in modo analitico da un parametro e provvede soluzioni che dipendono analiticamente dal parametro.

Questa generalizzazione viene detta talvolta *problema di Grushin* e non è richiesto che gli operatori siano autoaggiunti.

Il problema di Grushin è un problema che viene posto in modo naturale nel contesto di operatori differenziali.

Un esempio è il problema di determinare la derivata normale al bordo della soluzione di un problema ellittico in una regione Ω con bordo regolare $\partial\Omega$ con condizioni di Dirichlet inhomogenee al bordo.

Il problema di Grushin può essere formalizzato come problema di risolubilità di un sistema lineare nel modo seguente: determinare la soluzione u, v (se esiste) del problema

$$\begin{aligned} Pu + R_- w = v \quad R_+ u = \zeta \\ P : H_1 \rightarrow H_2, \quad R_- : H_- \rightarrow H_2 \quad R_+ : H_1 \rightarrow H_+ \end{aligned} \quad 16A.17$$

Se la soluzione esiste essa è data da , con $u_1 = u, \quad u_2 = v$

$$u_k = \sum_h H_{kh} w_h \quad w_1 = v, \quad w_2 = z \quad 16A.18$$

Nel caso che il problema riguardi la riduzione di un'equazione lineare (come l'equazione di Schroediger) a un'equazione per un sottosistema, l'operatore $H_{2,2}$ gioca il ruolo di *Hamiltoniana effettiva* .

In questo modo può essere impostata l'approssimazione di Born-Oppenheimer per la trattazione di un sistema con gradi di libertà *veloci* e gradi di libertà *lenti* .

Per vedere come il metodo di Feshbach e il metodo del complemento di Schur sono connessi al problema di Grushin, si consideri la seguente matrice a valore operatori su $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}_1$

$$P_{1,1}(z) = z - H \quad P_{1,2} = -P_2, 1 = R \quad P_{2,2} = 0 \quad D(H) \oplus \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}_1 \quad 16A.19$$

dove

$$R_+ = (I_{1,1}, O_{1,2}) \quad R_- = I_{1,1}, O_{2,1}$$

Se $zI_{1,1} - H_{1,1}$ è invertibile, allora il corrispondente problema di Grushin è ben posto, e

$$H_{2,2} = -(zI_{1,1} - H_{1,1} + H_{1,2}(zI_{2,2} - H_{2,2})^{-1}H_{2,1}) \equiv -G_1(z) \quad 16A.20$$

APPENDICE 16B: STIME SEMICLASSICHE

Cercheremo stime asintotiche della distribuzione degli autovalori negativi dell'operatore di Schrödinger quando la parte negativa del potenziale è molto grande.

Queste stime sono dette *semiclassiche*; poichè il numero di autovalori di $-\Delta + \lambda^2 V$ coincide con il numero degli autovalori di $H_\lambda = -\hbar^2 \Delta + V$ dove $\hbar \equiv \lambda^{-1}$, si comprende l'origine di questa terminologia.

Notiamo che una lettura informale del principio di indeterminazione suggerisce che il supporto della funzione di Wigner di una particella con energia non troppo grande non possa essere minore di un cella dello spazio delle configurazioni di lato \hbar (si pensi all'approssimazione W.K.B.).

Risulta allora naturale considerare prima un problema ausiliario in cui si aggiungono condizioni di Dirichlet ai bordi di cubetti di lato \hbar situati nella regione in cui V è negativo.

L'equazione di Schrödinger nei cubetti viene così disaccoppiata e in ciascun cubetto l'operatore di Schrödinger corrispondente ha spettro discreto e il numero di autovalori è di ordine 1.

Il numero di cubetti essendo $O(\hbar^{-d})$ risulta che il numero di stati legati per l'operatore H_λ è $O(\hbar^{-d})$.

Una stima dell'errore che si compie nella determinazione del numero di autovalori negativi a causa dell'inserimento di condizioni di Dirichlet (detta stima di confronto Dirichlet-Neumann, *Dirichlet-Neumann bracketing*) può essere ottenuta mediante il principio di min-max e il confronto di questa modificazione con qualunque altra ottenuta ponendo altre condizioni al bordo.

Le stime del numero di autovalori negativi che si ottengono scegliendo diverse condizioni al bordo differiscono tra loro solo per termini infinitesimi in ϵ .

Da questo ragionamento euristico si può concludere che nel limite semiclassico, cioè *quando* $\hbar \rightarrow 0$, il numero di stati legati che dell'operatore $-\hbar^2 \Delta + V$, con V abbastanza regolare sia data dal numero di ipercubi di lato \hbar che riempiono la regione nello spazio delle configurazioni in cui V è negativo.

Indicando con $N_\hbar^0(V)$ il numero di stati legati (la dimensione della proiezione spettrale di $H = -\hbar^2 \Delta + V$ in $(-\infty, 0]$) ci aspettiamo pertanto che valga la relazione

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{N_\hbar^0(V)}{\hbar^d} = (\hbar)^{-d} \int_{R^d} |V_-(x)|^{\frac{d}{2}} dx \quad 16B.1$$

La ricerca del numero asintotico di autovalori negativi è detto *problema di Weyl*.

Utili riferimenti bibliografici sono [Fo86], [RS78]

La (16B.1) è stata dimostrata da A.Martin [M72] per potenziali negativi continui a supporto compatto e successivamente estesa a casi più generali.

Posto

$$S_\gamma(V) = \sum_{E_j < 0} |E_j|^\gamma \quad 16B.2$$

cercheremo stime della forma

$$S_\gamma(V) \leq C_{\gamma,d} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{H_{cl}(q,p) \leq 0} |H_{cl}(q,p)|^\gamma dq dp \quad 16B.3$$

dove con $H_{cl}(p, q)$ viene indicata l'Hamiltoniana classica del sistema come funzione del punto dello spazio delle fasi.

Stime di questo tipo, con riferimento allo spazio della fasi, sono state sviluppate da E.Lieb utilizzando la rappresentazione attraverso l'integrale di Wiener del nucleo dell'operatore di Birman-Schwinger.

Indichiamo con $d\mu_{x,y;t}$ la misura di Wiener sui cammini $\omega(t)$ con $\omega(0) = x$ e $\omega(t) = y$.

Ricordiamo che questa misura permette di rappresentare la funzione di Green relativa al semigruppoo $e^{t\Delta}$ come

$$\int d\mu_{x,y;t}(\omega) = \left(\frac{1}{4\pi t}\right)^{\frac{d}{2}} e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} \quad 16B.4$$

Utilizzando la formula di Feymann-Kac è possibile dimostrare [L76]

Teorema 16B.1 (Formula di traccia (Lieb))

Sia $V \leq 0$ e $V \in L^p(\mathbb{R}^d) + L^q(\mathbb{R}^d)$ con $p < q < \infty$ e $p = \frac{d}{2}$ se $d \geq 3$, $p > 1$ se $d = 2$ e $p = 1$ se $d = 1$.

Sia f una funzione nonnegativa, semicontinua inferiormente, con

$$f(0) = 0 \quad \lim_{r \rightarrow \infty} x^r f(x) = 0$$

per qualche $r < \infty$. Definiamo F_f mediante

$$F_f(x) = \int_0^\infty f(xy) \frac{e^{-y}}{y} dy \quad 16B.5$$

Allora si ha

$$Tr F_f(E) = \int_0^\infty \frac{e^{-|E|t}}{t} dt \int_{\mathbb{R}^d} d\mu_{x,x;t} f\left(\int_0^t V(\omega(s)) ds\right) \quad 16B.6$$

Se f è una funzione convessa possiamo utilizzare la diseguglianza di Jensen

$$f\left[\frac{1}{t} \int_0^t V(\omega(s)) ds\right] \leq \frac{1}{t} \int_0^t f(tV(\omega(s))) ds$$

e ottenere, scambiando l'ordine di integrazione (teorema di Fubini)

$$\text{Tr}F(E) \leq \int_0^\infty t^{-1} e^{-|E|t} dt d\mu_{(0,0;t)} \int_{R^d} f(V(\omega(s) + x)) dx$$

Siccome la misura di Lebesgue è invariante per traslazione, possiamo omettere nell'ultimo integrale la dipendenza da ω , ed eseguire l'integrazione sulla misura di Wiener.

Otteniamo così la *formula di traccia* di Lieb

$$\text{Tr}F(K_E) \leq (4\pi)^{-\frac{d}{2}} \int_0^\infty dt t^{-1-\frac{d}{2}} e^{-|E|t} \int f(tV(x)) dx \quad 16B.7$$

◇

Diverse scelte della funzione f nella classe della funzioni convesse, nonnegative semicontinue inferiormente, e conseguentemente della funzione F_f , danno informazioni sulle funzioni

$$S_\gamma(V) = \sum_{E_k \leq 0} |E_k|^\gamma \quad 16B.8$$

e quindi sulla distribuzione degli autovalori negativi di H .

In particolare ponendo $E = 0$ e facendo per ciascun valore di x il cambiamento $tV(x) \rightarrow \tau$ si ottiene da (16B.7)

$$N_0(V) \leq \frac{\int_0^\infty s^{-\frac{d}{2}-1} f(s) ds}{\int_0^\infty s^{-1} e^{-s} f(s) ds} (4\pi)^{-\frac{d}{2}} \int_{R^d} |V_-(x)|^{\frac{d}{2}} dx \quad 16B.9$$

La migliore stima si ottiene minimizzando il termine a destra su tutte le funzioni ammissibili.

Si può dimostrare che il minimo si ottiene scegliendo $f(s) = 0$, $s \leq b$, $f(s) = s - b$ per qualche $b \geq 0$ e poi minimizzando rispetto alla scelta di b .

Notiamo che $S_0(V) = N_0(V)$ (la somme di tutti gli autovalori minori o uguali a zero).

In particolare si ottiene, per $d \geq 3$, le stime (V_- è la parte negativa di V)

$$N(V) \leq C_d \int_{R^d} |V_-(x)|^{\frac{d}{2}} dx \quad 16B.10$$

(diseguaglianza di Cwikel-Lieb-Rosenblum)

$$\sum_{i: E_i < 0} |E_i|^\gamma \leq C_{d,\gamma} \int_{R^d} |V_-(x)|^{\frac{d}{2}+\gamma} dx \quad 16B.11$$

(diseguaglianza di Lieb-Thirring)

dove in quest'ultima disuguaglianza la costante $\leq C_{d,\gamma}$ è finita (e indipendente da V) se $\gamma \geq \frac{1}{2}$ per $d = 1$, $\gamma > 0$ per $d = 2$ and $\gamma \geq 0$ per $d \geq 3$.

Per una dimostrazione rimandiamo a [RS86]

Nota 16B.1

Notiamo che se l'hamiltoniana classica è $H_{class} = p^2 + V(q)$ la stima

$$S_\gamma(V) \leq C_1 \int_{\mathbb{R}^d} |V_-(x)|^{\frac{d}{2}+\gamma} \quad 16B.12$$

è equivalente (dopo un' integrazione sulle p) a

$$S_\gamma(V) \leq C_2 \int \int_{\{H(p,q) \leq 0\}} |H(p,q)|^\gamma dqdp \quad 16B.13$$

Per $\gamma = 0$ questa stima è della forma

$$N_0(V) \equiv C_3 \int \int_{\{H(p,q) \leq 0\}} dqdp \quad 16B.14$$

una espressione che suggerisce (dopo avere scelto unità di misura in cui \hbar è il valore della costante di Planck) che il numero di autovalori negativi per \hbar molto piccolo è pressochè uguale al numero di ipercubi di lato \hbar contenuti nella regione in cui $H(p,q) \leq 0$.

A quest'espressione si arriva anche con tecniche di limite semiclassico; una descrizione dettagliata di questo metodo per stimare il numero di autovalori negativi della hamiltoniana $-\hbar^2\Delta + V(x)$ nel limite $\hbar \rightarrow 0$ si può trovare su Folland [F78]

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [B52] V.Bargmann, *Proc. Natl.Acad.Sci.USA* 38 (1952) 961-966
- [BCFS03] V.Bach, T.Chen, J.Froelich, I.Segal *J. Funct. An.* 203 (2003) 44-92
- [Fe58] A. Feshbach *Unified theory of nuclear reactions*, *Ann. Phys.* 5 (1958) 357-390
- [Fo78] G.M. Folland *Fourier Analysis in Phase Space*, Princeton University Press, 1978
- [G76] V.Glaser et al *Studies in Math. Phys.*, Princeton U.Press (1976) 169-194
- [L76] E.Lieb *Bull. A.M.S.* 82, (1976) 751-753
- [M77] P.Martin *Comm.Math. Phys.* 55 (1977) 293-298
- [M72] P.Martin *Helvetica Physical Acta* 45 (1972) 140-148
- [RS86] M.Reed, B. Simon, *Methods of Mathematical Physics* vol IV, cap.XIII. Springer (1986)

CAPITOLO 17
TEORIA DELLO SCATTERING IN MECCANICA
QUANTISTICA . FORMULAZIONI DIPEDENTE DAL
TEMPO E STAZIONARIA TEOREMA R.A.G.E. IL
METODO DI ENSS.

La teoria dello scattering, in Meccanica Quantistica come in Meccanica Classica, descrive quegli effetti dell'interazione tra N particelle che possono essere misurati quando le componenti del sistema sono così lontane tra loro da muoversi senza interazione reciproca.

In questo Capitolo, ci limiteremo a descrivere un sistema composto da due punti materiali quantistici interagenti tramite forze potenziali che dipendono solo dalla posizione relativa dei due punti.

In questo caso il problema può essere ricondotto a quello di un punto materiale in interazione con una forza di natura potenziale.

Questo è un problema di gran lunga più facile del corrispondente problema per un sistema di $N \geq 3$ corpi, nel quale sono presenti diversi *canali* (il prodotto finale dell'interazione potrebbe presentare ad esempio stati legati di diverse particelle).

La teoria dello scattering nel problema a due corpi in Meccanica Quantistica, o equivalentemente la teoria dello scattering ad opera di forze di natura potenziale, consiste essenzialmente nello studio della relazione tra il comportamento asintotico per $t \rightarrow \pm\infty$ di uno stato sotto l'azione di due dinamiche, generate rispettivamente dagli operatori autoaggiunti H_1 e H_2 .

Noi tratteremo in dettaglio solo il caso in cui lo spazio ambiente è R^3 , entrambi i sistemi sono descritti in coordinate cartesiane, la dinamica descritta da $H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ è la dinamica libera di una particella di massa m e la dinamica descritta da $H_2 \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$ è la dinamica della particella in interazione con un campo di potenziale.

Trascureremo la presenza di spin e in generale sceglieremo unità di misura in cui $2m = \hbar = 1$.

Faremo ipotesi molto stringenti sul potenziale $V(x)$, prima tra tutte che sia tale che $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ sia autoaggiunto.

Faremo anche l'ipotesi che $V(x)$ si annulli all'infinito abbastanza rapidamente (ad esempio $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |x|^p V(x) = 0$ per un opportuno valore di $p > 1$).

La teoria si può anche applicare se $H_1 = -\Delta + V_{per}$, dove V_{per} è una funzione periodica abbastanza regolare delle variabili spaziali, e $H_2 = H_1 + V$ con V potenziale che si annulla rapidamente all'infinito (scattering di una particella da un cristallo)

Gli stessi problemi di confronto possono essere posti quando il potenziale $V(t, x)$ sia una funzione periodica in t di periodo T (e abbastanza regolare nella sua dipendenza dalle variabili spaziali).

Non tratteremo quest'ultimo caso, limitandoci a notare che può essere "essenzialmente riportato al caso in cui V non dipende dal tempo introducendo una variabile $\tau \in [0, T]$ e considerando sulle funzioni T -periodiche $\phi(t + \tau, \cdot) = \phi(t, \cdot)$ a valori in $L^2(\mathbb{R}^3)$ l'operatore (di Floquet) $H_{\tau, V}$

$$H_{\tau, V} \equiv i \frac{\partial}{\partial \tau} + \Delta - V(\tau, x)$$

definito (e autoaggiunto) su insieme denso in $L^2([0, T] \times \mathbb{R}^3)$.
 L'equazione di Schrödinger assume allora la forma

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t; x, \tau) = H_{\tau, V} \psi(t; \tau, x)$$

17.1 TEORIA DELLO SCATTERING: FORMULAZIONE DIPENDENTE DAL TEMPO

Dati due operatori H_1 e H_2 in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , formuleremo la teoria della scattering come confronto tra il comportamento asintotico "su tempi lunghi" dell'evoluzione secondo H_2 di un elemento $\phi \in \mathcal{H}$ data da $e^{-itH_2}\phi$ e quello dell'evoluzione di due elementi ϕ_{\pm} secondo la dinamica data da $H_1 : e^{-itH_1}\phi_{\pm}$. Ci chiederemo sotto quali condizioni su ϕ , H_1 , H_2 esistano ϕ_{\pm} tali che

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|e^{-iH_2 t} \phi - e^{-iH_1 t} \phi_{\pm}\|_2 = 0 \tag{17.1}$$

Notiamo che mentre viene richiesto in (17.1) che esista il limite della differenza, i limiti degli addendi non esistono in generale, almeno nella topologia \mathcal{H} .

Ad esempio, nel caso

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d), \quad H_1 = -\Delta, \quad H_2 = -\Delta + V(x), \quad V \in C_0^\infty \quad V(x) > 0$$

le dinamiche hanno un proprietà *dispersiva*, nel senso che quando $t \rightarrow \pm\infty$ si ha, per ϕ nel complemento del supporto dello spettro discreto di H_k , $k = 1, 2$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sup_x |(e^{itH_k} \phi_{\pm})(x)| = 0$$

e quindi (17.1) confronta funzioni che al limite sono infinitesime dappertutto.

Naturalmente la rapidità di convergenza a zero in un fissata direzione nello spazio sarà in generale diversa nei due casi ma l'analisi delle proprietà dello scattering come *fenomeno del second'ordine* può risultare molto complessa.

Per evitare questo problema, e poiché entrambe le dinamiche sono descritte da gruppi di operatori unitari, si preferisce scrivere la (17.1) sotto le forme equivalenti

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_1} e^{-itH_2} \phi = \phi_{\pm} \tag{17.2}$$

oppure

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_2} e^{-itH_1} \phi_{\pm} = \phi \tag{17.3}$$

Non è ovvio (e in generale non è vero) che i limiti indicati in (17.2), (17.3) esistano per tutti gli elementi $\phi \in \mathcal{H}$.

Nel dominio di esistenza del limite in (17.3) useremo la notazione

$$W_{\pm}(H_2, H_1) = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_2} e^{-itH_1}$$

Notiamo che vale, su un opportuno dominio

$$W_{\pm}(H_2, H_1)e^{-itH_1} = e^{-itH_2}W_{\pm}(H_2, H_1)$$

(gli operatori $W_{\pm}(H_2, H_1)$ sul dominio di definizione *intrallacciano* le due dinamiche).

In particolare il dominio di $W_{\pm}(H_2, H_1)$ è invariante per il flusso descritto da H_1 .

Conviene comprendere il significato di (17.2) e (17.3). Lo esemplifichiamo nel caso che ci interesserà nel seguito, cioè $\mathcal{H} = \mathcal{L}^{\infty}(\mathcal{R}^3)$, $H_1 = -\Delta$ e $H_2 = -\Delta + V$ dove V è un potenziale con opportune proprietà di regolarità

L'esistenza di $W_{\pm}(-\Delta + V, -\Delta)$ risponde alla domanda se, data un'evoluzione libera corrispondente a un dato iniziale, esista un altro dato iniziale la cui evoluzione con interazione risulti asintotica (per $t \rightarrow +\infty$ rispettivamente per $t \rightarrow -\infty$) all'evoluzione data.

Questo corrisponde in Dinamica Classica a chiedere se, data una traiettoria rettilinea, esista un dato iniziale la cui traiettoria, sotto l'azione del potenziale V , sia asintotica alla traiettoria data.

L'esistenza di $W_{\pm}(-\Delta, -\Delta + V)$ risponde alla domanda se l'evoluzione sotto l'azione di $-\Delta + V$ a partire da un dato iniziale sia asintotica per $t \rightarrow +\infty$ o per $t \rightarrow -\infty$ a un'evoluzione libera.

Appare evidente che se il dato iniziale corrisponde ad uno stato legato per il potenziale V questa domanda avrà risposta negativa. Il dominio dell'operatore $W_{\pm}(-\Delta, -\Delta + V)$ escluderà certamente gli stati legati del potenziale V .

Scopo di questo capitolo è determinare le condizioni sotto cui questi sono i soli stati esclusi e ogni comportamento libero può essere ottenuto scegliendo

opportunamente il dato iniziale (il dominio di $W_{\pm}(-\Delta + V, -\Delta)$ è tutto lo spazio di Hilbert).

Per confronto, notiamo che in Dinamica Classica è possibile trovare potenziali limitati che non hanno stati legati e per cui il limite non esiste, o esiste in una sola direzione del tempo (potenziali intrappolanti).

Definizione 17.1

Se lo spettro di H_1 è assolutamente continuo (come è il caso se $H_1 = -\Delta$) definiamo *operatore d'onda* (wave operator), relativamente alla coppia H_2, H_1 , l'operatore

$$W_{\pm}(H_2, H_1) = s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_2} e^{-itH_1} \quad 17.4$$

Se lo spettro di H_1 non è assolutamente continuo, la definizione degli operatori d'onda va opportunamente generalizzata.

Indichiamo con $\mathcal{H}_{1,ac} \subset \mathcal{H}$ il sottospazio (chiuso) di assoluta continuità per H_1 definito da

$$\mathcal{H}_{1,ac} \equiv \{ \phi \in \mathcal{H} : (E_1(\lambda)\phi, \phi) \in C_{ac} \}$$

dove $E_1(\lambda)$ è la famiglia spettrale di H_1 e C_{ac} è lo spazio delle funzioni assolutamente continue.

In questo caso definiamo *operatori d'onda generalizzati* i limiti

$$W_{\pm}(H_2, H_1) \equiv s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_2} e^{-itH_1} \Pi_1 \quad 17.5$$

dove Π_1 è il proiettore ortogonale su $\mathcal{H}_{1,ac}$.

◇

Nota 17.1

Se $H_1 = -\Delta$ lo spettro è assolutamente continuo e quindi in questo caso $\Pi_1 = I$ e la definizione di operatore d'onda per la coppia H_2, H_1 si riduce a quella data in (17.4).

Nel caso $H_1 = -\Delta + V$ l'operatore H_1 può avere spettro in parte puntuale (gli stati legati) e anche spettro in parte singolare continuo; in questo caso è essenziale fare riferimento a (17.5) per definire gli operatori d'onda.

♣

Dalla definizione segue che

$$W_{\pm}^*(H_2, H_1)W_{\pm}(H_2, H_1) = \Pi_1$$

dove Π_1 è il proiettore sul sottospazio di assoluta continuità della misura spettrale di H_1 .

Definizione 17.2. Matrice di Scattering

Sugli elementi $\phi_- \in D(W_-(H_2, H_1))$ tali che $W_-(H_2, H_1)\phi_- \in D(W_+(H_1, H_2))$ definiamo l'applicazione $S(H_2, H_1)$

$$\phi_- \rightarrow \phi_+ \equiv S(H_2, H_1) \phi_- = W_+(H_1, H_2)W_-(H_2, H_1)\phi_- \quad 17.6$$

Nel caso $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, $H_1 = -\Delta$, $H_2 = -\Delta + V$ l'operatore $S(H_2, H_1)$ è detto *operatore di scattering* o più comunemente *matrice di scattering*.



Dalla sua definizione risulta che $e^{-itH_1}S = Se^{itH_1}$.

Con le notazioni (17.1) l'operatore S è l'applicazione $\phi_- \rightarrow \phi_+$ e rappresenta l'ampiezza di probabilità che un sistema, di cui è dato il comportamento libero nel remoto passato, abbia nel remoto futuro uno specifico comportamento libero. L'aggiunto S^* è definito sul dominio di $W_+(H_1, H_2)$ e su opportuni domini valgono le identità

$$S(H_2, H_1) = W_+^*(H_2, H_1) W_-(H_2, H_1) \quad S^*(H_2, H_1) = W_-^*(H_2, H_1) W_+(H_2, H_1)$$

Nel caso in cui $H_1 = -\Delta$ e $H_2 = H_1 + V$ (quindi H_1 descrive una propagazione libera) per l'interpretazione fisica che daremo in appendice B l'operatore S deve essere unitario.

Questo implica

$$\text{Range } W_+(H_2, H_1) = \mathcal{H} = \text{Range } W_-(H_2, H_1) \quad 17.7$$

Nel caso dello scattering da potenziale le ipotesi che faremo su V hanno lo scopo di garantire l'esistenza degli operatori d'onda e la validità di (17.7).

Nota 17.2

Conviene formulare il problema dello scattering riferendosi a due hamiltoniane H_1 e H_2 anziché ad una hamiltoniana *libera* ed un'altra *con interazione*; questo mette in luce il ruolo simmetrico giocato dalle due hamiltoniane, e inoltre permette di formulare la regola di incatenamento (*chain rule*) che permette di dedurre l'esistenza dell'operatore d'onda per la coppia di hamiltoniane (H_3, H_1) dalla conoscenza degli operatori d'onda per le coppie (H_3, H_2) e (H_2, H_1) .



L'analisi precedente ha messo in luce i due problemi fondamentali nella teoria dello scattering in Meccanica Quantistica:

- i) *Esistenza dell'operatore d'onda*
- ii) *Completezza asintotica : Range $W_- = \text{Range } W_+$*

Nota 17.3

Un altro problema interessante è il *problema inverso di scattering*. Dati l'operatore unitario S e l'operatore H_1 si tratta di determinare l'esistenza ed eventuale unicità di un operatore H_2 per il quale vale (17.5).

Per un'introduzione generale si può vedere ad esempio [GL55].

Un semplice esempio che dimostra come la proprietà dispersive siano importanti per lo scattering inverso è il seguente (G. Schmidt).

Siano

$$H_1 = -i \frac{d}{dx}, \quad H_2 = -i \frac{d}{dx} + V(x), \quad \mathcal{H} = L^2(-\infty, +\infty)$$

Allora

$$(e^{-itH_1}\phi)(x) = \phi(x - t)$$

e

$$H_2 = U^{-1} H_1 U, \quad U = e^{iP(x)}, \quad P(x) = \int_0^x V(y)dy$$

Ne segue

$$e^{-itH_2} = U^{-1} e^{-itH_1} U$$

e quindi poiché $e^{itH_1} U e^{-itH_1} = e^{iP(x+t)}$,

$$(e^{itH_2} e^{-itH_1})\phi(x) = e^{i[P(x+t)-P(x)]}\phi(x) = e^{i \int_x^{x+t} V(y)dy} \phi(x)$$

In questo caso W_{\pm} sono operatori di moltiplicazione

$$W_{\pm}(H_2, H_1) = e^{i \int_x^{\pm\infty} V(y)dy}$$

(esistono se il limite indicato esiste, in particolare esistono se V appartiene a L^1) ed S è l'operatore di moltiplicazione per un fattore di fase

$$S = e^{-i \int_{-\infty}^{\infty} V(x)dx}$$

In questo caso il problema dello scattering inverso non ha soluzione unica, perché la fase dipende solamente dall'integrale del potenziale $V(x)$.

Al contrario, per l'equazione di Schrödinger (che è dispersiva) si dimostra che nel caso di potenziali di corta portata (le definizioni esatte verranno date nel seguito) il potenziale è univocamente determinato dalla conoscenza della matrice S .

Daremo una traccia di dimostrazione nell'appendice A.



Un primo risultato semplice è il seguente teorema, dimostrato per la prima volta da Cook e successivamente perfezionato da Kuroda [Ku]

Teorema 17.1 (Cook, Kuroda)

Supponiamo che esista un insieme denso $D \in \mathcal{H}_{1,ac}$ in cui siano verificate le seguenti proprietà

a)

per $\phi \in \mathcal{D}$ esiste t_0 (che può dipendere da ϕ) tale che

$$e^{-itH_1}\phi \in D(H_1) \cap D(H_2), \quad t_0 \leq t < +\infty$$

b)

$(H_2 - H_1)e^{-itH_1}\phi$ è continuo in t (come elemento di \mathcal{H}) per $t \in (t_0, \infty)$

c)

$$\int_{t_0}^{\infty} \|(H_2 - H_1)e^{-itH_1}\phi\|_2 dt < \infty \quad 17.8$$

Allora esiste $W_+(H_2, H_1)$. Analoghe affermazioni sono vere per $W_-(H_2, H_1)$. \diamond

Dimostrazione

Se $\phi \in \mathcal{D}$ e $t, s \geq t_0$ vale

$$\frac{d}{dt}(e^{itH_2} e^{-itH_1}\phi) = ie^{itH_2} (H_2 - H_1) e^{-itH_1}\phi$$

Pertanto per $t > t_0$

$$e^{itH_2} e^{-itH_1}\phi = e^{it_0H_2} e^{-it_0H_1}\phi + i \int_{t_0}^t e^{i\tau H_2} (H_2 - H_1) e^{-i\tau H_1}\phi d\tau$$

Se $\phi \in \mathcal{D}$ per le ipotesi b) e c) l'integrale a destra converge per $t \rightarrow \infty$ quindi esiste

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} e^{itH_2} e^{-itH_1}\phi$$

poiché gli operatori che intervengono sono uniformemente limitati, il limite esiste in tutto $\mathcal{H}_{1,ac}$. \heartsuit

Nota 17.4

Se

$$\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^3) \quad H_1 \equiv -\Delta \quad H_2 \equiv -\Delta + V$$

la (17.8) si legge

$$\int_{t_0}^{\infty} \|V(x)e^{it\Delta}\phi\|_2 dt < \infty \quad 17.9$$

In questo caso \mathcal{D} può essere l'insieme delle funzioni le cui trasformate di Fourier sono in C_0^∞ e la verifica di (17.9) per potenziali abbastanza regolari segue da stime dispersive (nello spazio delle configurazioni) per le funzioni $e^{-ik^2 t} \hat{\phi}(k)$.

Per $t \neq 0$ gli operatori e^{-itH_1} sono operatori integrali il cui nucleo è dato esplicitamente da

$$(e^{-itH_1}\phi)(x) = \left(\frac{1}{4\pi it}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{R^3} e^{\frac{i|x-y|^2}{4t}} \phi(y) dy$$

Ne deduciamo

$$|(e^{-itH_1}\phi)(x)| \leq \left(\frac{1}{4\pi t}\right)^{\frac{3}{2}} \int |\phi(y)| dy \quad 17.10$$

da cui

$$\int_1^\infty \|(H_2 - H_1)e^{-itH_1}\phi\|_2 dt \leq \int_1^\infty \frac{\|\phi\|_1 \|V\|_2}{(4\pi t)^{\frac{3}{2}}} dt = C \int_1^\infty \frac{dt}{t^{\frac{3}{2}}} < \infty \quad 17.11$$

Quindi la condizione iii) è soddisfatta se $V \in L^2(R^3)$ prendendo come dominio denso $L^2(R^3) \cap L^1(R^3)$.

Si può dimostrare che anche le condizioni i) e ii) sono soddisfatte se $V \in L^2(R^3)$ e quindi gli operatori d'onda esistono in questo caso. Utilizzando una disuguaglianza di Hölder in (17.11) anziché la disuguaglianza di Schwarz e tenendo presente che $t^{-\alpha} \in L^1(1, \infty)$ se $\alpha > 1$ si vede che la condizione su V può essere indebolita a

$$\int_{R^3} \frac{|V(x)|}{(1+|x|)^{1-\epsilon}} dx < \infty \quad \epsilon > 0$$

♣

Nota 17.5

Da (17.10) si deduce che $(e^{-itH_1}\phi)(x)$ come funzione della variabile x tende uniformemente a zero quando $t \rightarrow \pm\infty$.

Ci si riferisce a questo dicendo che la hamiltoniana H_0 ha una *proprietà dispersiva* (a differenza ad esempio dell'equazione delle onde).

Sotto ipotesi abbastanza poco stringenti sul potenziale $V(x)$ si dimostra che questa è una proprietà anche della soluzioni dell'equazione di Schrödinger con potenziale $V(x)$ che sono nello spettro assolutamente continuo di $-\Delta + V$.

Dal teorema di Cook-Kuroda segue allora l'esistenza di $W_\pm(\Delta, -\Delta + V)$.

Questo è importante perché l'esistenza di quest'operatore provvede il comportamento asintotico delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger con potenziale $V(x)$.

Dalla dimostrazione che abbiamo dato del teorema di Cook-Kuroda, si vede quindi che la proprietà dispersiva è importante per dimostrare l'esistenza dell'operatore di scattering.

Per altri aspetti della teoria dello scattering, è anche importante dimostrare che, a parte il fattore comune $t^{-\frac{3}{2}}$, il decadimento a zero *non è uniforme nelle direzioni spaziali* ma dipende dallo stato iniziale ϕ_0 , così che, premoltiplicando per $t^{\frac{3}{2}}$, rimane traccia del dato iniziale.

In particolare abbiamo dimostrato nel Capitolo 3 che se $\phi \in L^2(R^3)$ è sufficientemente regolare si ha

$$\lim_{t \rightarrow \infty} t^{\frac{3}{2}} \|e^{-itH_0} \phi - \phi^{asint}(t)\|_2 = 0 \quad H_0 = -\frac{1}{2m} \Delta$$

dove

$$\phi^{asint}(t) \equiv \frac{m}{(it)^{\frac{3}{2}}} e^{i\frac{mx^2}{2t}} \widehat{\phi}\left(\frac{mx}{t}\right)$$

($\widehat{\phi}$ è la trasformata di Fourier di ϕ).

Se la trasformata di Fourier di ϕ ha supporto in un intorno molto piccolo di k_0 e si riscalda $e^{-itH_0} \phi$ per un fattore $t^{\frac{3}{2}}$ si ottiene una funzione che ha supporto essenziale in un cono con vertice all'origine, asse $\hat{k}_0 \equiv \frac{k_0}{|k_0|}$ e piccola apertura angolare.

Dunque lo stato asintotico rappresenta una particella che si propaga liberamente nella direzione k_0 .



Nota 17.6

Nel seguito indicheremo con il simbolo W_{\pm} l'operatore $W_{\pm}(H_2, H_1)$



Lemma 17.2

Poniamo $H_2 - H_1 \equiv A \in B(\mathcal{H})$ e $W(t) \equiv e^{itH_2} e^{-itH_1}$.

Allora, se esiste W_+ , per ogni $\phi \in \mathcal{H}_{1,ac}$ si ha

$$\|W_+ \phi - W(t)\phi\|_2^2 = -2 \operatorname{Im} \int_t^\infty (e^{isH_1} W_+^* A e^{-isH_1} \phi, \phi) ds \quad 17.12$$



Dimostrazione

Per definizione si ha

$$(W_+ - W(t))\phi = i \int_t^\infty e^{isH_2} A e^{-isH_1} \phi ds \quad 17.13$$

Ma siccome $W(t)$ è unitario e W_+ isometrico

$$\|(W_+ - W(t))\phi\|_2^2 = 2 \operatorname{Re} ((W_+ - W(t)) \phi, W_+ \phi)$$

Da questo e da 17.13 segue 17.12.



Dall'esistenza degli operatori d'onda si deducono alcune proprietà di equivalenza unitaria.

In particolare

Teorema 17.3 (Dollard, Kato)

- Se l'operatore $W_+(H_2, H_1)$ esiste, esso è un'isometria parziale con dominio $\mathcal{H}_{1,ac}$ e codominio $\mathcal{M}_+ \equiv W_+ \mathcal{H}_{1,ac} \subset \mathcal{H}_{2,ac}$.
- Il proiettore ortogonale \mathcal{E}_+ su $W_+ \mathcal{H}_{1,ac}$ commuta con H_2 .
- Vale l'equivalenza unitaria tra la restrizione di H_1 a $\mathcal{H}_{1,ac}$ e la restrizione di H_2 a $W_+ \mathcal{H}_{1,ac}$.

In particolare lo spettro assolutamente continuo di H_1 è contenuto nello spettro assolutamente continuo di H_2 .

Risultati analoghi valgono se W_- esiste.

Se W_+ e W_- esistono entrambi, allora $S \equiv W_+^* W_-$ commuta con H_1 .

◇

Dimostrazione

Dalla definizione segue che $W_+^* W_+ = \Pi_1$ e $W_+ W_+^* = \mathcal{E}_+$.

D'altra parte, come già osservato nell'introduzione al presente capitolo,

$$e^{isH_2} W_+ = s - \lim_{t \rightarrow \infty} W(t+s) e^{isH_1} = W_+ e^{-isH_1}$$

Moltiplicando entrambi i membri per e^{-izs} , $Imz < 0$ e integrando in s da 0 a $+\infty$ (cioè prendendo la trasformata di Laplace) si ottiene

$$(H_2 - z)^{-1} W_+ = W_+ (H_1 - z)^{-1}$$

Da questo si deduce

$$W_+ H_1 \subset H_2 W_+$$

Per dualità

$$W_+^* H_2 \subset H_1 W_+^*$$

e quindi

$$\mathcal{E}_+ H_2 = W_+ W_+^* H_2 \subset W_+ H_1 W_+^* = H_2 \mathcal{E}_+ \tag{17.14}$$

Questo dimostra che \mathcal{E}_+ commuta con H_2 e quindi \mathcal{M}_+ riduce H_2 .

E anche che $\mathcal{E}_+ H_2 \mathcal{E}_+ = H_2 \mathcal{E}_+$.

Vale quindi l'uguaglianza in (17.14). Moltiplicando per \mathcal{E}_+ a destra si ottiene

$$H_2 W_+ = \mathcal{E}_+ H_2 \mathcal{E}_+ W_+ = W_+ H_1 \Pi_1 \tag{17.15}$$

In particolare da (17.15) si deduce che $H_{1,ac}$ è unitariamente equivalente alla parte di $H_{2,ac}$ che agisce su \mathcal{M}_+ e in particolare che $\sigma_{ac}(H_1) \subset \sigma_{ac}(H_2)$.

Risultati analoghi si hanno per W_- quando quest'operatore esiste.

♡

Dalle formule precedenti segue il seguente

Corollario 17.4

Se $W_+(H_2, H_1)$ esiste si hanno le seguenti convergenze in senso forte

$$\begin{aligned}
 e^{itH_2} e^{-itH_1} \Pi_1 &\rightarrow_s W_+, & e^{itH_1} e^{-itH_2} \mathcal{E}_+ &\rightarrow_s W_+^* \\
 e^{-itH_2} W_+ - e^{-itH_1} \Pi_1 &\rightarrow_s 0, & e^{itH_1} e^{-itH_2} W_+ &\rightarrow_s \Pi_1 \\
 (W_+ - 1)e^{-itH_1} \Pi_1 &\rightarrow_s 0, & (W_+^* - 1)e^{-itH_1} \Pi_1 &\rightarrow_s 0 \\
 e^{itH_1} W_+ e^{-itH_1} &\rightarrow_s \Pi_1, & e^{itH_1} W_+^* e^{-itH_1} &\rightarrow_s \Pi_1 \\
 (1 - \mathcal{E}_+) e^{-itH_1} \Pi_1 &\rightarrow_s 0, & (1 - \Pi_2) e^{-itH_1} \Pi_1 &\rightarrow_s 0
 \end{aligned}$$

◇

Dimostriamo ora la *chain rule* .

Teorema 17.5 (chain rule)

Se $W_+(H_2, H_1)$ e $W_+(H_3, H_2)$ esistono entrambi, allora esiste $W_+(H_3, H_1)$ e si ha $W_+(H_3, H_1) = W_+(H_3, H_2)W_+(H_2, H_1)$.

◇

Dimostrazione

Il limite forte di una successione di prodotti di operatori chiusi e limitati coincide con il prodotto dei limiti forti delle successioni dei fattori. Pertanto si ha

$$W_+(H_3, H_2)W_+(H_2, H_1) = s - \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{itH_3} e^{-itH_2} \Pi_2 e^{itH_2} e^{-itH_1} \Pi_1 \quad 17.16$$

poiché Π_2 commuta con H_2 dalla formula precedente si ottiene

$$W_+(H_3, H_2)W_+(H_2, H_1) = s - \lim_{t \rightarrow \infty} e^{itH_3} \Pi_2 e^{-itH_1} \Pi_1$$

D'altra parte,

$$W_+(H_3, H_1) = s - \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{-itH_3} e^{itH_1} \Pi_1$$

Sarà pertanto sufficiente dimostrare

$$s - \lim_{t \rightarrow \infty} e^{itH_3} (I - \Pi_2) e^{-itH_1} \Pi_1 = 0$$

Per l'unitarietà di $e^{itH_3} e^{-itH_2}$ è equivalente dimostrare (H_2 e Π_2 commutano)

$$s - \lim_{t \rightarrow \infty} (I - \Pi_2) e^{itH_2} e^{-itH_1} \Pi_1 = 0$$

Ma $\text{Range } W_+(H_2, H_1) \subset \mathcal{H}_{2,ac}$. Quindi $(I - \Pi_2)W_+(H_2, H_1) = 0$.

♡

Definizione 17.5

L'operatore d'onda $W_+(H_2, H_1)$ è detto *completo* se

$$W_+(H_2, H_1)\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_{2,ac} \quad 17.17$$

◇

Se entrambi W_+ e W_- esistono e sono completi, allora si ha

$$\text{Range } W_+(H_2, H_1) = \text{Range } W_-(H_2, H_1) = \mathcal{H}_{2,ac} \quad 17.18$$

Ne segue che

$$S(H_2, H_1) \equiv W_+^*(H_2, H_1) W_-(H_2, H_1) \quad 17.19$$

è un operatore unitario da $\mathcal{H}_{1,ac}$ a $\mathcal{H}_{2,ac}$.

Un semplice corollario del teorema della *chain rule* è in seguente:

Proposizione 17.6

Se $W_+(H_2, H_1)$ e $W_+(H_1, H_2)$ esistono entrambi, allora essi sono completi. Analogamente per W_- .

◇

Notiamo che nell'analisi dell'esempio che abbiamo dato precedentemente abbiamo utilizzato l'espressione del nucleo integrale di e^{-itH_1} o equivalentemente delle *autofunzioni generalizzate* di H_1 .

Indichiamo con questo nome le soluzioni dell'equazione $H_1\psi_E = E\psi_E$ per E nello spettro continuo di H_1 .

Per dimostrare in questo modo l'esistenza di $W_\pm(H_1, H_2)$ avremo allora bisogno allora di un buon controllo delle autofunzioni generalizzate di $H = -\Delta + V$; queste funzioni, regolari tranne al più nei punti di singolarità di $V(x)$, non sono a quadrato sommabile.

Un teorema che può essere dimostrato senza far uso dettagliato delle proprietà delle funzioni d'onda generalizzate ma al tempo stesso è abbastanza generale per coprire molti casi di interesse fisico è il seguente

Teorema 17.7 (Kato) [K80]

Se $H = H_2 - H_1$ è di classe traccia allora gli operatori d'onda generalizzati $W_\pm(H_2, H_1)$ esistono e sono completi.

◇

Dimostrazione

Ricordiamo che un operatore compatto e autoaggiunto A può essere scritto nella forma

$$A\phi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n (f_n, \phi) f_n, \quad c_n \in R \quad 17.20$$

dove $\{f_n\}$ è una base ortonormale completa e $\lim_{n \rightarrow \infty} c_n = 0$.

L'operatore è di classe traccia se $\sum_n |c_n| < \infty$.

Denotiamo con A_n la somma dei primi n termini della (17.20) e sia $H^n \equiv H_1 + A_n$ così che $H^n - H^{n-1}$ è di rango uno.

La *chain rule* suggerisce di dare prima la dimostrazione del Teorema 17.7 nel caso in cui A sia un operatore di rango uno, e poi iterare.

Ricordiamo che gli operatori d'onda agiscono tra sottospazi di assoluta continuità e che, per il criterio di Weyl, lo spettro assolutamente continuo di H^n non dipende da n (poiché gli operatori corrispondenti differiscono per un operatore di classe traccia) e coincide con lo spettro assolutamente continuo di H_1 .

Indichiamo con Π la proiezione ortogonale su questo sottospazio.

Nella Proposizione 17.8 dimostreremo il Teorema 17.7 per il caso in cui A è un operatore di rango uno. Assumiamo per il momento la tesi della Proposizione 17.8 e completiamo la dimostrazione del Teorema 17.7.

Notiamo che la Proposizione 17.8 e un'applicazione iterata della *chain rule* per operatori di rango uno assicurano che $W_{n,\pm} = W_{\pm}(H^n, H^{n-1})$ esiste per ogni n .

Usando la notazione $W_n(t) := e^{itH^n} e^{-itH^{n-1}}$, dalla (17.12) si deduce per $\phi \in \Pi\mathcal{H}$

$$(W_{n,\pm} - W_n(t))\phi = i \int_t^\infty e^{isH^n} (H^n - H^{n-1}) e^{-isH^{n-1}} \phi \, ds$$

dove $H^n - H^{n-1} = c_n(f_n, \cdot) f_n$ per un opportuno elemento $f_n \in \mathcal{H}$. Quindi

$$\|(W_{n,+} - W_n(t))\phi\|_2^2 \leq \int_t^\infty [|(e^{-isH^{n-1}} \phi, f_n)|^2 ds]^{1/2} \int_t^\infty [|(e^{-isH_1} \phi, g_n)|^2 ds]^{1/2}$$

dove abbiamo posto $g_n \equiv (W_n^+)^* f_n$.

In modo analogo si ottiene

$$\begin{aligned} & \| [W_{\pm}(H_2, H_1) - e^{itH_2} e^{-itH_1}] \phi \|_2^2 \\ & \leq 2 \left[\sum_{n=1}^\infty |c_n| \int_t^\infty |(e^{-isH^{n-1}} \phi, f_n)|^2 ds \right]^{1/2} \left[\sum_{k=1}^\infty |c_k| \int_t^\infty |(e^{-isH^{n-1}} \phi, g_n)|^2 ds \right]^{1/2} \end{aligned} \tag{17.21}$$

Dimostriamo che per ϕ in un insieme denso di $\Pi\mathcal{H}$ il termine a destra dell'equazione (17.21) è limitato.

Infatti si ha per ogni operatore autoaggiunto H con schiera spettrale $E(\lambda)$

$$\int_{-\infty}^\infty |(e^{-isH} \phi, f)|^2 ds \leq 2\pi \|\phi\|^2 \|f\|_2^2 \tag{17.22}$$

dove

$$\|\phi\|^2 = \operatorname{ess\,sup}_\lambda \frac{d(E(\lambda)\phi, \phi)}{d\lambda}$$

La (17.22) segue dal teorema di Parseval e dal fatto che

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-it\lambda} (d(E(\lambda)\phi, f)) dt$$

è la trasformata di Fourier di $\frac{d}{d\lambda}(E(\lambda)\phi, f)$.

Se $\|\phi\|_2 < \infty$ dalla (17.21) deduciamo

$$\|(W_{n,+} - W_n(t))\phi\|_2 \leq \|\phi\|^{1/2} (8\pi\|A\|_1)^{1/4} \eta(t, \phi)^{1/2} \quad 17.23$$

dove abbiamo posto

$$\eta(t, \phi) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} |c_k| \int_t^{\infty} |(e^{-isH_1} \phi, f_k)|^2 ds \leq 2\pi\|\phi\|^2 \|A\|_1$$

Da (17.23) e dalla disuguaglianza triangolare ricaviamo anche

$$\|(W_n(\tau) - W_n(t'))\phi\|_2 \leq \|\phi\|^{1/2} (2\pi\|A\|)^{1/4} [\eta(t', \phi)^{1/4} + \eta(\tau, \phi)^{1/4}] \quad 17.24$$

Possiamo adesso passare al limite $n \rightarrow \infty$.

poiché $\|A - A_n\| \rightarrow 0$, si ha convergenza in norma di e^{itH^n} ad e^{itH_2} e da (17.24)

$$\|(W(t) - W(\tau))\phi\|_2 \leq \|\phi\|^{1/2} (8\pi\|A\|_1)^{1/4} [\eta(t, \phi)^{1/2} + \eta(\tau, \phi)^{1/2}] \quad 17.25$$

Quest'ultima disuguaglianza dimostra che $\lim_{t \rightarrow \infty}$ esiste se $\|\phi\| < \infty$.

Notiamo ora che l'insieme delle $\phi \in \Pi\mathcal{H}$ per cui $\|\phi\| < \infty$ è denso in $\mathcal{H}_{1,ac}$.

poiché le $W(t)$ sono uniformemente limitate ne segue che il limite esiste per $\phi \in \mathcal{H}_{1,ac}$. Pertanto esiste $\lim_{t \rightarrow \infty} W(t) \Pi \equiv W_+$.

Analogamente si dimostra che esiste $W_-(H_2, H_1)$. Scambiando il ruolo di H_1 e H_2 risulta dimostrata anche l'esistenza di $W_{\pm}(H_1, H_2)$. Questo termina la dimostrazione del Teorema 17.7 a condizione che si sia dimostrata la Proposizione 17.8 che enunciamo ora.

♡

Proposizione 17.8

Se $H_2 - H_1 \equiv A$ è un operatore di rango uno per $Imz \neq 0$ allora gli operatori d'onda generalizzati $W_{\pm}(H_2, H_1)$ e $W_{\pm}(H_1, H_2)$ esistono e sono completi.

◇

Dimostrazione

Dividiamo la dimostrazione in alcuni passi.

a)

Come primo passo diamo la dimostrazione nel caso in cui lo spazio di Hilbert \mathcal{H} è lo spazio $L^2(R, dx)$, l'operatore H_1 è definito da $H_1 u(x) = xu(x)$ e l'operatore $A \equiv H_2 - H_1$ è l'operatore di rango uno definito da $(A u)(x) = (u, f) f(x)$ con $f(x)$ regolare, rapidamente decrescente per $x \rightarrow \pm\infty$.

Per dimostrare che in questo caso gli operatori d'onda $W_{\pm}(H_2, H_1)$ esistono, basta verificare che le condizioni sufficienti date nel Teorema 17.1 sono soddisfatte.

Si ha

$$\|A e^{-itH_1} u\|_2 = \|f\|_2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{-itx} u(x) \bar{f}(x) dx \right| \quad 17.26$$

Se $u(x)$ è regolare e decresce rapidamente all'infinito, la trasformata di Fourier di uf decresce rapidamente all'infinito, e quindi l'integrale in (17.26) è finito. poiché l'insieme delle funzioni $u(x)$ con le proprietà descritte è denso in $L^2(R, dx)$, le ipotesi del teorema 17.1 sono soddisfatte.

b)

Per generalizzare la dimostrazione al caso di $f \in L^2(R, dx)$ notiamo che utilizzando il Lemma 17.2 e la disuguaglianza di Schwarz si ha

$$\|W_+ u - W(t) u\|^2 \leq 2 \left[\int_t^\infty |(e^{-isH_1} u, f)|^2 ds \right]^{1/2} \left[\int_t^\infty |(e^{isH_1} W_+^* f, u)|^2 ds \right]^{1/2} \tag{17.27}$$

Questi integrali sono finiti, come si vede dal fatto che la disuguaglianza di Parseval provvede la stima

$$\int_{-\infty}^\infty |(e^{isH_1} W_+^* f, u)|^2 ds \leq 2\pi \|f\|^2 \|u\|_\infty^2$$

dove $\|u\|_\infty$ è finita perché u è limitata per ipotesi.

poiché W_+^* è isometrico possiamo maggiorare il secondo fattore con $C \|u\|_\infty$. Da (17.27) otteniamo

$$\begin{aligned} & \|W(\tau)u - W(t)u\|_2 \\ & \leq (8\pi)^{1/4} \|u\|_\infty^{1/2} \left(\left[\int_t^\infty |(e^{-isH_1} u, f)|^2 ds \right]^{1/4} + \left[\int_\tau^\infty |(e^{-isH_1} u, f)|^2 ds \right]^{1/4} \right) \end{aligned} \tag{17.28}$$

La disuguaglianza (17.28), che non fa riferimento agli operatori W_\pm e dipende solo dalla norma L^2 della funzione f , si estende per densità a tutte le funzioni $f \in L^2(R, dx)$.

c)

Il Lemma 17.8 rimane vero se H_1 è un operatore autoaggiunto in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} e $H_2\phi = H_1\phi + (f, \phi)f$ con $f \in \mathcal{H}$.

Per vedere questo, sia Π_1 la proiezione sullo spettro assolutamente continuo di H_1 . Poniamo $f = g + h$, $g = \Pi_1 f$.

Per ipotesi $g \in \mathcal{H}_{1,ac}$ e quindi g può essere rappresentato da una funzione $g(x)$. Consideriamo prima il caso in cui $g(x)$ sia regolare e decresca rapidamente all'infinito. Allora possiamo procedere come nel caso a), sostituendo f con g .

Nel caso $g(x)$ non sia regolare e non si annulli rapidamente all'infinito, si procede per approssimazioni, come nel caso b), visto che le stime di convergenza valgono per continuità su tutto $\mathcal{H}_{1,ac}$.

d)

Consideriamo il caso $H_2 = H_1 + A$, con A operatore di rango uno. Discutiamo prima il caso in cui \mathcal{H} consiste in $L^2(S, dx)$ con S un boreliano di R^1 e $H_1 u(x) = xu(x)$.

Dimostreremo anche in questo caso che $W_+(H_2, H_1)$ esiste.

Notiamo che \mathcal{H} può essere riguardato come un sottospazio di $\mathcal{H}' \equiv L^2(R, dx)$ ponendo $f(x) \equiv 0$ per $x \notin S$.

Sia H'_1 definito come estensione massimale dell'operatore di moltiplicazione per la coordinata x . Allora il sottospazio \mathcal{H} riduce H' e la riduzione coincide con H .

Sia $H'_2 = H'_1 + (\cdot, f)f$. Allora anche H'_2 è ridotto da \mathcal{H} e la riduzione di $e^{-itH'_2}$ e di $e^{-itH'_1}$ coincidono rispettivamente con e^{-itH_2} ed e^{-itH_1} .

Ma dalle considerazioni precedenti sappiamo che esiste $W'_+ = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-itH'_2} e^{itH'_1}$ e ne consegue per riduzione l'esistenza di $W_+(H_2, H_1)$.

Ancora possiamo considerare il caso in cui lo spettro di H_1 non sia assolutamente continuo, considerano la decomposizione del vettore f come somma della sua proiezione sulla parte dello spettro di H_1 che è assolutamente continuo, come fatto sopra.

e)

Consideriamo infine il caso generale, senza ipotesi sulla struttura di H .

Sia H_1 un operatore autoaggiunto su di un spazio di Hilbert \mathcal{H} . Poniamo

$$H_2 \phi = H_1 \phi + (f, \phi)f, \quad f \in \mathcal{H} \tag{17.29}$$

Denotiamo con \mathcal{H}_0 il più piccolo sottospazio di \mathcal{H} che contiene f e riduce H_1 . Sia Π_0 il proiettore ortogonale su \mathcal{H}_0 .

Il sottospazio \mathcal{H}_0 può essere caratterizzato come la chiusura dell'insieme di elementi in \mathcal{H} che sono della forma $E_1(\lambda)f$ (per ogni λ reale $E_1(\lambda)$ è la schiera spettrale di H_1).

Ne segue che anche H_2 è ridotto da \mathcal{H}_0 e si ha

$$H_2 \Pi_0 u = H_1 \Pi_0 u + (\Pi_0 u, f), \quad f \in \mathcal{H}_0$$

Indichiamo con \mathcal{H}_0^\perp il sottospazio di \mathcal{H} ortogonale a \mathcal{H}_0 .

Il sottospazio \mathcal{H}_0^\perp riduce H_1 e anche H_2 , e per $u \in \mathcal{H}_0^\perp$ si ha $H_2 u = H_1 u$.

Per dimostrare l'esistenza di $W_+(H_2, H_1)$ è quindi sufficiente considerare solamente vettori in \mathcal{H}_0 e quindi ridursi al caso in cui $\mathcal{H}_0 \equiv \mathcal{H}$.

Sia

$$f = g + h \quad g = \Pi_1 f, \quad h = (I - \Pi_1)f \tag{17.30}$$

dove come precedentemente Π_1 è il proiettore sul sottospazio di assoluta continuità per H_1 .

Dalla costruzione che abbiamo effettuata deduciamo che $H_{1,ac}$ è sotteso dai vettori della forma $E(\lambda)g$.

Ne segue che $H_{1,ac}$ è la chiusura dei vettori della forma

$$\phi(H_1)g = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\lambda) dE(\lambda) \right] g \tag{17.31}$$

con ϕ boreliana. Ma si ha

$$(\phi_1(H_1), \phi_2(H_1)) = \int_S (\psi_1(\lambda), \psi_2(\lambda)) d\lambda$$

dove per $k = 1, 2$

$$\psi_k(\lambda) \equiv \phi_k(\lambda) \rho(\lambda)^{1/2}, \quad \rho(\lambda) = \frac{d((E_1(\lambda) g, g))}{d\lambda} \quad 17.32$$

e abbiamo indicato con S il boreliano composto da tutti i λ per i quali $\frac{d((E_1(\lambda) g, g))}{d\lambda}$ esiste ed è positiva (ricordare che $g \in \mathcal{H}_{1,ac}$).

Se ϕ varia su tutte le funzioni misurabili limitate, $\psi(\lambda)$ sottende un insieme denso in $L^2(S)$. Pertanto possiamo identificare $\mathcal{H}_{1,ac}$ con $L^2(S)$ mediante la corrispondenza $\phi(H_1) : g \rightarrow \psi$.

In questa realizzazione di $H_{1,ac}$ l'operatore H_1 è rappresentato dalla moltiplicazione per x .

Ci siamo così ricondotti ai casi particolari considerati precedentemente. Questo termina la dimostrazione della Proposizione 17.8.

♡

Nota 17.7

Il teorema 17.7 è importante perché dimostra che la teoria dello scattering descrive anche il moto asintotico in un cristallo con impurità localizzate.

Basta prendere

$$H_1 \equiv -\Delta + V_{per}, \quad H_2 = H_1 + W(x) \quad 17.33$$

con $V_{per} \in L^2_{loc}$ e W tale che $|W(x)|^{1/2}(1 - \Delta)^{-1}$ sia di classe traccia.

Sotto le ipotesi fatte su H_1 lo spettro di H_1 è assolutamente continuo (e composto in generale da *bande*).

Pertanto anche in questo caso gli operatori d'onda W_{\pm} esistono e sono completi (il loro dominio è l'intero spazio di Hilbert e il loro codominio è il sottospazio di assoluta continuità per H_2).

Inoltre l'operatore di scattering è unitario.

♣

Nota 17.8

Vedremo analizzando la teoria dello scattering indipendente dal tempo che l'ipotesi $H_2 - H_1 \in J_1$ (di classe traccia) può essere sostituita con l'ipotesi più debole $(H_2 - H_1) \in J_2$ (di Hilbert-Schmidt).

Per questo è sufficiente ad esempio che $V \in L^1 \cap L^2$.

♣

È conveniente generalizzare il risultato precedente e considerare l'esistenza degli operatori W_{\pm} per hamiltoniane che siano funzioni opportune di H_1 e H_2 . Questo porterà a condizioni più generali sotto le quali esiste $W_{\pm}(H_2, H_1)$.

Una classe di funzioni permesse si può ricavare utilizzando in modo opportuno il seguente lemma; la relazione con il problema in esame sarà evidente nel corso della dimostrazione.

Lemma 17.9

Sia $\phi(\lambda)$ una funzione su R a variazione localmente limitata, con la proprietà che sia possibile suddividere R in un numero finito di sottointervalli aperti I_k (escludendo quindi un numero finito di punti) tali che in ciascun I_k la funzione ϕ sia differenziabile con derivata prima continua e positiva.

Allora per ogni $w \in L^2(R, dx)$ si ha per ogni $s > 0$

$$2 \pi \|w\|_2^2 \geq \int_0^\infty \left| \text{l.i.m.} \int_{-\infty}^\infty e^{-it\lambda - is\phi(\lambda)} w(\lambda) d\lambda \right|^2 dt \quad 17.34$$

dove l.i.m. sta ad indicare il limite in media.

Inoltre il termine a destra converge a 0 per $s \rightarrow \infty$.

◇

Dimostrazione

Sia X l'operatore su $\mathcal{H} \equiv L^2(R)$ dato da $X u(x) = x u(x)$ e indichiamo con \mathcal{F} la trasformata di Fourier.

Il termine a destra in (17.34) è uguale a

$$2 \pi \int_0^\infty |\xi_+ \mathcal{F} e^{-is\phi(X)} w|^2 dt$$

dove abbiamo indicato con ξ_+ la funzione indicatrice del semiasse positivo

La disuguaglianza in (17.34) è quindi ovvia, e la convergenza a zero è equivalente a $s - \lim_{t \rightarrow \infty} \xi_+ \mathcal{F} e^{-is\phi(X)} = 0$.

Ne segue che possiamo limitarci a dimostrare la convergenza a zero per funzioni che appartengono a un dominio di essenziale autoaggiuntezza per X , e in particolare a funzioni indicatrici di intervalli finiti.

Possiamo inoltre considerare solo intervalli (a, b) in cui la funzione ϕ è differenziabile con continuità. Allora si ha

$$v(t, s) \equiv \int_a^b e^{-it\lambda - is\phi(\lambda)} d\lambda = i \int_a^b (t + s \phi'(\lambda))^{-1} \frac{d}{d\lambda} e^{-it\lambda - is\phi(\lambda)} d\lambda \quad 17.35$$

Se $t, s > 0$ la funzione $\psi(\lambda) \equiv (t + s \phi'(\lambda))^{-1}$ è positiva e a variazione limitata, per le ipotesi che abbiamo fatto sulla funzione ϕ .

La sua variazione totale in $[a, b]$ soddisfa

$$\int_a^b |d\psi(\lambda)| \leq M \frac{s}{(t + c s)^2} \leq \frac{M}{c(t + c s)}$$

dove M è la variazione totale di $\phi'(\lambda)$ in $[a, b]$ e c è il minimo valore che assume $\phi'(\lambda)$ nello stesso intervallo.

Integrando per parti il termine a destra nella (17.35) si ottiene

$$|v(t, s)| \leq \psi(a) + \psi(b) + \int |d\psi(\lambda)| \leq \frac{2c + M}{c(t + cs)}$$

Ne segue

$$\int_0^\infty |v(t, s)|^2 dt \leq \frac{(2c + M)^2}{c^3 s}$$

♡

Utilizzando il Lemma 17.9 dimostriamo ora il seguente *principio di invarianza*.

Teorema 17.10 (principio di invarianza)

Siano H_2, H_1 operatori autoaggiunti con $H_2 - H_1 \in J_1$. Sia ϕ una funzione su R con le proprietà descritte nel Lemma 17.9. Allora gli operatori d'onda generalizzati $W_\pm(\phi(H_2), \phi(H_1))$ esistono, sono completi e sono indipendenti da ϕ .

In particolare essi sono tutti uguali a $W_\pm(H_2, H_1)$ come si vede prendendo $\phi(\lambda) = \lambda$.

◇

Dimostrazione

Notiamo che abbiamo dimostrato precedentemente che posto $A \equiv H_2 - H_1$

$$\|W_+ u - W(t) u\|_2 \leq \|u\| (8\pi \|A\|_1)^{1/2} \tag{17.36}$$

per u nel sottospazio di assoluta continuità per H_2 , dove $\|A\|_1$ è la norma di A in classe traccia e

$$\|u\|^2 = \text{ess sup}_\lambda \frac{d(E(\lambda)u, u)}{d\lambda}$$

Ponendo $v \equiv e^{-is\phi(H_1)} u$, notiamo che $\|v\| = \|u\|$.

Ponendo $t = 0$ da (17.36) otteniamo

$$\|(W_+ - 1)e^{-is\phi(H_1)} u\| \leq \|u\|^{1/2} (8\pi \|A\|_1)^{1/4} \eta(0, e^{-is\phi(H_1)} u)^{1/4} \tag{17.37}$$

con

$$\eta(0, e^{-is\phi(H_1)} u) = \sum_k |c_k| \int_0^{+\infty} |(e^{-itH_1 - is\phi(H_1)} u, f_k)|^2 dt \tag{17.38}$$

Gli integrali in (17.37) e (17.38) hanno la stessa forma degli integrali (17.34) del lemma precedente., se sostituiamo

$$w(\lambda) \rightarrow \frac{d(E_1(\lambda), u, f_k)}{d\lambda}$$

(notare che questa funzione è in L^2 e ha norma minore o uguale a $\|u\|$).
 Per il Lemma 17.9 ciascun termine nella somma in (17.38) converge a zero
 quando $s \rightarrow \infty$.

Siccome la serie è maggiorata uniformemente in s dalla serie convergente $\sum_k |c_k| \|u\|^2 \equiv \|A\|_1 \|u\|^2$, ne segue che l'intera serie converge a zero.

L'insieme delle u tali che $\|u\| < \infty$ è denso in $\Pi_1 H$ e quindi

$$s - \lim_{s \rightarrow \infty} (W_+ - 1) e^{-is\phi(H_1)} \Pi_1 = 0 \quad 17.39$$

Ma $e^{is\phi(H_1)} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-is\phi(\lambda)} d\lambda$. Ne segue

$$W_+ e^{-is\phi(H_1)} = e^{-is\phi(H_2)} W_+$$

Moltiplicando a sinistra (17.38) per $e^{is\phi(H_2)}$ si ottiene

$$s - \lim_{s \rightarrow \infty} e^{is\phi(H_2)} e^{-is\phi(H_1)} \Pi_1 = W_+ \Pi_1 = W_+$$

Dunque avremo provato l'esistenza di $W_+(\phi(H_2), \phi(H_1))$ e anche che esso coincide con $W_+(H_2, H_1)$ se dimostriamo che lo spazio di assoluta continuità di $\phi(H_1)$ coincide con lo spazio di assoluta continuità di H_1 .

Per questo, utilizziamo le proprietà che abbiamo assunto per la funzione $\phi(\lambda)$.

Sia $\{F_1(\lambda)\}$ la famiglia spettrale associata a $\phi(H_1)$. Allora, per ogni boreliano di $S \in R$ si ha

$$F_1(S) = E_1(\phi^{-1}(S))$$

Se $|S| = 0$ per le proprietà della funzione ϕ abbiamo $|\phi^{-1}(S)| = 0$ e quindi $F_1(S)u = 0$ se $u \in H_{1,ac}$.

D'altra parte $F_1(\phi(S)) = E_1(\phi^{-1}[\phi(S)]) \geq E_1(S)$.

Se $|S| = 0$ allora $|\phi(S)| = 0$ e quindi, se u è assolutamente continuo rispetto a $\phi(H_1)$ si ha

$$|E_1(S) u| \leq |F_1(\phi(S)) u| = 0$$

Questo dimostra che lo spettro assolutamente continuo di H_1 coincide con lo spettro assolutamente continuo di $\phi(H_1)$ e termina la dimostrazione del Teorema 17.10.

♡

Specializzando la funzione ϕ otteniamo utili criteri sufficienti per l'esistenza degli operatori d'onda e per la completezza asintotica. In particolare

Teorema 17.11 (Birman, de Granges, Kato [K80])

1) Siano H_2 e H_1 operatori strettamente positivi su uno spazio di Hilbert H .

Se per qualche $\alpha > 0$ la differenza $H_2^{-\alpha} - H_1^{-\alpha}$ è di classe traccia, allora gli operatori d'onda $W_{\pm}(H_2, H_1)$ esistono, sono completi e coincidono con $W_{\mp}(H_2^{-\alpha}, H_1^{-\alpha})$.

2) Siano H_2, H_1 operatori autoaggiunti. Se $(H_2 - z)^{-1} - (H_1 - z)^{-1} \equiv A$ è di classe traccia per qualche $z, \Im z \neq 0$ (e quindi, per le identità di risolvente, per tutti i valori di z che stanno nell'insieme risolvente sia di H_1 , che di H_2) allora gli operatori d'onda generalizzati $W_{\pm}(H_2, H_1)$ esistono e sono completi.

◇

Dimostrazione

Dimostriamo solo il punto 1). La dimostrazione di 2) procede secondo la stessa linea. Sia γ il minore tra gli estremi inferiori degli spettri di H_2 e H_1 . Consideriamo la funzione $\phi(\lambda)$ definita come $\phi(\lambda) = -\lambda^{-\frac{1}{\alpha}}$ per $\lambda \geq \gamma$, e $\phi(\lambda) = \lambda$ per $\lambda < \gamma$.

E' facile vedere che questa funzione soddisfa i requisiti del Lemma 17.9.

♡

Utilizziamo ora il teorema 17.11 per dimostrare la completezza asintotica dell'operatore d'onda nel caso

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3), \quad H_1 = -\Delta, \quad H_2 = H_1 + V$$

con V operatore di moltiplicazione per una funzione $V(x) \in L^1 \cap L^2$.

Lo facciamo utilizzando un caso particolare del seguente Teorema

Teorema 17.12 (Kato)

Sia H_1 autoaggiunto e limitato dal basso. Sia V un operatore simmetrico relativamente limitato rispetto ad H_1 con stima minore di uno.

Supponiamo che V possa essere scritto nella forma $V = V_1 V_2$ e che $V_k (H_1 + z)^{-1}$, $k = 1, 2$ sia di classe Hilbert-Schmidt per z negativo e minore dell'estremo inferiore dello spettro di H_1 .

Allora gli operatori d'onda $W(H_2, H_1)$ e $W(H_1, H_2)$ esistono e sono completi.

◇

Dimostrazione

Poiché sotto le ipotesi fatte sia H_1 che H_2 sono limitati dal basso, non vi è perdita di generalità nell'assumere che entrambi siano strettamente positivi e abbiano spettro separato da zero, e quindi si può scegliere $z = 0$.

Per ipotesi si ha $V_k H_1^{-1} \in J_2$ per $k = 1, 2$.

A questa classe appartiene pure l'operatore $V_k H_2^{-1}$ poiché J_2 è un ideale in $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ e l'operatore $(H_1 + c I) (H_2 + c I)^{-1}$ è limitato.

Si ha

$$\frac{1}{H_2} - \frac{1}{H_1} = \frac{1}{H_2} V \frac{1}{H_1} = \frac{1}{H_2} V_1 V_2 \frac{1}{H_1} \in J_1$$

e quindi l'asserto segue dal teorema 17.11.

♡

Nota 17.9

Il Teorema 17.12 può essere utilizzato per dimostrare la completezza asintotica nel caso $V \in L^1 \cap L^2$.

Notiamo che $V \in L^2(\mathbb{R}^3)$ implica che V è infinitesimo rispetto a $-\Delta$.

Pertanto per applicare il Teorema 17.12 basta dimostrare che $V(-\Delta+c)^{-1} \in J_2$ per $c > 0$.

Il nucleo integrale di questo operatore è

$$|V(x)|^{1/2} \frac{e^{-c|x-y|}}{4\pi|x-y|}$$

e questo è un nucleo di tipo Hilbert-Schmidt poiché

$$\int \int |V(x)| e^{-2c|x-y|} |x-y|^{-2} dx dy \leq \int |V(x)| dx \int e^{-2|y|} |y|^{-2} dy < \infty$$



Studiamo ora brevemente il problema della dipendenza di $W_{\pm}(H_2, H_1)$ da H_2 e H_1 . Dimostriamo che vi è continuità almeno per perturbazioni di classe traccia.

Teorema 17.13

Siano H_2 e H_1 autoaggiunti e tali che esistano $W_{\pm}(H_2, H_1)$.

Allora esistono e sono completi per ogni $A \in J_1$ gli operatori d'onda $W_{\pm}(H_2 + A, H_1)$ e $W_{\pm}(H_2, H_1 + A)$ e quando A converge a zero in J_1 si ha, nel senso della convergenza forte

$$W_{\pm}(H_2 + A, H_1) \rightarrow W_{\pm}(H_2, H_1), \quad W_{\pm}(H_2, H_1 + A) \rightarrow W_{\pm}(H_2, H_1)$$



Dimostrazione

L'esistenza segue dal teorema 17.7. Inoltre, dalla chain rule si ha

$$W_{\pm}(H_2 + A, H_1) = W_{\pm}(H_2 + A, H_2) W_{\pm}(H_2, H_1)$$

Quindi è sufficiente dimostrare l'asserto nel caso speciale $H_2 = H_1$.

D'altra parte dalle stime fatte nel corso della dimostrazione del teorema 17.7 risulta

$$\|W_{\pm}(H_1 + A, H_1)u - u\| \leq \|u\|(4\pi\|A\|_1)^{1/2}$$

L'asserto del teorema segue allora dal fatto che l'insieme $\{u : \|u\| < \infty\}$ è denso in $\Pi_1 \mathcal{H}$.



Risultati più forti di continuità si possono ottenere dalle condizioni di esistenza di $W_{\pm}(H_2, H_1)$ date dal Teorema 17.11.

Utilizzando questo teorema si può dimostra ad esempio che se per uno $z_0 \notin R$ si ha

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(H_2 + A_n - z_0)^{-1} - (H_2 - z_0)^{-1}\| = 0$$

allora $s - \lim W_{\pm}(H_2 + A_n, H_1) = W_{\pm}(H_2, H_1)$.

Per un'approfondita analisi della completezza in teoria quantistica dello scattering si può utilmente consultare [Ag75]

17.2 TEORIA DELLO SCATTERING: FORMULAZIONE INDIPENDENTE DAL TEMPO

La teoria dello scattering come è stata presentata finora prende il nome di *teoria (dello scattering) dipendente dal tempo* poiché tutte le definizioni e gli enunciati dei teoremi si riferiscono esplicitamente all'evoluzione temporale.

Questa è una formulazione naturale, ma ne esiste un'altra, storicamente precedente, detta *teoria (dello scattering) indipendente dal tempo* che è centrata sull'analisi della relazione tra le autofunzioni generalizzate degli operatori H_2 e H_1 .

Per *autofunzione generalizzata* di un operatore autoaggiunto H definito su un dominio denso in $L^2(R^d)$ relativa *all'autovare generalizzato* intenderemo sempre una funzione $\psi_E(x)$ che soddisfa $H\psi = E\psi$ ma *non è in $L^2(R^d)$* .

Questa teoria provvede teoremi d'esistenza e completezza degli operatori d'onda sotto condizioni sostanzialmente più deboli sul potenziale V nel caso $H_2 = -\Delta + V$, $H_1 = -\Delta$.

Poiché la teoria indipendente dal tempo è meno intuitiva sarà necessario dare una connessione tra le due teorie; questo chiarirà il ruolo delle risolventi $(H_k - \lambda)^{-1}$, $k = 1, 2$ nell'analisi dell'esistenza degli operatori d'onda.

Nella teoria dello scattering stazionaria gli operatori d'onda $W_{\pm}(H_2, H_1)$ vengono costruiti come soluzioni di opportune equazioni funzionali.

Per determinarle conviene partire dalla formulazione dipendente dal tempo.

Tornando alla definizione di $W_{\pm}(H_2, H_1)$ data precedentemente, estendiamo la definizione degli operatori d'onda sostituendo il limite $t \rightarrow \infty$ con un limite debole nel senso di Abel.

Definiamo quindi

$$\begin{aligned} W'_+ &\equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T e^{-2\epsilon t} 2\epsilon e^{itH_2} e^{-itH_1} \Pi_1 dt \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T 2\epsilon e^{-\epsilon t + itH_2} e^{-\epsilon t - itH_1} \Pi_1 dt \end{aligned} \quad 17.40$$

(sottointendiamo gli indici 1 e 2).

Se esiste W_+ esiste pure W'_+ e i due operatori coincidono.

Questo si dimostra facilmente notando che, poiché gli operatori sono unitari, se esiste W_+ per ogni $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$, sostituendo in

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T e^{-2\epsilon t} e^{itH_2} e^{-itH_1} \phi$$

l'estremo inferiore 0 con un numero S arbitrariamente grande, la differenza

$$\epsilon \lim_{T \rightarrow \infty} \int_S^T e^{-2\epsilon t} e^{itH_2} e^{-itH_1} \Pi_1 dt - \lim_{t \rightarrow \infty} e^{itH_2} e^{-itH_1} \Pi_1 dt$$

risulta infinitesima in ϵ .

Ma potrebbe esistere W'_+ e non esistere W_+ .

Ricordiamo adesso la relazione tra il gruppo ad un parametro di operatori unitari e^{-itH} e la risolvente dell'operatore (autoaggiunto) H .

Nell'ipotesi che H sia limitato dal basso, utilizzando la risoluzione spettrale di H si ha per λ reale e strettamente minore di m ogni $\epsilon > 0$

$$i(H - \lambda + i\epsilon)^{-1} = \int_0^\infty e^{-\epsilon t} e^{it(H-\lambda)} dt$$

Da (17.40) utilizzando la relazione di Parseval tra trasformate di Fourier, si ottiene quindi

$$W'_+ = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{2\epsilon}{2\pi} \int_{-\infty}^0 (H_2 - \lambda - i\epsilon)^{-1} (H_1 - \lambda + i\epsilon)^{-1} \Pi_1 d\lambda \quad 17.41$$

Conviene riscrivere (17.41) in una forma più conveniente prima di prendere il limite $\epsilon \rightarrow 0$.

Sia $R(z) \equiv (H - z)^{-1}$ la risolvente dell'operatore H e sia $E(\lambda)$ la sua famiglia spettrale.

Allora si ha per definizione, posto $z = \lambda + i\epsilon$

$$\begin{aligned} R(\bar{z})R(z) &= \int_{-\infty}^\infty \frac{dE(\mu)}{(\mu - \bar{z})(\mu - z)} \\ &= \int_{-\infty}^\infty \frac{dE(\mu)}{(\mu - \lambda)^2 + \epsilon^2} = \delta_\epsilon(\mu - \lambda) \end{aligned} \quad 17.42$$

con

$$\delta_\epsilon(\mu - \lambda) \equiv \frac{\epsilon}{(\lambda - \mu)^2 + \epsilon^2}$$

La difficoltà nella (17.41) sta nel fatto che il limite della risolvente di H_2 è preso dal semipiano superiore mentre quello della risolvente di H_1 viene preso dal semipiano inferiore.

Notando che per $\epsilon \neq 0$ si ha

$$(H_2 - \lambda + i\epsilon)^{-1}(H_2 - \lambda - i\epsilon)^{-1}(H_2 - \lambda + i\epsilon)(H_1 - \lambda + i\epsilon)^{-1} = (H_2 - \lambda - i\epsilon)^{-1}(H_1 - \lambda + i\epsilon)^{-1}$$

da (17.42) , (17.41) si ottiene

$$W'_+ = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_{\epsilon}(H_2 - \lambda) G(\lambda + i\epsilon) d\lambda \Pi_1 \tag{17.43}$$

dove abbiamo posto

$$G(z) = (H_2 - z)(H_1 - z)^{-1}$$

Quando $\epsilon \rightarrow 0$ la funzione δ_{ϵ} tende (nel senso debole delle misure) alla misura δ nell'origine e quindi , in senso debole

$$W'_+ = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2(\lambda)}{d\lambda} G(\lambda + i0) d\lambda \Pi_1$$

Nella corrispondente formula per W'_- il fattore $G(\lambda + i0)$ è sostituito con $G(\lambda - i0)$

Ne consegue che, almeno formalmente,

$$W'_+ = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE_2(\lambda)}{d\lambda} G(\lambda \pm i0) d\lambda \Pi_1 \tag{17.44}$$

Notiamo che la derivata della misura spettrale esiste solo in generale nel senso delle distribuzioni.

D'altra parte il valore al bordo di $G(z)$ potrebbe non esistere nel senso delle funzioni differenziabili e quindi l'integrale (nel senso di Bochner) in (17.44) non sarebbe definito.

Sotto opportune ipotesi sul potenziale è possibile dimostrare che $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(\lambda \pm i\epsilon)$ è un operatore continuo *come applicazione tra spazi di funzioni* K_1 e K_2 *diversi tra loro*, ad esempio tra lo spazio $L^2(\mathbb{R}^3, d\mu_1)$ e $L^2(\mathbb{R}^3, d\mu_2)$ dove $d\mu_k = (|x| + 1)^{c(k)} dx$ con $c_1 < 1$, $c_2 > 1$ scelti opportunamente.

Questo risultato va sotto il nome di *teorema (o principio) dell'assorbimento limite* .

Vedremo nel cap. 18 come sia possibile ottenerlo facendo uso delle proprietà del risolvente del laplaciano.

Ne segue che inizialmente gli operatori W'_{\pm} sono limitati da K_1 a K_2 .

Nella teoria stazionaria dello scattering, la (17.44) *viene posta come definizione* di operatore d'onda e successivamente si dimostra che l'operatore così definito può essere esteso ad un isometria parziale nella topologia di \mathcal{H} che soddisfa le proprietà di cui gode l'operatore d'onda che abbiamo definito nella teoria dipendente dal tempo.

Sotto ipotesi molto generali sulla coppia H_2 e H_1 si dimostra che W'_\pm possono essere estesi ad isometrie con dominio $\mathcal{H}_{1,ac}$ e codominio $\mathcal{H}_{2,ac}$ e che W'_\pm hanno la proprietà di intralacciare i gruppi e^{-itH_2} e e^{-itH_1} .

Sotto ipotesi più restrittive si dimostra che $W_\pm(H_2, H_1) = W'_\pm(H_2, H_1)$ (senza queste ulteriori ipotesi si è certi solamente dell'esistenza di $W'_\pm(H_2, H_1)$).

Operatori $W'_\pm(H_2, H_1)$ che soddisfano (17.44) si costruiscono *come soluzione di una opportuna equazione funzionale*.

Questa costruzione ha il pregio di prestarsi a metodi di soluzione iterativi e approssimati.

In questo schema, l'operatore W_\pm corrisponde ad una soluzione *in senso forte* dell'equazione funzionale mentre W'_\pm corrisponde ad una soluzione *debole*.

Naturalmente se la soluzione W_\pm esiste ed è unica, si ha $W'_\pm = W_\pm$.

Per trovare la forma dell'equazione cui soddisfa W'_\pm riprendiamo il caso in cui gli operatori W_\pm esistono.

Sia $H_2 = H_1 + A$. Dalla formula (17.13) si ottiene

$$W(\tau) - W(t) = i \int_t^\tau e^{isH_2} A e^{-isH_1} ds \quad 17.45$$

e analogamente, scambiando il ruolo di H_1 ed H_2

$$W(\tau)^{-1} - W(t)^{-1} = -i \int_t^\tau e^{isH_1} A e^{-isH_2} ds \quad 17.46$$

(se A è illimitato le (17.45), (17.46) vanno intese su un dominio opportuno).

Supponiamo che $W_+(H_2, H_1) \equiv s - \lim W(t) \Pi_1$ esista.

Moltiplicando (17.46) a sinistra per $-W_+$, scegliendo $t = 0$, prendendo il limite $\tau \rightarrow \infty$ e utilizzando $e^{-itH_2} W_+ = W_+ e^{-itH_1}$ si ottiene

$$W_+ - \Pi_1 = i \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_0^\tau e^{itH_1} A W_+ e^{-itH_1} ds \quad 17.47$$

dove il limite è inteso in senso forte se A è un operatore limitato, in senso debole altrimenti.

Per semplificare la notazione, conviene introdurre operazioni $\Gamma_{H_1}^\pm$ definite su $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ nel seguente modo

$$\Gamma_{H_1}^\pm A = i \lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_0^{\pm\tau} e^{itH_1} A e^{-itH_1} dt \quad A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \quad 17.48$$

quando entrambi i limiti esistano in senso forte o debole.

Con queste notazioni la (17.47) assume la forma (per semplicità omettiamo di scrivere in modo esplicito la dipendenza da H_2 e H_1 e scriviamo Γ_1 per Γ_{H_1})

$$W_+ = \Pi_1 + \Gamma_1^+ (A W_+) \quad 17.49_+$$

e analogamente

$$W_- = \Pi_1 + \Gamma_1^- (A W_-) \quad 17.49_-$$

La formulazione stazionaria della teoria dello scattering (che indicheremo per brevità come teoria stazionaria dello scattering) *assume* (17.49) $_{\pm}$ come equazioni fondamentali.

Dimostreremo che le soluzioni (deboli o forti) di queste equazioni, se esistono, hanno tutte le proprietà degli operatori d'onda generalizzati introdotti nell'ambito della teoria dello scattering dipendente dal tempo.

Nota 17.10

Nel caso $\mathcal{H} = L^2(R^3)$, $H_1 = -\Delta$ e A moltiplicazione per un funzione $V(x)$ le (17.49) $_{\pm}$ sono una versione operatoriale delle equazioni di Lippmann-Schwinger che permettono (sotto opportune condizioni sul potenziale V) di costruire le autofunzioni generalizzate dell'operatore $-\Delta + V$ appartenenti allo spettro continuo.



Per dimostrare che le W'_{\pm} soluzioni di 17.49 $_{\pm}$ coincidono con gli operatori d'onda W_{\pm} se questi esistono, notiamo innanzitutto che se $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ commuta con H , allora $A \in D(\Gamma^{\pm})$ implica che $B A$ e $A B$ sono in $D(\Gamma^{\pm})$ e si ha

$$\Gamma^{\pm}(B A) = B (\Gamma^{\pm}(A)), \quad \Gamma^{\pm}(A B) = (\Gamma^{\pm}(A)) B \quad 17.50$$

(omettiamo in pedice "1" perché consideriamo ora un generico operatore H .)

Abbiamo inoltre (consideriamo solo il caso di Γ^+ ; analoghi risultati valgono per Γ^-).

Lemma 17.14

Supponiamo che $A \in D(\Gamma^+)$ e sia $R \equiv \Gamma^+ A$. Allora si ha $R D(H) \subset D(H)$ e vale per ogni $u \in D(H)$ l'identità

$$A u = R H u - H R u$$

e inoltre $s - \lim_{t \rightarrow \infty} R e^{-itH} = 0$.



Dimostrazione

Da (17.48) moltiplicando a sinistra per e^{itH} e a destra per e^{-itH} si ha

$$R(t) \equiv e^{itH} R e^{-itH} = i \int_t^{\infty} e^{isH} A e^{-isH} ds \quad 17.51$$

Inoltre $\frac{dR(t)}{dt} = -ie^{itH} A e^{-itH}$ e pertanto se $u \in D(H)$

$$\frac{d}{dt} e^{itH} R u = -ie^{itH} A u + iR(t)e^{itH} H u$$

Questo dimostra che $e^{itH} R u$ è fortemente differenziabile in t ; quindi $R u \in D(H)$ e

$$\frac{d}{dt} e^{itH} R u = i e^{itH} H R u$$

Esplicitando la derivata e ponendo poi $t = 0$ si ottiene

$$H R u = -A u + R H u$$

che dimostra la prima parte del lemma.

La seconda parte segue facilmente da (17.51). ♡

Utilizzando il Lemma 17.14 dimostriamo ora che gli operatori d'onda W_{\pm} , quando esistono, sono soluzione di (17.49)-

Diamo la dimostrazione solamente nel caso in cui la perturbazione è un operatore limitato.

Teorema 17.15

Siano H_1 ed A autoaggiunti e A limitato.

Supponiamo che esista una soluzione $W_{\pm} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ di (17.49) $_{\pm}$. Allora gli operatori d'onda generalizzati esistono e $W'_{\pm}(H_1, H_1 + A) = W_{\pm}(H_1 + A, H_1)$ dove $W_{\pm}(H_2, H_1)$ è definito secondo le regole della formulazione dello scattering *dipendente dal tempo* . ◇

Dimostrazione

Poiché $W'_+ - \Pi_1 = \Gamma_1^+(A W'_+)$ dal lemma 17.12 segue su un opportuno dominio

$$(W'_+ - \Pi_1) H_1 u = -H_1 (W'_+ - \Pi_1) u = W'_+ H_1 u \quad 17.52$$

da cui si deduce

$$W'_+ H_1 \subset H_2 W'_+$$

Da questo segue per ogni z non reale

$$(H_2 - z)^{-1} W'_+ = W'_+ (H_1 - z)^{-1} \quad 17.53$$

su un opportuno dominio e quindi

$$e^{itH_2} W'_+ = W'_+ e^{itH_1} \quad t \in \mathbb{R}$$

Dal lemma 17.12 segue allora

$$s - \lim_{t \rightarrow \infty} (W'_+ - \Pi_1) e^{-itH_1} = 0$$

e quindi, moltiplicando a sinistra per e^{itH_2}

$$W'_+ = s - \lim_{t \rightarrow \infty} e^{itH_2} e^{-itH_1} \Pi_1 \equiv W_+ \quad 17.54$$

Un risultato analogo vale per W'_- . Questo dimostra che W'_+ può essere esteso ad un'isometria in \mathcal{H} e termina la dimostrazione del teorema 17.15.

♡

Abbiamo visto che nella formulazione stazionaria della teoria dello scattering gli operatori W'_\pm vengono definiti nel caso di scattering da un potenziale V come soluzioni dell'equazione

$$W'_\pm = I + \Gamma^\pm(VW'_\pm) \quad 17.55$$

Abbiamo utilizzato il fatto che H_0 ha spettro assolutamente continuo (che coincide con R^+) e abbiamo definito l'operatore Γ^\pm su una opportuna classe di operatori mediante

$$\Gamma^\pm A \equiv i \int_0^{\pm\infty} e^{itH_0} A e^{-itH_0} dt \quad 17.56$$

dove $H_0 = -\Delta$.

Le equazioni (17.55) con A definito da (17.48) costituiscono la base della teoria dello scattering nella sua formulazione indipendente dal tempo.

Esse possono essere risolte con varie strategie. Ad esempio si può cercare di utilizzare metodi di iterazione per risolvere l'equazione

$$X = I - \epsilon \Gamma^\pm(VX) \quad 17.57$$

per valori sufficientemente piccoli del parametro ϵ e poi dimostrare che la soluzione è continuabile in ϵ fino a $\epsilon = 1$.

Alternativamente si possono usare tecniche di punto fisso, per contrazione in alcuni casi, per compattezza in altri; in quest'ultimo caso l'eventuale unicità della soluzione va dimostrata separatamente.

Un metodo alternativo che non utilizza direttamente le proprietà degli operatori Γ^\pm risale a Friedrichs e porta a confrontare le autofunzioni generalizzate (corrispondenti allo spettro assolutamente continuo) dell'operatore $H = -\frac{1}{2m}\Delta + V$ con quelle dell'operatore $H_0 = -\frac{1}{2m}\Delta$ (abbiamo esplicitato la dipendenza dalla massa del punto materiale)

Questo metodo viene utilizzato in generale nei testi di Fisica Teorica che trattano la teoria dello scattering.

Il punto di partenza è ancora l'equazione (17.55), soddisfatta da W'_+ se questo operatore esiste

$$W'_+ = I + i \int_0^\infty e^{-itH_0} V W'_+ e^{itH_0} dt \quad 17.58$$

(analoghe considerazioni valgono per W'_-)

poiché vogliamo applicare gli operatori alle autofunzioni generalizzate di H_0 che non sono elementi di \mathcal{H} conviene interpretare (17.55) in senso debole, o equivalentemente considerare il limite per $\epsilon \rightarrow 0$ delle soluzioni dell'equazione

$$W'_+ = I + i \int_0^\infty e^{-itH_0} V W'_+ e^{itH_0 - \epsilon t} dt \quad 17.59$$

Le funzioni

$$\phi_k^0(x) \equiv \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ik \cdot x}$$

sono le autofunzioni generalizzate dell'operatore H_0 relative all'autovalore $\frac{k^2}{2m}$.
 Le autofunzioni generalizzate di H all'autovalore $\frac{k^2}{2m}$ (ricordare che lo spettro assolutamente continuo di H coincide con R^+) sono allora

$$\phi_k(x) = W_+ \phi_k^0 \tag{17.60}$$

A rigore questa equazione va risolta in senso debole (notare che $\phi_k^0 \notin L^2(R^3)$), ma la soluzione di (17.59) per $\epsilon > 0$ può essere estesa ad un'applicazione della classe di funzioni limitate e differenziabili; a sua volta quest'applicazione può essere continuata per $\epsilon \rightarrow 0$ sotto opportune condizioni sul potenziale V .
 Da (17.59) si ha

$$\phi_k(x) = \phi_k^0(x) + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} i \int_0^\infty (e^{-itH_0 + i\frac{k^2}{2m}t - \epsilon t} V \phi_k)(x) dt \tag{17.61}$$

e quindi

$$\phi_k(x) = \phi_k^0(x) - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(H_0 - \frac{k^2}{2m} - i\epsilon \right)^{-1} V(x) \phi_k(x) \tag{17.62}$$

(i limiti vanno intesi in senso debole).

L'equazione (17.62) prende il nome di *equazione di Lippmann-Schwinger*.

Se il potenziale è abbastanza regolare il limite in (17.62) può essere inteso in senso forte e l'equazione può essere riscritta nella forma

$$\phi_k(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ik \cdot x} - \frac{m}{2\pi} \int \frac{e^{i|k||x-y|}}{|x-y|} V(y) \phi_k(y) d^3y \tag{17.63}$$

Se il potenziale V è di corta portata (ad esempio $|V(x)| \leq C(1+|x|)^{-\alpha}$ dove $2\alpha > d+1$ e d è la dimensione dello spazio), si verifica che la soluzione $\phi_\lambda(x)$ dell'equazione stazionaria

$$-\Delta \phi(x) + V(x) \phi(x) = \lambda \phi(x)$$

ha la seguente forma asintotica per $|x| \rightarrow \infty$, con $\omega = \frac{x}{|x|}$

$$\phi_k(|x|, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\lambda^{1/2}(x, \omega)} + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} a(\phi, \omega, ; \lambda) |x|^{-\frac{(d-1)}{2}} \frac{e^{i\lambda^{1/2}|x|}}{|x|} + o(|x|^{-\frac{(d-1)}{2}}) \tag{17.64}$$

Considerando la funzione

$$\phi(t, x) \equiv e^{itH} \psi(x), \quad \psi(x) = \int \hat{\psi}(k) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ik \cdot x} dk \tag{17.65}$$

possiamo notare che il termine a destra in (17.64) è, a meno di termini di ordine superiore, la somma di un'onda piana e di un'onda sferica moltiplicata per un fattore $a(\phi, \omega; \lambda)$ che dipende da ω (direzione dell'onda piana entrante) e dalla direzione \hat{x} .

Questo fattore viene detto *ampiezza di scattering*.

Nella letteratura fisica l'ampiezza di scattering viene definita in termini delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger decomponendo queste soluzioni in onde sferiche *entranti* e onde sferiche *uscanti*

$$\phi(x) = r^{-\frac{d-1}{d}} [\gamma b_+(\omega) e^{i\lambda \frac{1}{2}|x|} - \bar{\gamma} b_-(\omega) e^{-i\lambda \frac{1}{2}|x|}] + o(|x|^{-\frac{d-1}{2}}) \quad 17.66$$

dove abbiamo posto $\gamma = e^{i\pi \frac{d-3}{4}}$.

Notare che la terminologia *entranti* e *uscanti* viene dallo studio dell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo.

L'esistenza di questa decomposizione può essere dimostrata con metodi di fase stazionaria sotto opportune condizioni, ad esempio che esista una costante ρ tale che

$$\int_{|x| < \rho} |\phi(x)|^2 dx < C\rho$$

Con queste notazioni la matrice \mathcal{S} viene definita come l'operatore che soddisfa $b_+(\omega) = (\mathcal{S}b_-)(\omega)$.

Notare che la matrice \mathcal{S} così definita è per $d \geq 2$ un operatore unitario su $L^2(S^{d-1})$.

Dalla teoria stazionaria dello scattering che abbiamo descritto si deduce

$$\mathcal{S}(\lambda) = I - 2\pi i \Gamma_0(\lambda)(V - VR(\lambda + i0)V)\Gamma_0^* \quad 17.67$$

dove $R(\lambda + i0) = (H - \lambda - i0)^{-1}$ e

$$(\Gamma_0(\lambda)\phi)(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda^{\frac{d-2}{4}} (2\pi)^{-2} \int_{R^d} e^{-i\lambda \frac{1}{2}(x,\omega)} \phi(x) dx \quad 17.68$$

Notiamo che nella teoria stazionaria dello scattering la (17.67) è la *definizione* della matrice di scattering.

Vedremo nel prossimo capitolo che il principio dell'assorbimento limite, valido per potenziali a corta portata, garantisce che $(H - \lambda - z)^{-1}$, $Im z \neq 0$ può essere continuato per $Im z \rightarrow \pm 0$ come operatore continuo e limitato $R(z)$ sullo spazio \mathcal{H}_β , $\beta > \frac{1}{2}$ a valori nello spazio $\mathcal{H}_{-\beta}$ dove

$$\mathcal{H}_\beta \equiv \left\{ f : \int_{R^d} (x^2 + 1)^\beta |f(x)|^2 dx \equiv \|f\|_\beta < \infty \right\} \quad 17.69$$

Questo prodotto può essere riguardato come prodotto di operatori limitati (tra spazi diversi). Utilizzando l'identità di risolvete l'operatore \mathcal{S} può anche essere riscritto

$$\mathcal{S} = I - 2\pi i \Gamma_0(\lambda) V \Gamma_0^*(\lambda) \quad 17.70$$

Da qui si può dedurre che la matrice S definita da (17.67) coincide con la matrice S definita nella teoria dello scattering dipendente dal tempo (quando questa definizione è ben posta).

Non diamo qui i dettagli di questa dimostrazione; in proposito si può vedere [Y].

Un'utile presentazione si può trovare su [AJS].

Partendo da queste espressioni, con ragionamenti in parte euristici, si ottengono la *sezione d'urto totale* e la *sezione d'urto differenziale*; quest'ultima permette di determinare, per un fascio di particelle che incidono con impulso approssimativamente uguale k_0 sulla regione in cui è localizzato il gradiente del potenziale, la percentuale di particelle che asintoticamente hanno un moto libero con impulso approssimativamente uguale a k .

Riprenderemo brevemente l'analisi di questo problema nell'Appendice B a questo capitolo.

17.3 TEORIA GEOMETRICA DELLO SCATTERING. TEOREMA R.A.G.E., METODO DI ENSS

Descriviamo ora brevemente una procedura che mette in risalto le proprietà degli stati asintotici.

Definizione 17.5

Sia ξ_{B_R} la funzione indicatrice della palla di raggio R centrata nell'origine. Definiamo *spazio degli stati di scattering* relativamente alla hamiltoniana H l'insieme

$$\mathcal{M}_\infty(H) \equiv \{ \phi \in \mathcal{H} : \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \|\xi_{B_R} e^{-itH} \phi\|_2 = 0 \quad \forall R > 0 \} \quad 17.71$$

◇

Questa definizione coglie il fatto che ci aspettiamo che se una particella si trova in uno stato di scattering la probabilità di rivelarla in una regione limitata dello spazio tende a zero quando $t \rightarrow +\infty$.

Definizione 17.6

Definiamo *spazio degli stati legati* l'insieme

$$\mathcal{M}_0(H) \equiv \{ \phi \in \mathcal{H} : \lim_{R \rightarrow \infty} \sup_t \|(I - \xi_{B_R}) e^{-itH} \phi\|_2 = 0 \} \quad 17.72$$

◇

Questa definizione coglie il fatto che riteniamo che uno stato legato sia caratterizzato fisicamente dal fatto che la possibilità di rilevarlo al di fuori di una palla di raggio R si annulla per $R \rightarrow \infty$.

Con queste definizioni l'esistenza e completezza degli operatori d'onda $W_{\pm}(H, H_0)$, con $H_0 = -\Delta$ e $H = H_0 + V$ possono essere lette nel seguente modo.

Proposizione 17.16 (Enss)

Sia $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ e supponiamo che lo spettro singolare di H sia vuoto.

Allora si ha

$$\mathcal{M}_\infty(H) = \mathcal{H}_{ac} \quad \mathcal{M}_0(H) = \mathcal{H}_p$$

◇

Nota 17.11

Se lo spettro della hamiltoniana è continuo ma non assolutamente continuo rispetto alla misura di Lebesgue, per tutti gli elementi $\phi \in \mathcal{H}_{con}$ vale la proprietà più debole

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \|\xi_{B_R} e^{-itH} \phi\| dt = 0$$

dove ξ_{B_R} è la funzione indicatrice della palla di raggio R .

Inoltre si ha, per ogni $\phi \in \mathcal{H}$

$$\frac{1}{T} \int_0^T \|\xi_{B_R} e^{-itH} \phi\| dt \leq f_R(T) \|(H + iI)\phi\| \quad \lim_{T \rightarrow \infty} f_R(T) = 0$$

Si può notare che questa è una proprietà di ergodicità.

♣

Enunciamo e dimostriamo un teorema (il teorema RAGE detto così dai nomi Ruelle, Amrein, Georgescu, Enss) che può servire ad illustrare la *teoria geometrica dello scattering* che verrà presentata nella restante parte di questo Capitolo e in quello successivo.

Premettiamo un teorema di Wiener che ha un interesse indipendente.

Ricordiamo che una misura è detta misura di Baire se è finita e carica su un insieme al più numerabile di punti.

Teorema (Wiener)

Sia μ una misura di Baire finita su \mathbb{R} .

Sia

$$F(t) = \int e^{-ixt} d\mu(x)$$

Allora

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T}^T |F(t)|^2 dt = \sum_{x \in \mathbb{R}} |\mu(\{x\})|^2 \quad 17.73$$

◇

Dimostrazione

Dalla definizione di F segue

$$\frac{1}{2T} \int_{-T}^T |F(t)|^2 dt = \int d\mu(x) h(T, x)$$

dove

$$h(T, x) \equiv \int d\mu(y) (T(x-y))^{-1} \sin((T(x-y)))$$

L'integrando è uniformemente limitato e per $T \rightarrow \infty$ converge a zero se $y \neq x$ e a 1 se $y = x$.

Per il teorema di convergenza dominata si ha quindi

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T |F(t)|^2 dt = \sum_{x \in R} |\mu(\{x\})|^2$$

♡

Enunciamo ora e dimostriamo il teorema RAGE

Teorema (RAGE)

Sia H un operatore autoaggiunto e sia C un operatore limitato tale che $C(H + iI)^{-1}$ sia un operatore compatto.

Allora, indicando con $\Pi_{cont}(H)$ il proiettore sullo spettro continuo di H ,

(a)

Esiste una funzione $\epsilon(T)$ tale che $\lim_{T \rightarrow \infty} \epsilon(T) \rightarrow 0$ e tale che per ogni $\phi \in D(H)$

$$\frac{1}{2T} \int_{-T}^T \|C e^{-itH} \Pi_{cont} \phi\|_2^2 dt \leq \epsilon(T) \|(H + i)\phi\|_2^2$$

(b)

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \|C e^{-itH} \Pi_{cont} \phi\|_2^s dt = 0, \quad s = 1, 2$$

(c)

$$\frac{1}{2T} \int_{-T}^T \|C e^{-itH} \Pi_{cont} \phi\|_2 dt \leq \epsilon(T)^{1/2} \|(H + i)\phi\|_2$$

◇

Dimostrazione

Notiamo che (b) segue da (a) per un semplice argomento di densità e che (c) segue da (a) e (b) utilizzando la disuguaglianza di Schwarz.

Ponendo $\psi = (H + iI)\phi$ si può assumere C compatto e sostituire $(H + i)\phi$ con ϕ .

Sia

$$\epsilon_C(T) \equiv \sup_{\phi \neq 0} \|\phi\|_2^{-2} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \|C e^{-itH} \Pi_{cont}(H) \phi\|^2 dt \quad 17.74$$

poiché $|\epsilon_C(T)| \leq \|C\|_{\mathcal{B}}$ basta dimostrare il teorema per C di rango uno.

Siccome $\Pi_{cont}(H)$ commuta con H basta dunque dimostrare che se $\Pi_{cont}(H)\psi = \psi$ allora

$$\frac{1}{2T} \int_{-T}^T |(\psi, e^{-itH} \phi)|^2 dt \leq \epsilon_C(T) \|\phi\|^2$$

con $\lim_{T \rightarrow \infty} \epsilon(T) = 0$.

Possiamo passare alla rappresentazione spettrale di H e scrivere

$$(\phi, e^{-itH} \phi) = \int e^{-itx} d\mu_\phi(x) \quad 17.75$$

Utilizzando ancora una volta la disuguaglianza di Schwarz si ha

$$\frac{1}{2T} \int_{-T}^T |(\phi, e^{-itH} \phi)|^2 dt \leq \|\phi\|_2^2 \delta(T) \quad 17.76$$

con

$$\delta(T) = \left(\int d\mu_\phi(x) d\mu_\phi(y) \left| \frac{\sin((x-y)T)}{(x-y)T} \right|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

La tesi del teorema RAGE segue allora dal teorema di Wiener.

♡

Il teorema RAGE provvede una *convergenza in media*; per l'esistenza dell'operatore d'onda è necessaria una *convergenza forte*, e questo richiede dimostrare che lo spettro essenziale di H sia assolutamente continuo.

Questo sarà il ruolo del *principio di assorbimento limite* che tratteremo nel Capitolo 18.

Diamo invece in questo capitolo gli elementi di un approccio alternativo alla teoria dello scattering quantistico.

Quest'approccio, iniziato da V. Enss, si basa su un'analisi *geometrica* delle proprietà per $t \rightarrow \pm\infty$ delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger per dati iniziali nel sottospazio di \mathcal{H} che corrisponde allo spettro assolutamente continuo della hamiltoniana H .

Poiché la variazione nel tempo delle autofunzioni consiste in un fattore di fase, se si dimostra che lo spettro di H è composto da una parte puntuale e da una parte assolutamente continua, si ha controllo per qualunque dato iniziale e questo corrisponde alla completezza asintotica degli operatori d'onda.

Possiamo illustrare le idee fondamentali del metodo di Enss considerando il caso del moto libero.

Abbiamo visto nel Capitolo 3 che una proprietà interessante della propagazione libera è il fatto che il comportamento per $t \rightarrow \pm\infty$ delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger libera 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.

Definiti, per $t \neq 0$ gli operatori $M(t)$ e $D(t)$ mediante

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

si ha (*Lemma 3.10*)

a)

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

b)

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

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

Con queste notazioni abbiamo dimostrato (*Teorema 3.10*) che, definendo per $t > 0$

$$(T(t)\phi)(x) = e^{\mp i \gamma(d)} e^{i \frac{x^2}{2t}} \left(\frac{1}{t}\right)^{\frac{d}{2}} \hat{\phi}\left(\frac{x}{t}\right)$$

gli operatori $T(t)$ sono unitari in $L^2(\mathbb{R}^d)$ e si ha per ogni $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ (vedi eq. 3.49)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|[U_0(t) - T(t)]\phi\|_2 = 0$$

◇

La distribuzione di probabilità nello spazio delle configurazioni tende per tempi *molto lunghi* a

$$\frac{1}{t^d} \left| \phi\left(\frac{x}{t}\right) \right|^2 dx = |\hat{\phi}(\xi)|^2 d\xi, \quad \xi = \frac{x}{t} \tag{3.50}$$

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 $|\hat{\phi}(\xi)|^2 d\xi$.

Notiamo anche che se il dato iniziale è gaussiano

$$\psi(0, x) = C e^{-\frac{|x-x_0|^2}{2} + ix \cdot p_0}$$

(la cui trasforma di Fourier è una gaussiana centrata in p_0), la soluzione al tempo t è ancora una gaussiana, centrata in $2p_0 t$ e con una varianza in x di ordine \sqrt{t} .

Scegliendo un nuovo sistema di coordinate (dipendente dal tempo) in cui le variabili spaziali sono scalate di un fattore t^α , $\frac{1}{2} < \alpha < 1$ (e quindi gli impulsi di un fattore $t^{-\alpha}$) si vede che la varianza nelle nuove coordinate spaziali tende a zero, mentre la distanza tra i centri di due gaussiane associate ad impulsi diversi p_1, p_2 cresce come $t^{1-\alpha}$. Su questa scala i due "pacchetti tendono per tempi lunghi a stringersi e a separarsi indefinitamente. Il cambiamento di coordinate che abbiamo descritto è generato dall'operatore (di dilatazione) $D = \frac{1}{2}(x \cdot p + p \cdot x)$.

Notiamo che in una teoria con interazioni descritte da un potenziale, in seguito a questa dilatazione la portata (range) del potenziale diventa più grande.

Questo ci induce a pensare che queste considerazioni avranno un ruolo semplice nel caso interagente solamente se il potenziale ha un decadimento sufficientemente rapido quando $|x| \rightarrow \infty$ (vedremo che una richiesta possibile è che $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |x|^{\frac{3}{2}} V(x) = 0$ ma daremo nel seguito una definizione precisa di *potenziali a corta portata*).

Consideriamo l'osservabile \hat{x}^2 ; utilizzando lo schema di Heisenberg dell'evoluzione temporale, nel moto libero essa soddisfa l'equazione

$$\frac{d^2}{dt^2} \hat{x}^2 = -[H_0, [H_0, \hat{x}^2]] \quad H_0 = -\Delta$$

Notiamo che

$$[H_0, \hat{x}^2] = -4iD, \quad D = \frac{1}{2}(\hat{x} \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \hat{x})$$

e che

$$[H_0, D] = -2iH_0, \quad [H_0, [H_0, \hat{x}^2]] = -8H_0 < 0$$

Quindi, per ogni funzione d'onda ϕ , indicando con $\bar{x}_\phi^2(t)$ la media di \hat{x}^2 al tempo t ,

$$\frac{d^2}{dt^2} \bar{x}_\phi^2(t) = 8(\phi, H_0 \phi) > 0$$

Ne segue che, asintoticamente in t ,

$$\bar{x}_\phi^2(t) \simeq Ct^2$$

Naturalmente, dalla forma esplicita della soluzione possiamo ottenere molte più informazioni. Il nostro scopo qui è analizzare il caso dell'equazione di Schrödinger senza potenziale per dedurre un metodo d'analisi che può dare informazioni anche nel caso $V \neq 0$ e che si può estendere al sistema a N -corpi.

Da questa breve analisi del caso $V = 0$ possiamo trarre le seguenti conclusioni: il gruppo delle dilatazioni gioca un ruolo importante, la propagazione asintotica è lineare nel tempo, il doppio commutatore $[H, [H, X]]$ è positivo (e strettamente positivo al di sopra della soglia dello spettro continuo).

A queste considerazioni, elementari se riferite al moto libero, si ispira il metodo elaborato da Enss $[E_1], [E_2], [E_3]$.

Successivamente questo metodo è stato posto in forma astratta da Mourre [M81] e ha un ruolo centrale nella teoria moderna dello scattering da potenziale (scattering a due corpi) in Meccanica Quantistica.

Il metodo è stato poi generalizzato alla trattazione di sistemi a N corpi [HS].

Noi descriveremo brevemente nel capitolo 18 il metodo di Mourre e la sua generalizzazione al problema di N corpi con interazioni a corta portata.

Qui descriviamo sommariamente il metodo di Enss, che mette in luce la parte essenziale della teoria dello scattering confrontando, a parità del dato iniziale, il comportamento asintotico della funzione d'onda nel caso del moto libero con il comportamento asintotico nel caso del moto in presenza di una forza di natura potenziale che si annulli abbastanza rapidamente per distanze spaziali grandi.

L'aspetto geometrico della propagazione garantisce che, per un insieme denso di stati nel sottospazio di assoluta continuità dello spettro di $-\Delta + V$ e per un'opportuna classe di potenziali V (*potenziali a corto range*), il comportamento per tempi lunghi in presenza del potenziale *differisce di poco da quello della propagazione libera* .

In particolare per tempi lunghi ed a grandi distanze spaziali *la maggior parte degli stati nello spettro assolutamente continuo di H è rappresentato da onde uscenti* da una sfera di raggio abbastanza grande al di fuori della quale è nullo (o è piccolo) il gradiente del potenziale, mentre la componente che rappresenta geometricamente *onde entranti* diventa trascurabile quando $t \rightarrow +\infty$.

Abbiamo visto che la propagazione libera può essere approssimata da una famiglia di applicazioni $\phi \rightarrow T_t(\phi)$ che, a parte un fattore di fase, sono dilatazioni isometriche dipendenti dal tempo $\phi(x) \rightarrow (\frac{1}{t})^{\frac{d}{2}} \widehat{\phi}(\frac{x}{t})$.

Ci si può aspettare, almeno per potenziali a corto range, che questa proprietà valga asintoticamente anche nel caso di una particella quantistica in interazione con una forza di natura potenziale.

In questo caso può essere utile far uso di un sistema di coordinate che si dilatano nel tempo.

Per valori positivi dello spettro del suo generatore il gruppo della dilatazioni è adeguato a descrivere regioni lontane nello spazio; è quindi naturale studiare il gruppo generato dalle traslazioni nel tempo e dalle dilatazioni.

I generatori di questi due gruppi non commutano, ed è naturale studiare il loro commutatore.

Nel caso libero si ha $[D, H_0] = 2iH_0$.

D'altra parte dalla conoscenza esplicita della soluzione, con il metodo di fase stazionaria si vede che la componente che corrisponde alla parte negativa dello spettro dell'operatore di dilatazione (corrispondente grosso modo alla componente che rappresenta onde entranti) diventa trascurabile per tempi molto lunghi.

Ci si può aspettare che queste considerazioni possano essere estese al caso interagente, e che anche in quel caso siano importanti le proprietà spettrali di $[D, H] = 2iH_0 + [D, V]$.

Si può notare che $e^{i\lambda D}V(x)e^{i\lambda D} = V(\frac{x}{\lambda})$ e quindi $i[D, V] = \frac{d}{d\lambda}V(\frac{x}{\lambda})$.

Questa proprietà deve naturalmente valere solo per gli *stati di scattering*; al contrario, per gli stati legati, ci aspettiamo che la componente *uscende* diventi trascurabile.

Nota 17.12

Queste considerazioni euristiche sono anche alla base del *teorema del flusso attraverso superfici* (che analizzeremo nell'appendice B a questo capitolo) che provvede un legame tra la teoria matematica dello scattering quantistico e le quantità che utilizzano per descrivere lo scattering la maggior parte dei testi di Fisica Teorica.



Per tradurre in formulazione precisa queste considerazioni euristiche è necessario dimostrare *stime a priori*.

Nella sua forma originaria il metodo di Enss fa uso di una decomposizione dello spazio di Hilbert che mima il più possibile la descrizione del comportamento delle traiettorie classiche nello spazio delle fasi (abbiamo visto che il moto libero su scala temporale grande riproduce il moto classico).

Questa decomposizione utilizza simultaneamente l'evoluzione libera e il gruppo delle dilatazioni cercando di mettere in luce il fatto che il supporto delle onde uscenti si ottiene (grosso modo) per dilatazione del supporto iniziale.

Lo scopo è dimostrare che ogni stato che appartenga allo spettro continuo di H è approssimabile per tempi sufficientemente remoti nel futuro da un'onda *uscende* e per tempi sufficientemente remoti nel passato da un'onda *entrante*.

E che questo implica sugli stati che appartengono allo spettro continuo di $H = H_0 + V$ che c'è equivalenza unitaria tra la propagazione secondo la hamiltoniana $H_0 + V$ e quella secondo H_0 .

Ma allora lo spettro continuo di H è assolutamente continuo e questo implica completezza asintotica.

Diamo ora qualche dettaglio del metodo di Enss; per un'esposizione più dettagliata rimandiamo ai lavori citati.

Notiamo che il metodo si basa sull'intuizione fisica che per il sistema di due particelle, una volta che sia "praticamente cessato l'effetto dell'interazione, le particelle si allontanano e il vettore che rappresenta la loro separazione cresce linearmente nel tempo e tende a diventare parallelo alla velocità relativa.

Si può vedere questo come una *localizzazione dello stato nello spazio delle fasi*, che diventa più debole con il crescere di t ma sufficiente per t molto grande per separare stati che corrispondono a quantità di moto diverse (la cui separazione "classica è proporzionale a t).

Un vantaggio del metodo “geometrico di Enss è la sua vicinanza alla descrizione fenomenologica del processo di scattering.

Questo dà una connessione più diretta con la terminologia utilizzata nella maggior parte dei testi di Fisica Teorica che trattano la teoria dello scattering (in particolare con la definizione di *sezione d’urto* e *sezione d’urto differenziale*) e permette conseguentemente dare stime esatte per queste grandezze in funzione del potenziale.

Per maggiori dettagli su queste stime si può vedere ad esempio [ES80]

A differenza dall’analisi che abbiamo fatto nella prima parte di questo capitolo, in cui abbiamo studiato il limite di $e^{itH} e^{-itH_0} \phi$ per tempi lunghi, vogliamo qui dimostrare che, se $P_{con} \phi = \phi$ (P_{con} è il proiettore sulla parte continua dello spettro di H) si ha

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \|(e^{-itH} - e^{-itH_0})e^{-i\tau H} \phi\|_2 = 0$$

Questa relazione indica che, dopo un tempo sufficientemente lungo, *la dinamica libera e quella con interazione hanno (praticamente) lo stesso effetto.*

Faremo l’ipotesi seguente sul potenziale (oltre a essere piccolo rispetto al laplaciano nel senso di Kato)

$$\|V(H_0 + I)^{-1} \xi(|x| > R)\|_{\mathcal{B}} \in L^1(R^+, dR) \quad 17.77$$

(come sempre, $\xi(A)$ è la funzione indicatrice dell’insieme A).

Da (17.77) segue

$$\lim_{R \rightarrow \infty} (1 + R) \|\xi(|x| \geq R) V(H - z)^{-1}\| = 0$$

Notare che la condizione (17.77) è più debole di

$$\exists \epsilon > 0 : \|V(H_0 + I)^{-1} \xi(|x| > R)\| \leq c(1 + R)^{-1-\epsilon} \quad 17.78$$

La condizione (17.77) garantisce che la differenza tra le risolventi è un operatore compatto; infatti si ha per $Im z \neq 0$

$$\frac{1}{H_0 - z} - \frac{1}{H - z} = \frac{1}{H_0 - z} (1 + |x|)^{-\frac{1}{2}} (1 + |x|)^{\frac{1}{2}} V \frac{1}{H - z}$$

e questo è il prodotto dell’ operatore limitato $\frac{1}{H_0 - z} (1 + |x|)^{-\frac{1}{2}}$ e dell’ operatore compatto A

$$A \equiv (1 + |x|)^{\frac{1}{2}} V(x) (H - z)^{-1}$$

Notiamo infatti che l’operatore $A^* A$ si può scrivere come $A^* A = B_{>R} + B_{<R}$ dove R è un numero positivo (che verrà preso arbitrariamente grande) e abbiamo posto

$$B_{>R} \equiv (H_0 - z)^{-1} \xi(|x| > R) V(x) (1 + |x|) V(x) (H - z)^{-1}$$

e analoga scrittura per $B_{<R}$ (come sempre, $\xi(\Omega)$ è la funzione indicatrice dell'insieme Ω .)

È facile verificare che $B_{<R}$ è un operatore compatto e la norma di $B_{>R}$ tende a zero quando $R \rightarrow \infty$.

Questo dimostra che A^*A è un operatore compatto e quindi lo è anche A .

Descriviamo ora i punti salienti della strategia seguita nel metodo di Enss.

Dal teorema di Ruelle, che enunceremo tra poco, sappiamo che la funzione che corrisponde ad ogni stato nello spettro continuo di H esce *in media nel tempo* da qualunque regione finita dello spazio.

Per tempi grandi utilizziamo una partizione in stati entranti e uscenti data dalla decomposizione spettrale dell'operatore che genera il gruppo delle dilatazioni.

La parte *uscente* appartiene (modulo un termine che convergerà a zero per $t \rightarrow \infty$) alla parte positiva dello spettro dell'operatore D .

Dimostreremo che la parte uscente per tempi molto grandi non interagisce (quasi) più con il potenziale (perché questo è di corta portata) e quindi su questi stati l'operatore Ω_- differisce di poco dall'identità.

La rimanente parte (*entrante*) diventa asintoticamente ortogonale all'intero stato; da qui si deduce che lo stato non può essere ortogonale al codominio di Ω_- e pertanto che il codominio di Ω_- è tutto il sottospazio che corrisponde allo spettro continuo di H .

D'altra parte abbiamo notato che il codominio di Ω_- è contenuto nel sottospazio che corrisponde allo spettro assolutamente continuo di H . Ne segue che lo spettro singolare continuo è vuoto e c'è completezza asintotica.

Diamo qualche dettaglio.

Ricordiamo che il teorema di Ruelle assicura che se l'operatore $\xi(|x| < R)(H + iI)^{-1}$ è compatto per ogni R , allora se ϕ appartiene allo spettro continuo di H si ha

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \|\xi(|x| < R)e^{itH}\phi\|_2 = 0 \quad \forall R < \infty \quad 17.80$$

Dimostreremo che se vale (17.80) lo stato ϕ è uno stato di scattering, appartiene cioè al codominio di Ω_- .

L'osservazione cruciale è che utilizzando la definizione di risolvente e con un procedimento diagonale si può tradurre (17.80) nell'affermazione che

$$\int_{-R}^R dt \|\xi(|x| < R)e^{-i(t+\tau)H}(H + iI)\phi\|_2 \quad 17.81$$

tende a zero *in media* per $\tau \rightarrow \infty$.

Ne segue che è possibile trovare una successione di tempi τ_n tali che

$$\phi_n = e^{-i\tau_n H}\phi \quad 17.82$$

rappresenti una successione di funzioni d'onda localizzate sempre più lontano dal supporto essenziale del potenziale. Infatti

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\xi(|x| < n)e^{-i\tau_n H} \phi\|_2 = 0$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-n}^n dt \|\xi(|x| < n)e^{-i(t+\tau_n)H} (H + iI)^{-1}\|_2 = 0 \quad 17.83$$

D'altra parte nell'intervallo (τ_n, τ_{n+1}) , se τ_n è abbastanza grande e questo intervallo temporale è non troppo grande rispetto a τ_n la propagazione differisce poco dalla propagazione libera, e la funzione d'onda non può perdere la sua proprietà di essere localizzata lontano dal supporto del potenziale.

Per rendere quest'analisi rigorosa occorrono stime accurate della convergenza nello spazio e nel tempo della parte di funzione d'onda "uscente nella regione.

Il metodo di Enss permette di dimostrare che per un insieme denso di stati iniziali (che, grosso modo hanno velocità limitata in valore assoluto e lontana da zero) la funzione d'onda decade rapidamente al di fuori della regione "classicamente permessa. È necessario avere controllo della velocità iniziale perché la rapidità di allontanamento "tende a zero al tendere a zero della velocità iniziale.

Le stime che occorrono vengono dimostrate innanzitutto per la propagazione libera, con metodi simili a quelli che abbiamo utilizzato nel Capitolo 3 per dimostrare alcune proprietà del moto libero. Queste stime vengono poi estese al caso di potenziali a corta portata.

L'estensione a potenziali di lunga portata è più laboriosa e richiede una modificazione nella costruzione della matrice di scattering.

Le stime utilizzano il fatto che gli stati considerati hanno supporto essenzialmente limitato in energia e il fatto che per autofunzioni localizzate molto lontano dall'origine l'operatore H differisce poco dalla hamiltoniana libera, che è una funzione solo degli impulsi.

Una stima tipica è la seguente

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \|\xi(|x| > (1+a)(R+vt))e^{-itH} g(H)\xi[|x| < Rt]\|_{\mathcal{B}} = 0 \quad 17.84$$

dove $a > 0$ è una costante e la funzione $g \in C_0^\infty$ ha supporto in $(-\infty, \frac{mv^2}{2})$ (m è la massa della particella) e $v \in R^d$ è arbitrario.

Questa stima si ottiene dalla analoga stima per $V = 0$ dimostrando una opportuna classe di funzioni dell'energia totale possono essere approssimate dalle corrispondenti funzioni dell'energia cinetica nelle regioni dove il potenziale è piccolo.

Nel caso $V = 0$ la stima (17.84) può essere resa più precisa. E' sufficiente considerare il caso di iperpiani, ad esempio l'iperpiano perpendicolare all'asse $\hat{1}$.

Se $g \in C_0^\infty(R)$ con $\text{supp } g \in [0, \infty]$, per ogni $\delta > \frac{1}{2}$ e ogni $n \in \mathcal{N}$ esiste una costante $C_{n,g,\delta}$ tale che per $r, t > 0$ si ha

$$\|\xi(x_1 < -(t+r))e^{-itH_0}g(p_1)\xi(x_1 > 0)\|_{\mathcal{B}} \leq C(1+t+r)^{-k} \quad 17.85$$

La (17.85) si dimostra passando in trasformata di Fourier e dimostrando con un'integrazione per parti che una funzione che è nel dominio della potenza p^{ma} del laplaciano tende a zero all'infinito almeno come $|x|^{-q(p)}$ dove $q(p)$ è una funzione che cresce con p .

Rimandiamo per i dettagli di quest'analisi all'importante articolo di V. Enss [E4].

La parte principale del metodo di Enss è un'opportuna decomposizione di R^d in una regione sferica intorno all'origine e in numero finito di coni troncati.

Consideriamo l'insieme X di stati (funzioni d'onda) che appartengono al sottospazio continuo di H e la cui energia è finita e separata da zero.

Quest'insieme è denso. Il nostro scopo è dimostrare che nessun membro di quest'insieme può essere ortogonale ad uno stato che appartiene al sottospazio assolutamente continuo di H . Questo dimostra che il sottospazio di continuità per H coincide con il sottospazio di assoluta continuità e provvede una dimostrazione della completezza asintotica.

E' necessario considerare stati con energia strettamente maggiore di zero perché altrimenti può essere zero la velocità di allontanamento delle parti che appartengono ai coni troncati.

Possiamo notare che asintoticamente la partizione che faremo può essere considerata una partizione dello spazio delle fasi classico.

Scegliamo una funzione liscia di variabile reale (l'energia). Notiamo che per ogni funzione $f \in L^1(R)$ (quindi in particolare in \mathcal{S}) si ha per ogni $\phi \in \Omega$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(\hat{\phi}(H) - \hat{\phi}(H_0))\phi_n\|_2 = 0 \quad 17.86$$

dove ϕ_n è definito in (17.82). Infatti

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t)(e^{-itH} - e^{-itH_0})\phi_n \right|_2 \leq \int_{-\infty}^{\infty} dt |f(t)| \|e^{-itH}e^{itH_0} - I\|_2 + 2 \int_{|t|>n} |f(t)| dt$$

Il secondo termine a destra converge a zero per $n \rightarrow \infty$ per l'ipotesi fatta su f , il primo termine converge a zero perché, per la formula di Duhamel, è maggiorato da

$$\int_{-n}^n dt \|V e^{-itH} \phi_n\|_2 = \int_{-n}^n dt \|V(H+iI)^{-1} e^{-itH}(H+iI)\phi_n\|_2$$

Introducendo la funzione ι identicamente uguale ad uno sotto forma di $\iota = \xi(|x| < n) + \xi(|x| \geq n)$ si ottengono due termini ciascuno dei quali tende a zero quando $n \rightarrow \infty$, uno come conseguenza di (17.85) e uno per le ipotesi fatte sul potenziale.

Ne segue che

$$\psi_n \equiv \hat{f}(H_0)\phi_n \tag{17.87}$$

è una buona approssimazione di ϕ_n .

Decomponiamo adesso R^d in una palla all'origine B_n di raggio n e in un numero finito M di coni troncati C_m^n aventi come assi i vettori $e_m \in R^d$, $m = 1, \dots, M$, e definiti da

$$|x| > n \quad x \cdot e_m \geq \frac{|x|}{2}$$

Convienne "addolcire i corrispondenti operatori di proiezione prendendone la convoluzione con una fissata funzione $\zeta \in \mathcal{S}$ tale che il supporto della trasformata di Fourier $\hat{\zeta}(p)$ sia contenuto in una piccola palla all'origine e sia $\hat{\zeta}(0) = 1$.

In questo modo otteniamo una partizione regolare $F_0(B_n), \cup_m F_0(C_m^n)$ di R^d che tiene anche conto della nostra richiesta che gli stati considerati abbiano energia lontana da zero.

Segue da (17.83) che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|F_0(B_n)\psi_n\|_2 = 0 \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \|\phi_n - \sum_m F_0(C_m^n)\psi_n\|_2 = 0 \tag{17.88}$$

Gli stati $F_0(C_m^n)$ sono localizzati lontano dall'origine. Decomponiamo ciascuno di essi in una parte *uscente* ed una parte *entrante*.

Se il supporto in energia dello stato ϕ era incluso nell'intervallo $[a, b]$, $a > 0$, $b < \infty$ scegliamo $\zeta \in \mathcal{D}$ tale che $\zeta_m(p) = 0$ per $p - e_m < -a$ e $\zeta(p) + \zeta(-p) = 1$ per $|p| < b$.

Definiamo stati uscenti ed entranti nel settore m

$$\psi_n^{out}(m) = F_0(C_m^n)\zeta(p) \quad \psi_n^{in}(m) = F_0(C_m^n)\zeta(-p) \tag{17.89}$$

(notare che $\psi_n = [\zeta(p) + \zeta(-p)]\psi_n$).

Vogliamo dimostrare che gli stati $\psi_n^{out}(m)$ evolvono "quasi liberamente nel futuro e gli stati $\psi_n^{in}(m)$ evolvono "quasi liberamente nel passato. Sono utili le stime seguenti

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \|\xi(|x| \leq n + at)e^{-itH_0}(H_0 + I)\psi_n^{out}(m)\|_2 = 0 \tag{17.90}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^0 dt \|\xi(|x| \leq n - at)e^{-itH_0}(H_0 + I)\psi_n^{in}(m)\|_2 = 0 \tag{17.91}$$

Ricordiamo che a è la soglia di energia (o velocità) che abbiamo posto, arbitraria ma finita. La velocità di allontanamento dei centri dei settori saranno più piccole al diminuire di a .

Utilizziamo qui il fatto che tutti gli operatori che entreranno nella stima sono limitati, quindi è sufficiente dare le stime per un insieme denso.

Le stime (17.90) e (17.91), seppur di facile interpretazione, hanno (finora) una dimostrazione piuttosto elaborata. Accenneremo in seguito a questa loro dimostrazione; utilizzandole terminiamo la dimostrazione della completezza asintotica

Lemma 17.18

Si ha, per ogni valore di m

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(\Omega_- - I)\psi_n^{out}(m)\|_2 = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \|(\Omega_+ - I)\psi_n^{in}(m)\|_2 = 0, \quad 17.92$$

(abbiamo dato per scontata l'esistenza degli operatori d'onda Ω_{\pm})

◇

Dimostrazione

Dimostriamo solo la prima relazione. La dimostrazione della seconda è simile.

Si ha, per ogni settore

$$\begin{aligned} \|(\Omega_- - I)\psi_n^{out}(m)\|_2 &\leq \int_0^\infty dt \|V e^{-itH_0} \psi_n^{out}(m)\|_2 \leq \\ &\|V(H_0 + I)^{-1}\|_{\mathcal{B}} \int_0^\infty |\xi[|x| \leq n + at] e^{-itH_0} (H_0 + I)\psi_n^{out}(m) + \\ &\|(H_0 + I)\psi_n^{out}(m)\|_2 \int_0^\infty dt \|V(H_0 + I)^{-1}\xi[|x| > n + at]\|_{\mathcal{B}} \end{aligned} \quad 17.93$$

La stima (17.90) garantisce che il primo termine tenda a zero quando $n \rightarrow \infty$, il secondo termine si annulla in questo limite per l'ipotesi (di corta portata) fatta sul potenziale.

♡

Il Lemma 17.18 implica che $\psi_n^{in}(m)$ e ϕ_n diventano ortogonali nel limite $n \rightarrow \infty$. Infatti

$$|(\psi_n^{in}(m), \phi_n)| \leq \|(I - \Omega_+)\psi_n^{in}(m)\|_2 + |(e^{itH_0\tau_n}\psi_n^{in}(m), \Omega_+^*\phi)|$$

Il secondo addendo a destra è limitato da

$$\|\xi(|x| \leq n + a\tau_n) e^{i\tau_n H_0} \psi_n^{in}(m)\|_2 + \|\xi(|x| > n + a\tau) \Omega_+^* \phi\|_2$$

Il secondo termine decresce a zero, e così anche il primo per stime analoghe a quelle che portano a dimostrare (17.90), (17.91).

Completiamo ora la dimostrazione della completezza asintotica dimostrando che non vi possono essere stati che appartengono allo spettro continuo di H e sono ortogonali al codominio di Ω_- .

Ricordando che il codominio di Ω_- contiene tutti gli stati che appartengono allo spetto assolutamente continuo di H questo dimostra anche che lo spettro singolare continuo di H è vuoto.

Assumiamo allora che esista uno stato ϕ nello spettro continuo di H che sia ortogonale al codominio di Ω_- . Allora questo è vero per ogni ϕ_n .

D'altra parte tutte le $\phi_n^{in}(m)$ appartengono al codominio di Ω_- . Ma ϕ_n è ben approssimato dalla somma da 1 a M di $\psi_n^{out}(m)$ che appartengono al codominio di Ω_- , una contraddizione.

Nello stesso modo si dimostra che ϕ appartiene al codominio di Ω_+ .

Diamo ora una traccia della dimostrazione di (17.90) e (17.91). Riduciamo il problema al caso unidimensionale e utilizziamo poi la forma esplicita del propagatore libero.

Notiamo che la palla $|x| \leq n + at$ è contenuta nel semispazio $(u, x) \leq n + at$ per ogni vettore unitario u . Scriviamo ciascuna funzione $\zeta_m(p)$ come somma di un numero di funzioni $\eta_{m,k}(p) \in \mathcal{D}$ ciascuna con supporto in un cono con asse $w_{m,k}$ e scegliamo gli assi in modo tale che

$$supp \eta_{m,k} \in \{p \in R^d, (p, w_{m,k}) \geq 2a\}$$

Una semplice (ma laboriosa) analisi geometrica dimostra che questo può essere fatto.

La stima (17.90) segue allora dalla seguente stima per ciascun valore degli indici m e k

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \|\xi(x < n + at) e^{itH_0} (H_0 + I) F_0(C_m^n) \eta_{m,k}(p) \psi_n\|_2 = 0 \quad 17.94$$

Per semplificare le notazioni, per ciascun settore scegliamo gli assi in modo tale che $w_{m,k}$ sia l'asse 1.

Il procedimento che abbiamo descritto brevemente ci permette di fare la stima per uno stato ben localizzato intorno al piano $x_1 = 0$ e la cui trasformata di Fourier ha supporto in $[a, b]$.

Notiamo adesso che $\sum_{s>1} p_s^2$ commuta con $\xi(|x_1| < n + at)$ e quindi siamo ricondotti a una stima in dimensione uno. In dimensione uno abbiamo la forma esplicita del propagatore libero

$$(e^{-itH_0})\phi(x) = (4\pi it)^{-\frac{1}{2}} e^{i\frac{x^2}{4t}} \int e^{i\frac{y^2}{4t}} e^{-i\frac{xy}{2t}} \phi(y) \quad 17.95$$

Utilizzando quest'informazione ed altre della stessa natura (vedere ad esempio [E83]), ricordando che lo spettro di energia appartiene per ipotesi all'intervallo $[a, b]$ e stimando separatamente il contributo delle regioni corrispondenti a $2n + m < x_1 < 2n + m + 1$ è possibile dimostrare che

$$\|\xi(x_1 < n + at) e^{-itH_0} (H_0 + I) \eta_{m,k}(p) \psi_n\|_2 \leq C[(1+t)(n-1+at)]^{-1} \quad 17.96$$

Questo dimostra (17.90). La dimostrazione di (17.91) è analoga.

APPENDICE 17A: SCATTERING INVERSO

In questa appendice trattiamo brevemente il *problema inverso dello scattering*, cioè la possibilità di determinare il potenziale dalla conoscenza della matrice di scattering o della matrice S .

Utilizziamo ancora una volta un metodo geometrico, proposto anche in questo contesto da Enss e Weder.

Analizziamo solo il caso di *potenziali a corta portata* per i quali intendiamo adesso potenziali piccoli nel senso di Kato rispetto al laplaciano e che siano tali che

$$G_V(R) \equiv \|\xi(|y| \geq R)V(y)(-\Delta + I)^{-1}\|_{\mathcal{B}} \in L^1(R, dR), \quad y \in R^d \quad 17A.1$$

Indichiamo la collezione di questi integrali con il simbolo \mathcal{V}_S .

Abbiamo visto che per questi potenziali gli operatori d'onda

$$\Omega_{\pm, V} = s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{it(H_0+V)} e^{-itH_0}$$

esistono e sono completi ed è unitario l'operatore $S(V) \equiv (\Omega_{+, V})^* \Omega_{-, V}$.

Definiamo *applicazione di scattering (scattering map)* l'applicazione

$$V \in \mathcal{V}_S \rightarrow S(V) \quad 17A.2$$

Dimostriamo che questa applicazione è *iniettiva*: la conoscenza della matrice S *individua completamente il potenziale*.

Nota 17A.1

Definendo *a lunga portata (long range potentials)* \mathcal{V}_L la classe dei potenziali tali che

$$V^L \in C^4(R^d), \quad |D^\alpha V^L(y)| \leq C(1 + |y|)^{-1-\alpha(\epsilon+\frac{1}{2})}, \quad 1 \leq \alpha \leq 4, \quad 0 < \epsilon < \frac{1}{2} \quad 17A.3$$

gli operatori d'onda sono completi se la hamiltoniana di riferimento è scelta essere

$$H^D = H_0 + V^L \left(t \frac{p}{m} \right) \quad 17A.4$$

Anche in questo caso lo *scattering map* è iniettivo, ma la dimostrazione risulta più complessa.

Va anche notato che per potenziali *a portata finita* il potenziale risulta univocamente determinato dalla conoscenza dei dati di scattering *ad una energia fissata* [N].



La dimostrazione dell'iniettività dell'applicazione di scattering si fonda su alcune stime a priori che enunceremo e di alcune delle quali daremo un traccia di dimostrazione.

Maggiori dettagli possono essere trovati in [EW].

Utilizzeremo il seguente Lemma, la cui dimostrazione si ottiene con stime analoghe a quelle che portano alla stima (17.76)

Lemma 17.21 ([E₅] *Proposizione 2.10*)

Per ogni funzione $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ che abbia supporto nella palla B_η per qualche η , per qualunque scelta dell'intero k è possibile trovare una costante positiva C_k tale che valga

$$\|\xi(x \in \mathcal{M}')e^{itH_0}\xi(p - mv)\xi(x \in \mathcal{M})\|_2 \leq C_k(1 + r + |t|)^{-k} \quad 17A.5$$

per ogni $v \in \mathbb{R}^d$, $t \in \mathbb{R}$ e ogni coppia di insiemi misurabili \mathcal{M} , \mathcal{M}' tali che valga

$$r \equiv \text{dist}\{\mathcal{M}', \mathcal{M}\} > 0$$

◇

Per dimostrare l'iniettività abbiamo bisogno di *stime di separazione*.

Lemma 17.22

Se il potenziale V soddisfa per qualche $\rho \in [0, 1]$ e ogni funzione $g \in C_0^\infty$

$$(1 + R)^\rho \|V(x)g(p)\xi(|x| > R)\|_2 \in L^1((0, \infty), dR) \quad 17A.7$$

allora per ogni funzione $f \in C_0^\infty(B_\eta)$ è possibile trovare h , con $(1 + \tau)h(\tau) \in L^1((0, \infty))$, tale che per ogni $v \in \mathbb{R}^d$, $|v| \geq 4\eta$ sia

$$\|V(\cdot + tv)e^{-itH_0}f(p)(1 + |\cdot|^2)^{-\frac{3}{2}}\| \leq h(|vt|) \quad 17A.8$$

◇

Nota 17A.2

Con la definizione che abbiamo dato, ogni *potenziale di corta portata* soddisfa (17A.5) con $\rho = 0$; maggiori valori di ρ significano maggior decadimento all'infinito.

♣

Dimostrazione (cenni)

Dal lemma 17A.1, se

$$\mathcal{M} = \{|x| \leq c|vt|\} \quad \mathcal{M}' = \{|x| \geq C|vt|\} \quad c < C$$

scelti opportunamente, per r abbastanza grande si ha

$$\begin{aligned} \|Vg(p-mv)\| \|\xi[|x-vt| > C|vt|]\| \left\| e^{-itH_0}f(p-mv) \left(\frac{1}{(1+|x|^2)} \right)^{\frac{3}{2}} \xi[|x| < c|vt|] \right\| \\ \leq k(1+c|vt|)^{-3} \end{aligned} \quad 17A.9$$

inoltre

$$\|Vg(p-mv)\|\|\xi(|x-vt| > C|vt|)\|e^{-itH_0}f(p-mv)\left(\frac{1}{(1+|x|^2)}\right)^{\frac{3}{2}}\xi[|x| < c|vt|c]\|\in h_1(|vt|) \quad 17A.10$$

dove $(1+y)^\rho h_1(y) \in L^1((0, \infty))$ sotto le ipotesi fatte sul potenziale. Le conclusioni del lemma 17A.1 seguono da (17A.9) e (17A.10).

♡

Notiamo il seguente corollario

Corollario

Se $\widehat{\phi}_0 \in C_0^\infty(B(m\eta))$ si ha, uniformemente in $t \in R$

$$\|(\Omega_\pm - I)e^{-itH_0}\phi_v\|_2 = O(v^{-1}), \quad \widehat{\phi}_v(p) = \widehat{\phi}_0(p - mv) \quad 17A.11$$

◇

Dimostrazione

Sia ϕ una funzione d'onda tale che $\widehat{\phi}$ abbia supporto nella palla di raggio η e consideriamo ϕ_v definita da $\widehat{\phi}_v(p) = \widehat{\phi}(p - mv)$. Dalla formula di Duhamel si deduce

$$(\Omega_+ - I)e^{-itH_0}\phi_v = i \int_0^\infty d\tau e^{i\tau H_0} V e^{-i(t+\tau)H_0} \phi$$

Utilizzando (17A.8) si ottiene (17A.11).

♡

Diamo infine la formula di ricostruzione del potenziale conosciuta la matrice di scattering.

Questa formula dà il potenziale come funzione della matrice di scattering dando in ciascun punto $x \in R^d$ il suo l'integrale lungo raggi che partono da x (tomografia); un teorema di Radon assicura l'unicità della soluzione.

Teorema 17A.3 (formula di ricostruzione)

Se vale (17A.6) allora, per ogni coppia di funzioni che soddisfano (17A.8) si ha

$$((S - I)\phi_v, \psi_v) = \frac{i}{v} \int_{-\infty}^\infty d\tau (V(\cdot + \tau v)\phi_0, \psi_0) + o(v^{-\rho+1}), \quad \widehat{\phi}_v(p) = \widehat{\phi}(p - mv) \quad 17A.11$$

◇

Dimostrazione (cenni)

poiché per definizione $S - I = (\Omega_+ - \Omega_-)\Omega_-$ dalla formula di Duhamel si deduce

$$i(S - I)\phi_v = \int_{-\infty}^\infty e^{itH_0} V \Omega_- e^{-itH_0} \phi_v, \quad \widehat{\phi}_v(p) = \widehat{\phi}(p - mv)$$

Da $\Omega_- D(H_0) \subset D(H)$ segue

$$(\psi_v, i(\mathcal{S} - I)\phi_v) = \int_{-\infty}^{\infty} P_v(vt)dt + R(v) \quad 17A.12$$

dove il termine principale P_v e il resto $R(v)$ sono dati rispettivamente da

$$P_v(vt) = (e^{-itH_0}\psi_v, V(\cdot)e^{-itH_0}\phi)$$

$$R_v = \int_{-\infty}^{\infty} ((\Omega_- - I)e^{-itH_0}\psi_v, V(\cdot)e^{-itH_0}\phi)dt$$

Dai risultati precedenti segue

$$|R_v| \leq C \int_{-\infty}^{\infty} |Ve^{-itH_0}\phi_v|_2 dt \leq C \int_{-\infty}^{\infty} h(|vt|)dt$$

Questo termine soddisfa quindi la tesi del teorema.

Il termine P_v può essere scritto nella forma

$$P_v(t) = (V(\cdot + vt)e^{-itH_0}\psi_0, e^{-itH_0}\phi) \quad 17A.13$$

Notiamo che, ponendo $\tau = vt$ si ha puntalmente in τ

$$\lim_{|v| \rightarrow \infty} P_v(\tau) = (V(\cdot + \tau\hat{v})\psi_0, \phi_0)$$

e dal lemma 17A.2

$$|P_v(\tau)| \leq C \left\| V(x)e^{-i\frac{\tau}{v}H_0} \frac{f(p-mv)}{(1+x^2)^{\frac{3}{2}}} \right\|_2 \leq C_1 h(|\tau|)$$

Scriviamo $P_v(\tau)$ come somma $P_v^1 + P_v^2$

$$P_v^1 = (V(\cdot + vt)e^{-itH_0}\psi_0, (e^{-itH_0} - I)\phi_0), \quad P_v^2 = ((e^{-itH_0} - I)\psi_0, V(\cdot + \tau\hat{v})\phi_0)$$

poiché $\hat{\phi}_0$ è normalizzata ad uno e ha supporto compatto vale

$$\|(e^{-i\frac{\tau}{v}} - I)\phi_0\|_2 P_v^2 \leq \|H_0\phi_0\|_2 \left| \frac{\tau}{v} \right|, \quad \|(e^{-i\frac{\tau}{v}} - I)\psi_0\| P_v^1 \leq 2$$

Dal Lemma 17A.2 si deduce allora

$$|P_v^1(\tau)| \leq \frac{C}{v^\rho} |\tau|^\rho h(|\tau|)$$

poiché $\lim_{|v| \rightarrow \infty} P_v^1(|v|^\rho(\tau)) = 0$ dal teorema di convergenza dominata segue

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_v^1 dt = 0(v^{-\rho}) \quad 0 \leq \rho \leq 1 \quad 17A.14$$

(per $\rho = 1$ si ottiene $O(|v|^{-1})$)

Per quanto riguarda il termine P_v^2 utilizzando $(1 - \tau)^\rho \|\xi(|x| > \frac{\tau}{2})\phi_0\|_2 \in L^1((0, \infty))$ si ottiene una stima analoga.

♡

Dal teorema 17A.3 si deduce

Corollario

Lo scattering map è iniettivo.

◇

Dimostrazione

Supponiamo che V_1 e V_2 siano potenziali a corta portata che hanno la stessa matrice di scattering. Indichiamo con V la loro differenza.

Nel seguito consideriamo solo vettori z che appartengono ad un piano prefissato che scegliamo essere il piano $\{1, 2\}$.

Siano ϕ e ψ elementi di $L^2(\mathbb{R}^d)$, $d \geq 2$, tali che $\hat{\phi}, \hat{\psi} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$. Definiamo

$$\phi_z = e^{-ipz}\phi, \quad \psi_z = e^{-ipz}\psi \quad f(z) \equiv (V\phi_z, \psi_z) \quad 17A.16$$

La funzione f così definita è continua e limitata. Per le ipotesi fatte possiamo scegliere $g \in C_0^\infty$ tale che $g(p)\phi = \phi$.

Si ha allora $f(z) \in L^2(\mathbb{R}^2, dz)$; infatti

$$|f(z)| \leq \|Vg(p)\phi_z\|_2 \leq \left\| Vg(p)\xi \left[|x| > \frac{|z|}{2} \right] \right\|_2 + \|Vg(p)\| \left\| \xi \left[|x| \leq \frac{|z|}{2} \right] \phi_z \right\|_2 \quad 17A.17$$

Scegliendo v nel piano $\{1, 2\}$ la trasformata di Radon di f è per definizione

$$\tilde{f}(v, x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(z + \tau v) d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} (V(x + \tau v)\phi_z, \psi_z) d\tau$$

e questa quantità è zero per il teorema 17A.3.

Siccome $f \in L^2(\mathbb{R}^2, dz)$ ne segue $f(z) = 0$, per le proprietà della trasformata di Radon.

In particolare $f(0) = 0$ e quindi $(V\phi, \psi) = 0$ se $\hat{\phi}, \hat{\psi} \in C_0^\infty$, un insieme denso. Ne segue che $V = 0$ come operatore, e quindi anche come funzione.

♡

APPENDICE 17B: TEOREMA DEL FLUSSO ATTRAVERSO SUPERFICI.

Nei testi di Fisica Teorica che trattano la teoria dello scattering da un potenziale V si considera la (densità di) probabilità del seguente evento: una particella che entra con impulso $k_0 \neq 0$ nella regione in cui la forza ∇V è diversa da zero, ne esce con impulso contenuto in un angolo solido Σ .

Poiché lo stato della particella entrante non può avere impulso esattamente k_0 (tale stato corrisponderebbe ad una funzione d'onda $\delta(k - k_0)$ nello spazio degli impulsi, e quindi non a una funzione a quadrato integrabile) nel formulare così il processo di scattering si sottintende un processo di limite,

Se si vuole dare significato al fatto che la particella considerata *abbia impulso* k_0 bisogna dunque immaginare un fascio di N particelle tutte con momento *approssimativamente uguale* a k_0 e distribuite ad un tempo remoto (ma non troppo remoto) nel passato *quasi uniformemente su di un piano perpendicolare* a k_0 a distanza R molto grande (nella direzione opposta a k_0) dalla regione in cui ∇V è *sostanzialmente* diverso da 0.

Naturalmente solo una frazione di queste particelle raggiunge la regione in cui l'interazione può avere luogo, e la probabilità di uscire in un angolo solido Σ si riferisce solamente a questa frazione di particelle.

Nella maggior parte dei testi di Fisica Teorica questo porta a sostituire la funzione d'onda della particella entrante con e^{ik_0x} ma ad omettere un fattore $(\delta(0))^{-1}$ nel calcolo formale, per tenere conto che nel limite si ottiene un risultato finito solo facendo tendere in numero N di particelle all'infinito (poiché la percentuale di particelle che incontra la regione d'interazione tende a zero nel limite).

Formalmente si procede considerando che interessano solo le particelle che hanno interagito, omettendo le altre.

Se S è la matrice di scattering, si considera quindi l'operatore $T \equiv S - I$.

Un calcolo euristico mostra che l'operatore T ha un nucleo integrale

$$i\pi\delta(k^2 - p^2)T(k, p) \tag{17B.1}$$

con $T(k, p)$ regolare (la presenza della funzione δ riflette il fatto che l'energia del moto asintotico è conservata, una proprietà che segue dalle proprietà di intralacciamento degli operatori d'onda).

Mediante quest'analisi si deduce che la probabilità che una particella che entra con impulso k_0 e che ha subito un processo di scattering venga emessa in un angolo solido Σ è data da

$$\sigma_{diff}^{k_0}(\Sigma) = 16\pi^4 \int_{\Sigma} T(\omega|k_0|, k_0)^2 d\omega \tag{17B.2}$$

La funzione $\sigma_{diff}^{k_0}$ viene chiamata *sezione d'urto differenziale*.

Per connettere (17A.1) ottenuta in modo euristico con l'operatore di scattering come è stato definito in questo capitolo, ricordiamo che nella teoria stazionaria dello scattering l'autofunzione generalizzata corrispondente all'impulso k è ottenuta come quella soluzione dell'equazione di Lippmann-Schwinger

$$\phi(x, k) = e^{-ik \cdot x} - \frac{1}{2\pi} \int \frac{e^{-i|k||x-y|}}{|x-y|} V(y)\phi(y, k) d^3y \tag{17B.3}$$

che ha comportamento asintotico per $|x|$ grande

$$\phi(x, k) \simeq e^{-ik_0 \cdot x} + f^{k_0}(\omega) \frac{e^{-i|k||x|}}{|x|} \quad 17B.4$$

Da 17B.3 si vede che il nucleo integrale dell'operatore T può essere espresso in funzione di $\phi(x, t)$ nel seguente modo

$$T(k, p) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-ik \cdot x} V(x) \phi(x, p) d^3x$$

Confrontando i termini di ordine $|x|^{-1}$ in (17B.4) e (17B.3) si vede che

$$f^{k_0}(\omega) = (2\pi)^{-1} \int e^{i|k_0|\omega \cdot y} V(y) \phi(y, k_0) d^3y \quad 17B.5$$

e quindi

$$f^{k_0}(\omega) = 4\pi^2 T(\omega|k_0|, k_0)$$

Si perviene così alla (17B.2).

Questa derivazione della (17B.2) dalle formule della teoria stazionaria dello scattering non lascia capire la sua interpretazione in termini di effettivi procedimenti di misurazione.

Daremo quindi una breve descrizione della relazione tra (17B.2) e il processo di scattering basata sul *teorema del flusso attraverso superfici*, che permette di cogliere meglio questa relazione.

Notiamo innanzitutto che una descrizione più aderente alla realizzazione sperimentale di un processo di scattering è la seguente.

Il processo di scattering (e la conseguente definizione di sezione d'urto differenziale) consiste nel fatto che le particelle dopo aver interagito vengono rilevate quando attraversano un insieme di contatori posti ad una grande distanza R dal luogo dove avviene l'interazione (così che si possa parlare di proprietà della particella, quali ad esempio la quantità di moto).

Viene misurato il *numero di particelle che escono in una determinata direzione*. In generale vengono rilevate quantità integrali nel tempo, cioè non viene precisato il momento in cui la rilevazione viene effettuata.

In altre parole, il processo di scattering è quantificato misurando il flusso di particelle che attraversano una porzione Σ dell'area di una sfera posta a grande distanza dall'origine.

Notiamo che questa quantità non dipende dalla precisa localizzazione della regione in cui avviene l'interazione, purché l'estensione di questa regione sia molto minore alla distanza R a cui sono posto i rilevatori.

Ricordiamo che in Meccanica Quantistica il *flusso* viene definito essere

$$j^{\phi_t} \equiv \text{Im } \phi_t^* \nabla \phi_t \quad 17B.6$$

e soddisfa l'equazione (di continuità)

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \operatorname{div} j^{\phi_t} = 0, \quad \rho_t(x) = |\phi_t(x)|^2 \quad 17B.7$$

Si potrebbe pensare che sia naturale assumere che la probabilità che la particella attraversi la porzione Σ di superficie sferica nel tempo $T \leq t \leq T + \Delta$ sia l'integrale

$$\int_{\Sigma} d\sigma \int_T^{T+\Delta} (n \cdot j^{\phi_t})(\sigma, t) dt$$

dove $n(\sigma, t)$ è la normale alla superficie nel punto di coordinate σ , orientata verso l'esterno.

Questo non è vero in senso stretto, perché $(n \cdot j^{\phi_t})(\sigma, t)$ potrebbe essere una quantità negativa (e potrebbe non essere definita ovunque poiché la funzione ϕ può non essere differenziabile).

Ma ci aspettiamo che tenda ad essere positiva (o nulla) quando il raggio della sfera tende all'infinito. Pertanto ci aspettiamo che una definizione più significativa della sezione d'urto possa essere la seguente

$$\sigma_{flusso}^{\phi}(\Sigma) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^{\infty} dt \int_{S_R \cap K(\Sigma)} (n \cdot j^{\phi_t}) d\omega \quad 17B.8$$

dove $S_R \cap K(\Sigma)$ è l'intersezione della sfera di raggio R con il cono generato da Σ (rispetto ad un punto P che appartiene al supporto di ∇V ; quando $R \rightarrow \infty$ questa definizione non dipende dal particolare punto P considerato).

Notiamo che la definizione (17B.8) non dipende da T perché ϕ è per ipotesi uno stato di scattering.

Quindi ci aspettiamo che valga il seguente Teorema

Teorema del flusso attraverso superfici

Si ha

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^{\infty} \int_{R\Sigma} j^{\phi_t} d\Sigma = \int_{C\Sigma} |\Omega_+^{-1} \phi(k)|^2 d^3k \quad 17B.9$$

◇

Questo teorema è stato dimostrato sotto varie condizioni sul potenziale. Si può vedere ad esempio [D] [AZ]

Va notato che nel corso della dimostrazione si dimostra che nel limite $R \rightarrow \infty$ la misura $(n \cdot j^{\phi_t}) d\omega$ tende ad una misura positiva e si ha

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^{\infty} dt \int_{R\Sigma} (n \cdot j^{\phi_t}) d\omega = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^{\infty} dt \int_{R\Sigma} |(n \cdot j^{\phi_t})| d\omega \quad 17B.10$$

APPENDICE 17C: TEORIA ALGEBRICA DELLO SCATTERING

Il ruolo del gruppo delle dilatazioni spaziali può essere visto anche utilizzando la rappresentazione di Heisenberg e studiando il comportamento asintotico *degli osservabili*.

Questa possibilità è stata messa in luce da [AH67] e da altri, soprattutto D. Ruelle, ed è stata posta da V. Enss [E_1, E_4] al centro della teoria.

È infatti interessante notare che mediante metodi geometrici è possibile dedurre l'esistenza e completezza dell'operatore d'onda e la completezza asintotica (e l'unitarietà della matrice S) dallo studio del comportamento asintotico del valore d'aspettazione, negli stati corrispondenti allo spettro continuo della hamiltoniana, di opportuni osservabili che evolvono nel tempo secondo la rappresentazione di Heisenberg.

Questa considerazione è alla base della teoria algebrica dello scattering ([AH67], [R68]) utilizzata poi in teoria dei campi quantizzati e in teoria algebrica delle osservabili locali.

In questa teoria si studiano *campi (o osservabili) asintotici* che agendo su uno stato stazionario (ad esempio il vuoto) producono stati che evolvono secondo una hamiltoniana libera.

Questo metodo viene usato nei sistemi infinito-dimensionali in assenza di una rappresentazione di Schrödinger

Una traccia generale della dimostrazione della completezza asintotica in una teoria non relativistica mediante lo studio del comportamento asintotico di opportuni osservabili si trova su [CFKS].

Si dimostra che l'evoluzione temporale in rappresentazione di Heisenberg di alcune osservabili sotto H_{cont} per tempi molto lunghi differisce poco dall'evoluzione che avrebbero sotto H_0 .

Corrispondentemente in teoria dei campi quantizzati i *campi osservabili* si comportano come campi liberi *su tempi molto lunghi*.

Studiando il comportamento asintotico di opportuni osservabili si può dimostrare per esempio

Teorema 17.19 ([CFKS])

Se $D(H_0) = D(H)$ e Per ogni $f \in C^\infty(\mathbb{R})$ ed ogni $\phi \in \mathcal{H}_{cont}(H)$ si ha

i)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f\left(\frac{x(t)^2}{t^2}\right) \phi = f(2H)\phi$$

ii)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f\left(\frac{A(t)}{t}\right) \phi = f(2H)\phi$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(H_0(t))\phi = f(H)\phi$$

◇

V. Enss utilizza una metodologia analoga, ma ha a disposizione la rappresentazione di Schrödinger in cui traduce i risultati ottenendo accurate stime asintotiche (nel tempo) per il comportamento delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger.

Ad esempio si può dimostrare il seguente Teorema

Teorema 17.20 [E85]

Sia $H = H_0 + V$ con V piccolo rispetto ad $H_0 \equiv -\Delta$ nel senso di Kato.

Sotto le ipotesi

$$(H_0 - z)^{-\frac{1}{2}}(1 + |x|^2)^{\frac{1}{2}}V(H_z)^{-1} \in \mathcal{K}$$

si ha, nel senso della convergenza forte in risolvente

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty} \frac{x^2(t)}{t^2} = HP_{cont} \quad \lim_{|t| \rightarrow \infty} \frac{D(t)}{t} = 2HP_{cont}$$

◇

Non diamo qui la dimostrazione di questo teorema, ma notiamo il seguente corollario.

Corollario

Se ϕ è nel sottospazio dello spettro continuo di H allora

i)

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty} \|(I - \xi(v_1 t < x < v_2 t))e^{-itH} \xi(v_1^2 < H < v_2^2) \phi\|_2 = 0$$

ii)

$$\forall R \quad \lim_{|t| \rightarrow \infty} \|\xi(|x| < R)e^{-itH} \phi\|_2 = 0$$

◇

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [Ag75] S. Agmon, *Spectral properties of Schrödinger Operators and Scattering Theory* Ann. Scuola Normale Pisa 2 (1975) 151-218
- [AH] H. Araki, R. Haag, *Comm. Math. Phys.* 4 (1967) 77-91
- [AJS] V. Amrein, J. Jauch, K. Sinha *Scattering theory in Quantum Mechanics*, V. Benjamin, Reading Mass, 1977.
- [AZ] W. Amrein, J. Zuleta, *Helv. Phys. Acta* 70 (1997) 1-38
- [CFKS] H. Cycon, R. Froese, W. Kirsch, B. Simon, *Schrödinger Operators*, Text and Monographs in Physics, Springer, 1988.

-
- [D69] J. Dollard, *Comm. Math. Physics* 12 (1969) 193-203
- [Y82] D. Yafaev, *On the solutions of the Schrödinger equation with Radiation Conditions* Translations of the Am.Math. Soc. vol 189 (1982), 255-285.
- [E81] V. Enss, *Geometric Methods in Spectral and Scattering Theory* in Rigorous Atomic and Molecular Physics, Velo G., Wightman A. eds New York Plenum 1981
- [E79] V. Enss, *Ann. of Physics* 119 (1979) 117-132
- [E83] V. Enss, *Comm. Math. Physics* 89 (1983) 245-268
- [E85] V. Enss, *Lecture Notes in Mathematics* vol 1159 (1985) pg. 39-178 , Springer New York
- [E83'] V. Enss, *Journ. of Funct. Analysis* 52 (1983) 219-251
- [ES80] V. Enss, B. Simon, *Comm. Math. Phys.* 76 (1980) pg 177-209
- [M] E. Mourre, *Comm. Math. Physics* 78 (1981) pg 391-408
- [EW95] V. Enss, R. Weder, *Journ. of Mathematical Physics* , 36 (1995) pg 3902-3921.
- [GL55] I.M. Gel'fand, B.M. Levitan, *Amer. Math. Soc Translation* 54 253-304 (1955).
- [H69] K. Hepp, *Helv. Phys. Acta* 42 (1969) pg 425-458
- [HS00] W. Hunziker, I. Segal, *Journ. Math. Physics* 41 (2000) pg 3448-3510
- [K80] T. Kato, *Perturbation theory for linear operators* , Springer , 1980.
- [Ku59] S. Kuroda, *On the existence and unitary properties of the Scattering Operator* , Nuovo Cimento 12 (1959) 431-454
- [M81] E. Mourre, *Comm. Math. Physics*, 78 (1981) pg 391-408
- [N94] R.G. Novikov, *Comm. Math. Physics* 161 (1994) pg. 569-595
- [RS] M. Reed , B. Simon , *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol II, Academic Press 1975)
- [R62] D. Ruelle, *Helv. Phys. Acta* 35 (1962) 147-163

CAPITOLO 18
TEORIA QUANTISTICA DELLO SCATTERING. STIME
DI PROPAGAZIONE REGOLARITA' SECONDO KATO.
METODO DI MOURRE. SISTEMA DI N CORPI.

In questo capitolo indichiamo le linee generali di un procedimento descritto da Mourre per dimostrare la completezza asintotica [M8]

Questo procedimento ha lontane origini nei metodi di Enss e può essere generalizzato a trattare la completezza asintotica (e anche la struttura spettrale) per il sistema a N corpi.

La generalizzazione del metodo di Mourre [ABG96][AM99] va sotto vari nomi (metodo del doppio commutatore, metodo dell'operatore subordinato, metodo degli operatori debolmente coniugati, stime dispersive) ed è rivolta a provvedere stime da cui dedurre l'assenza dello spettro singolare continuo e il comportamento asintotico degli stati appartenenti allo spettro assolutamente continuo di H .

Il metodo di Mourre e le sue generalizzazioni sono gli strumenti più frequentemente utilizzati nella letteratura recente sulla teoria dello scattering in Meccanica Quantistica.

Il procedimento iniziato da Mourre si ispira a quello di Enss, ma utilizza più consistentemente il generatore del gruppo delle dilatazioni per produrre una partizione dello spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$ che dipende da due parametri: il tempo e il fattore di dilatazione.

Questo provvede una partizione opportuna in stati uscenti e stati entranti.

Il metodo costituisce un legame tra la teoria geometrica e l'approccio più tradizionale mediante trasformazioni tra gli elementi spettrali degli operatori H e H_0 .

Lo scopo è ancora una volta dimostrare che ogni stato che appartenga allo spettro continuo di H è approssimabile per tempi sufficientemente remoti nel futuro da uno stato *uscante* e per tempi sufficientemente remoti nel passato da uno stato *entrante*.

Nel metodo di Mourre la partizione in stati entranti e uscenti è data dalla decomposizione spettrale dell'operatore che genera il gruppo delle dilatazioni.

Indicando con $D \equiv \frac{1}{2}(x \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot x)$ l'operatore di dilatazione, si può notare che su un dominio denso (il dominio di autoaggiuntezza dell'operatore $\ln|\hat{p}|$) vale la relazione

$$e^{i\lambda D} \ln|\hat{p}| e^{-i\lambda D} = \ln|\hat{p}| + \lambda I \quad 18.1$$

così che gli operatori $\ln|\hat{p}|$ e D formano una coppia di variabili canoniche secondo Weyl.

Questo porta a una semplificazione dei calcoli formali.

Inoltre, notando che $e^{i\lambda \ln|p|} = |p|^{i\lambda}$ si è portati in modo naturale ad introdurre la trasformata di Mellin e quindi a descrivere la funzione d'onda ϕ nelle variabili momento come funzione di $|p|$ e di una variabile di direzione $\omega \in S^3$

$$\tilde{\phi}(\lambda, \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{d|p|}{|p|} |p|^{\frac{3}{2}} |p|^{i\lambda} \hat{\phi}(|p|, \omega) \quad 18.2$$

Notiamo che per qualsiasi funzione misurabile F su R

$$F(D) \tilde{\phi}(\lambda, \omega) = F(\lambda) \tilde{\phi}(\lambda, \omega)$$

Con queste notazioni si definiscono i proiettori P_+ e P_- sulla parte positiva (risp. negativa) dello spettro di D .

Si può vedere che questa partizione *non è equivalente* a quella data con il metodo di Enss.

Se il supporto delle funzioni ξ_j , η_j è molto piccolo, i vettori della forma $\xi_j(x - x_j) \eta_j(p - p_j) \phi$ sono localizzati (nella rappresentazione spettrale di D) intorno al valore (x_i, p_j) ma la loro localizzazione in questa rappresentazione diventa più debole al crescere di $|p_j|$ e di $|x_i|$.

Questa proprietà è dovuta al fatto la hamiltoniana $H = H_0 + V$ non commuta né con \hat{p} né con x e che l'evoluzione dovuta a H_0 ha proprietà dispersive.

Ne segue che utilizzando funzioni a supporto molto piccolo nello spettro di D si ottengono funzioni che sono meno localizzate congiuntamente in posizione e impulso.

Ciò comporterà che la propagazione (generata da H_0 o da H) conserverà *solo approssimativamente* la decomposizione dello spazio di Hilbert in stati uscenti e stati entranti data dal metodo di Enss.

Come abbiamo visto trattando la versione indipendente dal tempo della teoria dello scattering uno dei punti delicati nella dimostrazione della completezza asintotica sta nel fatto che l'operatore risolvente

$$(H - \lambda)^{-1} \quad \lambda \notin \sigma(H)$$

non può essere esteso come funzione continua in senso forte per $\lambda \in \sigma(H)$.

Abbiamo indicato con $\sigma(H)$ lo spettro dell'operatore H .

Ma questa estensione continua potrebbe avvenire in senso debole quando ci si limita a considerare valori d'aspettazione tra un opportuno sottospazio di \mathcal{H} .

Ad esempio su elementi ϕ che siano nel range di un operatore A che abbia opportune proprietà (rispetto all'operatore A).

Chiameremo *coniugato* ad H un operatore A che ha questa proprietà; e diremo che H soddisfa le *stime di propagazione rispetto all'operatore A* .

Definizione 18.7

Sia A un operatore autoaggiunto su un spazio di Hilbert \mathcal{H} .

Diciamo che l'operatore H_0 soddisfa le *stime di propagazione* (o *stime dispersive*) rispetto ad A se esistono due numeri $s > s' > 1$ e tali che per ogni funzione $g \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ valgano le seguenti stime

$$|(1 + A^2)^{-s/2} e^{-itH_0} g(H_0) (1 + A^2)^{-s/2}| \leq c(1 + |t|)^{-s'} \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad 18.3$$

$$|(1 + A^2)^{-s/2} e^{-itH_0} g(H_0) P_A^\pm| \leq c(1 + |t|)^{-s'} \quad \forall \pm t > 0 \quad 18.4$$

dove abbiamo indicato con P_A^+ la proiezione sulla parte positiva dello spettro di A e abbiamo definito $P_A^- \equiv I - P_A^+$.

◇

Nota 18.1

Spesso è conveniente utilizzare una versione *locale* di questa definizione. Nella versione locale si chiede solo che la stima sia soddisfatta per ogni funzione $g \in C_0^\infty(I_0)$ dove I_0 è un intervallo aperto di \mathbb{R} .

In questo capitolo noi utilizzeremo sempre la versione data in (18.3) e (18.4).

♣

Definizione 18.2

Sia A un operatore autoaggiunto.

Il potenziale V è detto essere una *perturbazione a corta portata* (short range) di H_0 rispetto ad A se posto $H = H_0 + V$ si ha

i)

L'operatore

$$(H + i)^{-1} - (H_0 + i)^{-1} \quad 18.5$$

è un operatore compatto

ii)

Esiste un numero reale $\mu > 1$ e interi $k, j \geq 0$ tali che l'operatore

$$(H + i)^{-j} V (H + i)^{-k} (1 + A^2)^{\mu/2} \quad 18.6$$

si estende ad un operatore limitato in \mathcal{H} .

◇

Il teorema *astratto* che utilizzeremo è il seguente.

Teorema 18.1

Assumiamo che esista un operatore autoaggiunto A tale che H_0 soddisfi la stima di propagazione rispetto ad A e che V sia una perturbazione di H_0 che è a corto range rispetto ad A .

Allora gli operatori d'onda $W_{\pm}(H, H_0)$ esistono e sono asintoticamente completi. ◇

Nota 18.2

Spesso nelle applicazioni A è il generatore delle dilatazioni spaziali. Questo porta ad identificare il range di A_+ con le onde uscenti.

In altri casi può essere conveniente un'altra scelta per A . Un esempio è la hamiltoniana dell'effetto Stark:

$$H = -\Delta + f.x_1 \quad f \neq 0$$

Questa hamiltoniana ha spettro assolutamente continuo che copre l'intero asse reale.

Per dimostrare in questo caso il Lemma 17.17 basta scegliere $A = \frac{i}{f} \frac{\partial}{\partial x_1}$ e notare che vale la relazione (su un insieme denso di vettori analitici e invarianti per entrambi gli operatori)

$$(HA - AH) = -i$$

♣

Dimostrazione del Teorema 18.1

Dimostriamo innanzitutto l'esistenza di $W_+(H, H_0)$; per $W_-(H, H_0)$ si procede in modo analogo.

Per l'argomento standard di tipo Cook-Kuroda è sufficiente dimostrare

$$\int_0^{\infty} |(H+i)^{-j} V e^{-itH_0} g(H_0) \psi|_2 dt < \infty \quad 18.7$$

Utilizzando (18.3) e (18.4) si ha

$$|(H+i)^{-j} V e^{-itH_0} g(H_0) \psi|_2 \leq$$

$$\|(H+i)^{-j} V (H+i)^{-k} (1+A^2)^{\mu/2}\| \|(1+A^2)^{-\mu/2} (H+i)^k e^{-itH_0} g(H_0) (1+A^2)^{-s/2} \psi\|_2$$

Notiamo che $(H+i)^k (H_0+i)^{-k}$ è un operatore limitato che differisce dall'identità per un operatore compatto e che si può sostituire $g(H_0)$ con $f(H_0) \equiv (H_0+i)^j g(H_0)$ perché entrambe sono in C_0^{∞} .

Utilizzando il fatto che $e^{itH_0} g'(H_0) \psi$ tende debolmente a zero per $t \rightarrow \infty$ e che questa convergenza è preservata dall'applicazione di un operatore compatto si ottiene

$$|(H+i)^{-j} V e^{-itH_0} g(H_0) \psi|_2 \leq$$

$$\|(H+i)^{-j} V (H+i)^{-k} (1+A^2)^{\mu/2}\| \|(1+A^2)^{-\mu/2} e^{-itH_0} f(H_0) (1+A^2)^{-s/2} \psi\|_2$$

$$\leq (1 + |t|)^{-s'} \quad 18.8$$

che é integrabile poiché $s' > 1$. Questo dimostra l'esistenza di $W_+(H, H_0)$.
Per la dimostrazione della completezza asintotica iniziamo con il dimostrare che gli operatori

$$g_1(H) (W_{\pm} - I) g_2(H_0) P_A^{\pm} \quad 18.9$$

sono compatti per $g_1, g_2 \in C_0^{\infty}$. Questo segue da

$$g_1(H) (e^{itH} e^{-itH_0} - I) g_2(H_0) P_A^{\pm} = \int_0^t g_1(H) e^{i\tau H} V e^{-i\tau H_0} g_2(H_0) P_A^{\pm} d\tau$$

dove l'integrando é continuo in norma e compatto.
Pertanto anche l'integrale é un operatore compatto.
Per $\tau > 0$ possiamo stimare

$$\begin{aligned} \|g_1(H) e^{itH} V e^{-itH_0} g_2(H_0) P_A^{\pm}\| &\leq \\ \|g_1(h) V (H_0 + i)^{-k} (1 + A^2)^{s/2}\| \| (1 + A^2)^{-s/2} e^{-itH_0} g_2'(H_0) P_A^{\pm} \| \\ &\leq (1 + |t|)^{-s'} \end{aligned} \quad 18.10$$

Ne segue che anche il limite per $t \rightarrow \infty$ esiste e definisce un operatore compatto. Utilizzando la compattezza di $g(H) - g(H_0)$ e la proprietá di intralacciamento degli operatori d'onda, dalla compattezza di

$$g_1(H) (W_{\pm} - I) g_2(H_0) P_A^{\pm}$$

si deduce la compattezza di

$$(W_{\pm} - I) g(H_0) P_A^{\pm}, \quad g(H) (W_{\pm} - I) P_A^{\pm} \quad 18.11$$

Per dimostrare la completezza asintotica, dimostriamo preliminarmente che che $\sigma_s(H) \cap I_0$ é un insieme discreto per ogni intervallo limitato aperto $I_0 \subset R$. Questo implica che non vi é spettro singolare continuo e che lo spettro discreto é composto da al piú un insieme numerabile di punti con molteplicitá finita. Sia $J \subset I_0$ relativamente compatto, e sia

$$g \in C_0^{\infty}, \quad g(\lambda) = 1, \lambda \in J$$

Poiché si ha sempre

$$\text{Range}(W_{\pm}) \subset \mathcal{H}_s^{\perp}$$

si ha sempre $P_s(H) W_{\pm} = 0$. Quindi

$$\begin{aligned} P_s(H) E_H(J) &= P_s(H) E_H(J) g(H) = P_s(H) E_H(J) g(H) (P_A^+ + P_A^-) \\ &= P_s(H) E_H(J) g(H) (I - W_+) P^+(A) + P_s(H) E_H(J) g(H) (I - W_-) P^-(A) \end{aligned} \quad 18.12$$

Da (18.11) segue che $P_s(H)E_H(J)$ é compatto, e quindi di rango finito essendo un proiettore.

Possiamo ora dimostrare che

$$\text{Range}(W_{\pm}) = \mathcal{H}_{a.c.}(H) \quad 18.13$$

Per ogni intervallo aperto limitato abbiamo dimostrato che $I_0/\sigma_p(H)$ é aperto. Sia $g \in C_0^\infty(I_0/\sigma_p(H))$. Dobbiamo dimostrare che

$$s - \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{itH_0} e^{-itH} \phi = W_{\pm}^* \phi \quad \phi \in \mathcal{H}_{a.c.}(H) \quad 18.14$$

Il procedimento che seguiremo é un tipico procedimento di *localizzazione* nello spettro di H . Scegliamo $\phi \in \mathcal{H}_{a.c.}$ tale che sia $\phi = g(H)\phi$ e calcoliamo (consideriamo solo il caso di W_+)

$$|e^{itH_0} e^{-itH} g(H)\phi - W_+^* g(H)\phi|_2 =$$

$$|((P_A^+ + P_A^-) e^{itH_0} e^{-itH} g(H)\phi - W_+^* g(H)\phi)|_2 \leq A_+(t) + A_-(t) \quad 18.15$$

dove abbiamo posto

$$A_{\pm}(t) \equiv |P_A^{\pm} (I - W_+^*) g(H) e^{-itH} \phi|$$

(abbiamo utilizzato la proprietá di intralacciamento di W_{\pm}).

Ma l'operatore $P_A^+(I - W_+^*)$ é compatto e $e^{-itH} \phi$ converge a zero debolmente; ne segue che $\lim_{t \rightarrow \infty} A_+(t) = 0$. D'altra parte si ha

$$A_-(t) \leq |P_A^- e^{-itH} g(H)\phi|_2 + |P_A^- e^{-itH_0} W_+^* g(H)\phi|_2 \quad 18.16$$

e le stime di propagazione (18.3) e (18.4) implicano

$$s - \lim_{t \rightarrow \infty} P_A^- e^{-itH_0} g(H_0) = 0 \quad 18.17$$

Da $W_+^* g(H)\phi = g(H_0)W_+^* \phi$ e da (18.10) segue che il secondo termine in (18.16) converge a zero quando $t \rightarrow \infty$.

D'altra parte

$$|P_A^- e^{-itH} g(H)\phi| \leq |P_A^- W_-^* e^{-itH} g(H)\phi| + |P_A^- e^{-itH} (I - W_-^*) g(H)\phi| \quad 18.18$$

ed entrambi i termini convergono a zero quando $t \rightarrow \infty$ per (18.11).

Questo conclude la dimostrazione del Teorema 18.1.

♡

Diamo ora un' indicazione di come possano essere ottenute le stime di propagazione (18.3) e (18.4) che abbiamo utilizzato nel corso della dimostrazione della completezza asintotica.

Per esporre il procedimento nella sua forma piú semplice consideriamo solo il caso $H_0 = -\Delta$ su $\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^n)$. Il caso in cui é presente un potenziale di corta portata ha una dimostrazione piú complessa ma sostanzialmente analoga. Scegliamo per A l'operatore di dilatazione

$$A = \frac{i}{2}(\nabla \cdot x + x \cdot \nabla)$$

Lemma 18.2

Gli operatori H_0 e A soddisfano le stime (18.3) e (18.4) per ogni $s > s' > 0$.
 \diamond

Dimostrazione

Definiamo $K_0 \equiv \log H_0$ mediante il calcolo funzionale. Utilizzando la trasformata di Fourier é facile dimostrare che su un dominio di essenziale autoaggiuntezza e invariante per entrambi gli operatori si ha $i(K_0 A - A K_0) = 2I$ e quindi

$$e^{itH_0} A e^{-itH_0} = A + 2tI \quad 18.19$$

Questo implica le stime di propagazione volute (18.3), (18.4) per opportune scelte di $s, s' > 1$

e inoltre

$$P_A^\mp e^{-itK_0} P_A^\pm = 0 \quad \forall \pm t > 0$$

Le stime di propagazione possono infatti ora essere ottenute mediante un'applicazione della trasformazione di Mellin unidimensionale, che ricordiamo brevemente.

Nello spazio degli impulsi il termine $e^{-itH_0} g(H_0)$ é rappresentato dalla funzione

$$e^{-itp^2} g(p^2) \equiv (p^2)^{-it} g(p^2)$$

Sia $g \in C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$.

Una semplice applicazione del teorema della fase non stazionaria dimostra che la funzione

$$G_t(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty e^{-it\rho} g(\rho) \rho^{-i\lambda-1} d\rho$$

soddisfa le seguenti stime, per opportune costanti C_N

$$|G_t(\lambda)| \leq C_N |t|^{-N} (1 + |\lambda|)^N \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad \forall N \geq 1 \quad 18.20$$

$$|G_t(\lambda)| \leq C_N (1 + |t + \lambda|)^N \quad \forall t, \lambda > 0 \quad \forall N \geq 1 \quad 18.21$$

Da (18.19), (18.20) segue per $s > 1$

$$|(I + A^2)^{-s/2} e^{-itK_0} (I + A^2)^{-s/2}| \leq \int_{-\infty}^\infty G_t(\lambda) (1 + |\lambda|)^{-s} d\lambda \leq C_{m,s} |t|^{-m} \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad 18.22$$

se $N < s - 1$. Inoltre si ha

$$(I + A^2)^{-s/2} e^{-itH_0} g(H_0) P_A^+ = G_t(\lambda) (I + A^2)^{-s/2} H_0^{i\lambda} P_A^+ d\lambda$$

L'integrale per $\lambda < 0$ viene stimato mediante la trasformata di Mellin (18.20)

$$\left\| \int_{-\infty}^0 G_t(\lambda) (I + A^2)^{-s/2} H_0^{i\lambda} P_A^+ d\lambda \right\| \leq C_{n,s} |t|^{-n} \quad 18.23$$

L'integrale su valori positivi di λ per ogni $m > 1$ viene stimato utilizzando (18.23)

$$\left| \int_0^{\infty} G_t(\lambda) ((1 + A^2)^{-s/2} H_0^{i\lambda} P_A^+ d\lambda \right\| \leq c \int_0^{\infty} (1 + t + \lambda)^{-m} d\lambda \leq ct^{-m+1} \quad 18.24$$

La dimostrazione del Lemma 18.2 viene completata per ogni $1 < s' < s$ per interpolazione partendo dalle stime (18.21) e (18.22).

♡

Il procedimento che abbiamo indicato per dimostrare la completezza asintotica nel caso di potenziali di piccola portata é un caso particolare del metodo dell' *operatore coniugato* introdotto in [ABG96] e [S97].

Dato un operatore autoaggiunto H su di uno spazio di Hilbert \mathcal{H} questo metodo si utilizza per analizzare le proprietà spettrali di H in un aperto $\Omega \in \mathbb{R}$ mediante un altro operatore autoaggiunto A con opportune proprietà.

Nelle applicazioni alla teoria dello scattering, l'operatore A é in generale il generatore delle dilatazioni, ma il metodo ha validità piú generale.

Il metodo dell'operatore coniugato ha la sua origine nella teoria di T.Kato delle *perturbazioni regolari* (*smooth perturbations*).

Richiamiamo brevemente questa teoria, seguendo [RSIV]

Definizione 18.3

Sia H autoaggiunto sullo spazio di Hilbert \mathcal{H} con risolvente $R(\mu) = \frac{1}{H - \mu I}$. Un operatore chiuso A viene detto essere *H-regolare* se per ogni $\phi \in \mathcal{H}$ ogni $\lambda \in \mathbb{R}$ e ogni $\epsilon \neq 0$ il vettore $R(\lambda + i\epsilon)\phi$ appartiene a $D(A)$ e inoltre

$$\|A\|_H \equiv \sup_{|\phi|_2=1, \epsilon>0} \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [|AR(\lambda + i\epsilon)\phi|_2^2 + |AR(\lambda - i\epsilon)\phi|_2^2] d\lambda < \infty \quad 18.25$$

◇

Sarà conveniente per il seguito riformulare questa condizione di regolarità utilizzando la seguente generalizzazione del classico Lemma di Plancherel.

Lemma 18.3 (Plancherel generalizzato)

Sia $\phi(x)$ un funzione misurabile da \mathbb{R} allo spazio di Hilbert separabile \mathcal{H} con la proprietà $\int |\phi(x)|_2 dx < \infty$.

Definiamo $\hat{\phi} : R \rightarrow \mathcal{H}$ mediante

$$\hat{\phi}(p) \equiv \frac{1}{2\pi} \int e^{-ipx} \phi(x) dx$$

Allora

$$\int |A\hat{\phi}(p)|_2^2 dp = \int |A\phi(x)|_2^2 dx \quad 18.26$$

◇

Dimostrazione

Diamo solo una traccia della dimostrazione.

Sia data una famiglia $\phi(x) \in \mathcal{H}$, $x \in R$. Sia A un operatore limitato e sia $\{\psi_n\}$ una base ortonormale in \mathcal{H} .

Per ogni n la funzione $(\psi_n, A\hat{\phi}(p)) = (A^*\psi_n, \phi(p))$ è la trasformata di Fourier di $(A^*\psi_n, \phi(x))$.

Quindi per il Lemma di Plancherel

$$\int |(\psi_n, A\hat{\phi}(p))|^2 dp = \int |(\psi_n, A\phi(x))|^2 dx$$

se uno degli integrali è finito.

Sommando su n dá (18.26) nel caso A limitato.

Se A è autoaggiunto ma non limitato consideriamo $E_{[-N, N]}A$ (la proiezione spettrale di A nell'intervallo $[-N, N]$). Allora vale (18.26) per $E_{[-N, N]}A$.

Se ψ e ϕ appartengono al dominio di A un procedimento di limite dá (18.26) anche in questo caso.

Se A non è autoaggiunto consideriamo l'operatore $|A| = \sqrt{A^*A}$. Si ha $D(|A|) = D(A)$ e $\| |A|\phi \|_2 = \| A\phi \|_2$. Quindi (18.26) vale anche in questo caso.

♡

Formuliamo ora il criterio di Kato in termini del gruppo unitario e^{itH} .

Lemma 18.4

L'operatore A è H -regolare se e solo se per ogni $\phi \in \mathcal{H}$ si ha $e^{itH}\phi \in D(A)$ e inoltre

$$\int_{-\infty}^{\infty} |Ae^{itH}\phi|_2^2 dt \leq (2\pi) \|A\|_H^2 |\phi|_2^2 \quad 18.27$$

◇

Dimostrazione

Sia $\epsilon > 0$. Si ha

$$\int_0^{\infty} e^{(-\epsilon + i\lambda - iH)t} \phi dt = -iR(\lambda - i\epsilon)\phi$$

e dal Lemma 18.3 segue

$$\int_{-\infty}^{\infty} |AR(\lambda + i\epsilon)\phi|_2'' d\lambda = 2\pi \int_0^{\infty} e^{-2\epsilon t} |Ae^{-itH}\phi|_2^2 dt$$

Prendendo il limite $\epsilon \rightarrow 0$ si conclude la dimostrazione del Lemma 18.4. ♡

La connessione tra H -regolarità dell'operatore A e proprietà dello spettro di H è data dal seguente Teorema

Teorema 18.5

Se A è H -regolare, allora il codominio di A^* è contenuto nello spettro assolutamente continuo di H . ♡

Dimostrazione

Sia $\phi \in D(A^*)$ e poniamo $\psi = A^*\phi$. Indichiamo con $d\mu_\psi$ la misura spettrale di H associata a ψ . Definiamo

$$F(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-itx} d\mu_\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (A^*\phi, e^{-itH}\psi) \quad 18.28$$

Allora $|F(t)| \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} |\phi|_2 |Ae^{-itH}\psi|_2$ e il Lemma 18.4 garantisce che $F \in L^2$ e quindi $d\mu_\psi$ è assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue. ♡

Dimostriamo ora il teorema di Kato-Putnam che connette la H -regolarità con le stime dei commutatori.

Teorema 18.6 (Kato-Putnam)

Siano A e H autoggiunti. Supponiamo che il commutatore $C \equiv i[H.A]$ sia un operatore positivo. Allora l'operatore \sqrt{C} è H -regolare.

Se il nucleo di C è vuoto, allora H ha spettro assolutamente continuo. ◇

Dimostrazione

La seconda affermazione del teorema segue dalla prima; infatti il nucleo $\text{Ker}\sqrt{C}$ coincide con il complemento ortogonale del codominio di C .

Per la prima affermazione, notiamo che $\frac{d}{dt}[e^{itH}Ae^{-itH}] = e^{itH}Ce^{-itH}$ e quindi

$$\int_s^t (\psi, e^{itH}Ce^{-itH}\psi) dt = (\psi, e^{itH}Ae^{-itH}\psi) - (\psi, e^{isH}Ae^{-isH}\psi)$$

Ne segue

$$\int_s^t |\sqrt{C}e^{-i\tau H}\psi|_2^2 d\tau \leq 2\|A\|\|\psi\|_2^2$$

Essendo s e t arbitrari ne segue che \sqrt{C} è H -regolare e $\|C\|_H^2 \leq \frac{\|A\|}{\pi}$.



Una generalizzazione del teorema di Kato-Putnam é stata data in [M81]. Il metodo, che chiameremo *metodo del commutatore positivo* permette di dedurre varie stime *sulla risolvente di H* da *una stima di positività di un commutatore*

$$P_I(H)[H, iA]P_I(H) \geq aP_I(H) \quad a > 0 \quad 18.29$$

(dove I é un insieme aperto finito contenuto nello spettro di H).

La stima piú utile per la teoria dello scattering é il

principio di assorbimento limite

$$\sup_{z \in J^\pm} \|(1 + A^2)^{-s/2}(H - z)^{-1}(1 + A^2)^{-s/2}\| < \infty \quad 18.30$$

per tutti gli intervalli chiusi $J \subset I$ e ogni $s > \frac{1}{2}$.

Le richieste sull'operatore A sono le seguenti

i)

L'applicazione

$$s \rightarrow e^{-isA} f(H) e^{isA} \phi \quad 18.31$$

é due volte differenziabile (in s) con continuità per ogni $f \in C_0^\infty(I)$ e ogni $\phi \in \mathcal{H}$. Abbiamo utilizzato la notazione $H \in C^k(A)$ per affermare che l'applicazione (18.31) é k -volte differenziabile.

ii)

Per ogni $\lambda \in I$ esistono un intorno Δ strettamente contenuto in I e una costante positiva a tali che

$$E_\Delta(H)[H, iA]E_\Delta(H) \geq aE_\Delta(H) \quad 18.32$$

dove E_Δ é il proiettore spettrale di H nell'intervallo Δ .

Notiamo che in virtú di i) il commutatore $[H, A]$ é ben definito come forma quadratica su $\cup_K E_K(H)\mathcal{H}$ dove l'unione é fatta sui compatti contenuti in Ω .

Nei lavori citati di Amrein et al. si dimostrano i seguenti risultati.

a)

Per tutti gli $s > \frac{1}{2}$ ed ogni $\phi, \psi \in \mathcal{H}$, uniformemente per λ in ogni sottoinsieme compatto di I , esiste il limite

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} (\psi, (I + A^2)^{-\frac{s}{2}} \frac{1}{H + \lambda \pm i\epsilon} (I + A^2)^{-\frac{s}{2}} \phi) \quad 18.33$$

Questo implica in particolare che lo spettro di H in I é puramente assolutamente continuo.

b)

Se $\frac{1}{2} < s < 1$ e $f \in C_0^\infty$ allora, con $\langle A \rangle \equiv (I + A^2)^{\frac{1}{2}}$

$$\| \langle A \rangle^{-s} e^{-itH} f(H) \langle A \rangle^{-s} \| = O(t^{\frac{1}{2}-s}) \quad 18.34$$

Queste stime di decadimento giocano un ruolo importante nello studio della completezza asintotica.

c)

Sotto l'ulteriore ipotesi che l'applicazione definita in (18.31) sia quattro volte differenziabile in s per tutti gli intervalli chiusi $J \subset I$

$$\sup_{z \in J^\pm} \| P_\pm(A)(H - z)^{-1} P_\mp(A) \| < \infty \quad 18.35$$

dove $P_\pm(A)$ è l'operatore di proiezione spettrale dell'operatore A sulla parte positiva (rispettivamente negativa) dello spettro.

Nel caso in cui A sia l'operatore di dilatazione, $P_\pm(A)$ viene interpretata come proiezione sul sottospazio degli stati *uscenti* (rispettivamente *entranti*).

Rimandiamo ai lavori sopra citati per un'analisi più dettagliata e per le dimostrazioni.

18.1 IL SISTEMA A N CORPI QUANTISTICO; STRUTTURA SPETTRALE E SCATTERING

Utilizzeremo la strategia esposta nella prima parte di questo Capitolo e i risultati dei Capitoli precedenti per studiare il problema a N-corpi nei suoi aspetti generali e nel suo comportamento asintotico.

Per un'analisi più completa e per ulteriori riferimenti bibliografici si può vedere ad esempio [HS95], [HS00]

Il sistema a N corpi consiste in una collezione di N particelle di masse $\{m_k\}$, $m_k > 0$ ciascuna descritta da coordinate $x_k \in R^3$ e interagenti tra loro mediante forze di natura potenziale.

Gran parte del contenuto di questo capitolo vale anche in R^d , $d \neq 3$.

Introduciamo in R^{3N} il prodotto scalare $\langle x, y \rangle \equiv \sum_k m_k \langle x_k, y_k \rangle$. Con questa notazione l'energia cinetica classica è $T = \frac{1}{2} \langle \dot{x}, \dot{x} \rangle$.

Scegliendo unità di misura opportune scriviamo l'operatore di Schroedinger nella forma

$$H = -\frac{1}{2} \Delta + V(x), \quad x \equiv \{x_1, \dots, x_N\} \quad x_k \in R^3 \quad 18.36$$

e assumiamo che V sia invariante per traslazioni in R^3 (cioè $\forall a \in R^3, V\{x_i\} = V\{x_i + a\}$).

In questo caso il moto del baricentro è libero e lo spazio di Hilbert ha una decomposizione naturale

$$\mathcal{H} \equiv L^2(R^3) \otimes L^2(X), \quad X \equiv \{x_1, \dots, x_n\}, \quad x_k \in R^3, \quad \sum_k m_k x_k = 0$$

Questa fattorizzazione é invariante per l'evoluzione generata da H .
 Assumiamo anche che il potenziale abbia la forma

$$V(x) = \sum_{i < k} V_{i,k}(x_i - x_k), \quad \lim_{|y| \rightarrow \infty} V_{i,k}(y) = 0 \quad 18.37$$

E' importante notare che (18.37) *non implica* $\lim_{|x| \rightarrow 0} V(x) = 0$.

Infatti quando $|x| \rightarrow \infty$ vi possono essere direzioni in cui $x_i - x_k$ rimane limitato per qualche valore degli indici.

Questo corrisponde alla nostra intuizione che un insieme di N particelle non può essere studiato matematicamente se non viene indicato un meccanismo attraverso il quale in corrispondenza ad alcuni dati iniziali e in un futuro molto remoto esso può essere suddiviso in sottoinsiemi isolati uno dall'altro.

Ne segue che il modo migliore per studiare il comportamento asintotico (nel tempo) del sistema consiste nell'individuare direzioni che corrispondono a frammentazioni in sottosistemi.

Una trattazione matematica richiede quindi l'utilizzazione di funzioni sullo spazio delle configurazioni R^{3N} ma anche di funzioni su sottospazi corrispondenti ai diversi frammenti.

Questo può essere fatto introducendo N vettori a_k , $k = 1, \dots, N$ in R^3 e studiando le frammentazioni che corrispondono alla traslazione $x_k \rightarrow x_k + \lambda a_k$ per λ molto grande.

Naturalmente la frammentazione può essere completa solo nel limite $\lambda \rightarrow \infty$ ma le ipotesi fatte sui potenziali $V_{i,k}$ garantiscono che l'errore fatto per λ finito é trascurabile se λ é molto grande.

Notiamo che se $a_k = a_h$ si ha che $x_k - x_h$ é invariante per la traslazione effettuata. I canali (o *aggregati*, in inglese *clusters*) sono dunque individuati dai sottospazi chiusi $\Lambda_{I_1, \dots, I_s}$ di R^{3N} definiti da

$$\Lambda_{I_1, \dots, I_s} \equiv \{a \in R^{3N}, \quad k = 1, \dots, s \quad \{i, j\} \in I_k \leftrightarrow a_i = a_j\}$$

dove I_k sono insiemi disgiunti di indici.

All'interno di un canale associato ad uno di questi sottospazi le traslazioni considerate sono traslazioni rigide del sistema di punti corrispondenti a ciascuna partizione.

Questa partizione in canali permetterà di studiare il comportamento asintotico del sistema considerando separatamente la sua proiezione sui diversi canali.

I sottoinsiemi $\Lambda_{\Sigma_1, \dots, \Sigma_n}$ formano un reticolo ortocomplementato L chiuso per intersezione (con $\emptyset \in L$).

Utilizzeremo sempre il sistema di riferimento in cui il baricentro é fermo e quindi considereremo sempre come reticolo quello ottenuto intersecando L con X .

Notare che, per ogni $P \in L$ é unica la decomposizione ortogonale

$$X = P \oplus P^\perp \quad 18.38$$

e quindi ogni $x \in X$ può essere decomposto in modo unico in

$$x = x_P + x^P, \quad x_P \in P, \quad x^P \in P^\perp$$

Le x^P sono coordinate relative all'interno di ciascun aggregato, le coordinate x_P sono le coordinate dei baricentri di ciascun aggregato.

Conseguentemente avremo

$$\sum_k M_k x_k = 0$$

dove abbiamo indicato con M_k la massa totale del k^{mo} aggregato della partizione considerata.

Ad esempio se $N = 4$ ed il canale (partizione) P è descritto da $\{1, 2\}, \{3, 4\}$ e le particelle hanno tutte la stessa massa m si ha

$$x_P = (\eta, -\eta), \quad x^P = (x_1 - \frac{1}{2}\eta, x_2 - \frac{1}{2}\eta, x_3 + \frac{1}{2}\eta, x_4 + \frac{1}{2}\eta) \quad 18.39$$

dove abbiamo indicato con $\eta, -\eta$ le coordinate dei baricentri dei due aggregati.

Notiamo ora che per ogni partizione P possiamo scrivere

$$V(x) = V^P(x^P) + R_P(x) \quad |R_P| \leq f(|x_P|), \quad f(s)_{s \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad 18.40$$

Il termine R_P è la somma dei potenziali tra coppie di corpi che non appartengono ad uno stesso aggregato (e quindi per ipotesi $\lim_{|x| \rightarrow \infty} R_P(x) = 0$).

Il termine V^P è la somma dei potenziali tra coppie di corpi che appartengono ad uno stesso aggregato.

Poniamo

$$H_P \equiv H - R_P = -\frac{1}{2}\Delta + V^P(x^P) \quad 18.41$$

Ci aspettiamo che H_P descriva con buona approssimazione il moto del sistema quando le distanze tra gli aggregati relativi alla partizione P diventano molto grandi.

Questo ci fa presumere che a (quasi) ogni dato iniziale ϕ si possano associare dati $\phi_P, P \in L$ che sono funzioni solo delle x^P e sono tali che, asintoticamente per tempi t molto grandi si abbia

$$e^{-iHt}\phi \simeq \sum_P e^{-iH_P t}\phi_P \quad 18.42$$

In altre parole, ci aspettiamo che per quasi ogni dato iniziale per tempi molto lunghi il sistema ci appaia decomposto in aggregati, ciascuno dei quali descrive il moto di punti materiali che interagiscono tra loro e restano (approssimativamente) confinati in una regione finita dello spazio.

Per dimostrare (18.42) sarà necessario [HS00]

a)

Dare delle *stime di propagazione* che garantiscono che per il dato iniziale ϕ la decomposizione (18.40) diventa sempre piú accurata al crescere di t .

b)

Dare delle *stime di allontanamento* che garantiscano che quando t é abbastanza grande i diversi aggregati si sono sufficientemente allontanati tra loro

Utilizziamo una decomposizione regolare dello spazio delle configurazioni (mediante funzioni C^∞ che costituiscano una partizione regolare dell'unitá) che a distanze molto grandi tenda a coincidere con la partizione negli elementi P di L .

Questa partizione é composta da funzioni F_k^P di classe C^∞ che sommano localmente ad uno e sono una *it mollificazione* delle funzioni indicatrici degli insiemi associati alla partizione data.

Possiamo scegliere funzioni F_k^P che dipendono dal tempo (cosí che la partizione dipende dal tempo) e tali che tendano per $t \rightarrow \infty$ a funzioni indicatrici (cosí che la partizione tende alla partizione in canali).

La possibilitá di svolgere questo programma dipende dalla possibilitá di dare stime accurate sul comportamento spaziale di $e^{-iHt}\phi$ per t molto grande.

Queste stime a loro volta sono legate a stime di compattezza, connesse alle proprietá del nucleo integrale dell'operatore $(H - z)^{-1}$, $z \in C - \sigma(H)$ e in larga misura sono conseguenza del *principio di indeterminazione* che provvede un limite inferiore, a ciascun istante t , al prodotto delle dispersioni in posizione e in impulso di $e^{-iHt}\phi$.

Questo procedimento permette di estendere al caso di N corpi, $N \geq 3$, le stime che caratterizzano i metodi di Enss e di Mourre.

La possibilitá di utilizzare queste stime rende il problema di scattering per il problema degli N corpi quantistico piú semplice del corrispondente problema classico; in quest'ultimo la decomposizione secondo direzioni asintotiche *risulta troppo fine* e rende impossibile una decomposizione misurabile.

In Meccanica Quantistica lo spazio in cui verrá analizzato il sistema sará quindi

$$\mathcal{K} \equiv \oplus_{\alpha_1, \dots, \alpha_K} \otimes L^2((R^3)^{n_{\alpha_k}}) \tag{18.43}$$

dove K é il numero di *canali* (frammentazioni, partizioni) possibili, α_k indica un generico canale e n_{α_k} é il numero di particelle nel canale α_k .

Ad esempio se $N = 3$ i canali possibili sono

$$\{1, 2, 3\}, \{1, 2\}\{3\}, \{1\}\{2, 3\}, \{1, 3\}\{2\}, \{1, \}\{2\}\{3\}$$

In questo caso si ha

$$\mathcal{K} = L^2(R^3) \oplus [L^2(R^3) \otimes L^2((R^3)^2)]^3 \oplus L^2((R^3)^3)$$

Il primo canale corrisponde a stati legati di tutte le tre particelle, i tre canali successivi corrispondono a stati asintotici in cui due particelle formano uno stato legato che non interagisce con la terza particella, e infine il quinto canale corrisponde a stati asintotici in cui le tre particelle non interagiscono tra loro. Naturalmente alcuni di questi canali possono essere assenti.

Appare chiaro che se esistono almeno due canali lo spazio di Hilbert \mathcal{K} non é isomorfo in modo naturale a $L^2((R^3)^N)$ e contiene questo spazio come sottospazio proprio.

Quindi l'analisi che faremo sará un' analisi *asintotica* adattata alla teoria dello scattering.

Per fissare le idee, supponiamo di considerare il sistema sia composto dal nucleo dell'atomo di elio e da due elettroni.

In questo caso il primo canale comprenderá gli stati legati dell'atomo di elio, il secondo e il terzo saranno identici tra loro e saranno parametrizzati dagli insiemi composti dagli gli stati legati dall'atomo di elio ionizzato e da un elettrone posto a distanza *molto grande* .

Il quarto canale non sará presente (sarebbe costituito dagli stati legati del sistema di due elettroni e un nucleo di elio posto a distanza molto grande), e infine il quinto canale é parametrizzato dagli insiemi costituiti dal nucleo di elio e dai due elettroni posti tutti a distanza relativa molto grande.

Queste parametrizzazioni (tranne la prima) sono in realtà intese riferirsi a *stati scattering*.

Vi sono pertanto due parametrizzazioni *tra loro inequivalenti* riferite a stati asintotici rispettivamente nel passato e nel futuro.

Ad esempio un canale che venga individuato nel remoto passato come composto da un atomo di elio ionizzato ed un elettrone *libero* puó nel lontano futuro avere componenti sia nello stesso canale sia nel canale parametrizzato da due elettroni liberi e un nucleo di elio.

Infatti questi canali contengono stati con lo stesso contenuto di energia (nel senso della schiera spettrale di H) del canale di partenza.

Questo corrisponde al fatto che uno stato iniziale contenente un elettrone libero molto lontano da un atomo di elio parzialmente ionizzato puó dar luogo per tempi molto remoti nel futuro, energia permettendolo, a uno stato in cui i due elettroni sono entrambi liberi (ionizzazione completa).

Questo spiega perché sia molto piú difficile la trattazione di un sistema a N corpi rispetto alla trattazione del problema di interazione di una particella con un potenziale.

Prima di analizzare almeno a grandi linee il problema degli N corpi nella forma che abbiamo indicato, ricordiamo alcune proprietà generali dell'operatore di Schroedinger.

Faremo sempre l'ipotesi che il potenziale V appartenga localmente a $L^2(X)$ e sia di classe Kato, esistono cioè $0 < \alpha < 1$ e $\beta > 0$ tali che

$$|V\phi|_2 \leq \frac{\alpha}{2}|\Delta\phi|_2 + \beta|\phi|_2 \quad \forall \phi \in C_0^\infty(X) \quad 18.44$$

Ricordiamo che se V é di classe Kato allora $H \equiv -\Delta + V$ é autoaggiunto con dominio uguale al dominio di Δ ed é limitato dal basso.

Notare che $V \equiv \sum_{i < j} V_{i,j}(x_i - x_j)$ é localmente in $L^2(R^{3N})$ se ciascuno dei potenziali $V_{i,j}$ é in $L^2(R^3)$ e inoltre che V é di classe Kato se per ciascuna coppia i, j lo é $V_{i,j}(y)$ rispetto a Δ_y .

Il teorema di Kato garantisce allora che é ben posta la formulazione dinamica del problema degli N corpi quantistico .

Siccome H é autoaggiunto risulta definita mediante la sua rappresentazione spettrale la *distribuzione di energia* dello stato ϕ come distribuzione di probabilità sullo spettro di H .

Lo spazio di Hilbert considerato é somma diretta del sottospazio \mathcal{H}_B relativo allo spettro puntuale di H e del sottospazio \mathcal{H}_C in cui la misura spettrale é continua (non necessariamente assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue).

Queste considerazioni possono essere fatte per ciascuno degli spazi di Hilbert e hamiltoniane relativi ai diversi canali.

Notiamo anche che corrispondentemente a ciascun canale (partizione) P la (18.40) permette di scrivere la Hamiltoniana H nella forma

$$H = H_P + R_P, \quad |R_P| \leq f(|x_P|), \quad \lim_{s \rightarrow \infty} f(s) = 0 \quad 18.45$$

dove H_P costituisce la hamiltoniana di un sistema a N corpi in cui sono soppresse tutte le interazioni tra particelle in aggregati diversi.

La hamiltoniana H_P é somma di operatori H_k che agiscono indipendentemente nello spazio prodotto diretto degli spazi di Hilbert associati a ciascun cluster.

Ciascun H_k nel corrispondente sottospazio soddisfa la condizioni per l'applicabilitá del teorema di Ruelle.

Nel Capitolo 10 abbiamo dimostrato (teorema di Ruelle) sotto le ipotesi fatte qui sul potenziale V se

$$f \in L^\infty \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} f(|x|) = 0$$

e se per ogni $z \in \rho(H)$ l'operatore $f(x)(z - H)^{-1}$ é compatto, allora, indicando con ξ_R la funzione indicatrice della palla di raggio R in R^d

$$\begin{aligned} i) \quad \phi \in \mathcal{H}_B &\leftrightarrow \lim_{R \rightarrow \infty} |(I - \xi_R)e^{-iHt}\phi| = 0 \\ ii) \quad \phi \in \mathcal{H}_C &\leftrightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1} \int_0^t ds |\xi_R e^{-iHs}\phi|^2 = 0 \quad \forall R < \infty \end{aligned} \quad 18.46$$

Per applicare il teorema di Ruelle notiamo innanzitutto che se V è piccolo rispetto a H nel senso di Kato e se $\lim_{t \rightarrow \infty} V(x) = 0$ allora $V(H + iT)^{-1}$ è compatto.

Per dimostrarlo notare che V può essere approssimato con una funzione $\xi_R \cdot V$ a supporto compatto.

Analogamente si può sostituire la funzione la funzione $h(p) = (1 + p^2)^{-1}$ con la sua restrizione $h_R(p)$ ad una palla di raggio R commettendo un errore $f_R(p) \leq 2(R^2 + p^2)^{-1}$.

Un calcolo esplicito dimostra che l'operatore $V_R \cdot h_R(i\nabla)$ è un operatore di Hilbert-Schmidt. Pertanto $V(H+i)^{-1}$ differisce da un operatore di H.S. per un operatore la cui norma è limitata da

$$C_1 |p^2 f_R(p)| + |f_R(p)| \quad C_1 = \left\| \frac{2}{R^2 + p^2} \right\|$$

Questo termine può essere reso arbitrariamente piccolo per R grande.

Dunque $V(H + iT)^{-1}$ è limite in norma di operatori di Hilbert-Schmidt ed è dunque compatto.

Ne segue che per i potenziali a N corpi che stiamo considerando possiamo fare uso del teorema di Ruelle per analizzare all'interno di ciascun aggregato il comportamento del sistema per la dinamica definita dalla hamiltoniana H_P .

L'analisi delle partizioni può essere fatta per induzione.



Nota 18.3

In Meccanica Quantistica, quando si considerano particelle identiche, lo spazio delle configurazioni è un sottospazio di $L^2(X)$ corrispondente a una rappresentazione irriducibile del gruppo della permutazioni (in generale rappresentazioni di dimensione uno).

Il formalismo che descriviamo si adatta a questi casi semplicemente restringendo le stime a questi sottospazi.

E' naturalmente necessario che tutti gli operatori introdotti siano invarianti per permutazione degli indici di particella.



Discutiamo innanzitutto le proprietà spettrali dell'operatore di Schroedinger per il sistema in esame.

Ricordiamo che per un operatore autoaggiunto H indichiamo con $\sigma_{disc}(H)$ la collezione di tutti gli autovalori isolati di molteplicità finita e indichiamo con $\sigma_{ess}(H)$ il complemento di $\sigma_{disc}(H)$ in $\sigma(H)$.

Si ha, nelle notazioni introdotte precedentemente

$$H = H_P + H^P + R_P \quad H_P = -\frac{1}{2} \Delta_P \otimes I + I \otimes H^P, \quad H^P \equiv -\frac{1}{2} \Delta^P + V^P \quad 18.47$$

dove Δ_P e Δ^P sono i laplaciani nelle coordinate x_P e x^P rispettivamente.

Se P non é vuoto, si ha $\sigma(-\Delta_P) = [0, +\infty)$ e pertanto

$$\sigma(H_P) = [\mu_P, +\infty), \quad \mu_P \equiv \inf \sigma(H_P) \tag{18.48}$$

(μ_P é la minima energia possibile per un sistema composto dai sottoinsiemi descritti da P e non interagenti tra loro).

Notiamo che, come ci si aspetta fisicamente, se c'è piú interazione l'estremo inferiore dello spettro può scendere. Infatti

Lemma 18.7

Se $P < Q$ allora $\sigma(H_Q) \subset \sigma(H_P)$.

◇

Dimostrazione

Per definizione si ha $H_P = H_Q + R_{P,Q}$. Sia T_s l'operatore di traslazione per $s \in Q^*$ dove $Q^* \equiv Q - \cup_{C \subset Q}$. Poiche T_s commuta con H_Q si ha

$$|(\lambda I - H_P)T_s \phi| \leq |(\lambda I - H_Q)\psi| + |R_{P,Q}T_s \phi| \tag{18.49}$$

Sia $\lambda \in H_Q$. Allora il primo termine a destra può essere reso arbitrariamente piccolo per un'opportuna scelta di ϕ ed il secondo termine può essere reso arbitrariamente piccolo per s opportunamente grande, per le proprietà di $R_{P,Q}$. Ne segue che per un'opportuna scelta di ϕ il termine a sinistra può essere reso arbitrariamente piccolo, e questo implica $\lambda \in \sigma(H_P)$.

♡

Si noti che per ciascuna scelta di frammentazione lo spazio di Hilbert in cui si descrive il sistema é sempre $L^2((R^3))^N$ ma le hamiltoniane approssimate che si utilizzano sono diverse, ciascuna adeguata alla frammentazione considerata.

Dal Lemma 18.7 segue che

$$\sigma(H) \supset [\mu, +\infty) \quad \mu \equiv \min_{P > \emptyset} \mu_P$$

In effetti vale l'uguaglianza.

Teorema 18.8 (Zhislin)

$$\sigma_{ess}(H) = [\mu, +\infty) \tag{18.50}$$

◇

Dimostrazione

Diamo in dettaglio questa dimostrazione perché essa é il prototipo di tutte le dimostrazioni successive.

La strategia é quella di approssimare la *decomposizione in canali* mediante una partizione regolare dell'unità in X in modo tale che almeno per $|x|$ grandi venga *quasi riprodotta una partizione data dal reticolo L* , con una buona stima dell'errore commesso.

Un passaggio a limite dimostrerá poi (18.50).

Ricordiamo che una partizione regolare dell'unitá in X é una collezione finita di funzioni reali regolari su X , $j_\alpha \in C^\infty$ (le chiameremo *elementi di partizione*) tali che

$$\sum_{\alpha} j_{\alpha}^2 = 1 \tag{18.51}$$

(la scelta del quadrato in (18.51) sará utile in seguito).

La partizione in canali puó invece essere vista come individuazione in X di iperpiani, e in questo senso associa ad ogni canale (tranne la partizione \emptyset) un prodotto di distribuzioni δ .

Per rendere adeguata al reticolo L la partizione dell'unitá prenderemo come indici α precisamente le partizioni $A \in L$.

In un certo senso la scelta delle funzioni j_α corrisponde ad addolcire le distribuzioni δ con cui possiamo individuare una partizione e a sostituirle con funzioni di classe C^∞ con supporto in un intorno conico dell'origine in X (daremo qui sotto i dettagli di una possibile costruzione).

Se le funzioni j_α dipendono dal tempo l'angolo solido del cono deve rimanere finito per $-T \leq t \leq T$ dove $T < +\infty$, ma puó reso arbitrariamente piccolo per $t \rightarrow \infty$ se ci interessa solo il comportamento asintotico per tempi grandi (per il teorema di Ruelle in ciascun canale gli stati che interessano in teoria dello scattering possono essere visti come localizzati all'infinito).

Questo dará luogo alle stime asintotiche che studieremo.

Notiamo l'identitá, valida sul dominio di definizione di tutti i termini

$$H = \sum_{\alpha} j_{\alpha} H j_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} [j_{\alpha}, [j_{\alpha}, H]] \tag{18.52}$$

Ricordando che $\sum_{\alpha} j_{\alpha}^2 = 1$ e la definizione di H si vede che (18.52) puó essere messa nella forma

$$H = \sum_{\alpha} j_{\alpha} H j_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (|\nabla j_{\alpha}|^2) \tag{18.53}$$

Abbiamo utilizzato il fatto che, con le nostre notazioni, il termine $[j_{\alpha}, H]$ dipende solo dalle coordinate di posizione in P^\perp .

Per ogni partizione P costruiamo il corrispondente elemento di partizione $j_{\alpha(P)}$ nel modo seguente.

Se $P \equiv \{\emptyset\}$ (cioé se la partizione considerata é $\{x_1\}, \dots, \{x_N\}$) poniamo $j_{\alpha, \emptyset}^2 \equiv 1 - \sum_{P \neq \emptyset} j_P^2$.

Se $P \neq \emptyset$ consideriamo il ricoprimento aperto della sfera unitaria $S^1 \subset X$ ottenuto come

$$S_P \equiv \{x, : |x| = 1, |x_P| \neq 0\}$$

e la corrispondente partizione dell'unitá $J_{\alpha(P)}$, $supp(J_{\alpha(P)}) \subset S_P$.

Notiamo che, siccome $J_{\alpha(P)}$ ha supporto compatto, per ogni P esiste $\epsilon > 0$ tale che per ogni $x \in \text{supp} J_{\alpha(P)}$ si ha $|x_P| > \epsilon$.

Le funzioni J_{α} sono cosí definite sulla sfera unitaria. Le estendiamo a funzioni definite su tutto X nel modo seguente:

per $|x| < 1$ scegliamo una qualunque estensione che soddisfi (19.51)

per $|x| > 1$ poniamo $j_{\alpha}(x) \equiv J_{\alpha}(\frac{x}{|x|})$

Le funzioni cosí definite hanno le seguenti proprietá

$$\begin{aligned} |x| > 1, \quad \lambda \geq 1 &\rightarrow j_{\alpha}(\lambda x) = j_{\alpha}(x) \\ |x| \geq 1, \quad x \in \text{supp} j_{\alpha(P)} &\rightarrow |x|_P \geq \epsilon|x| \end{aligned} \tag{18.54}$$

Nel caso di potenziali a due corpi di tipo Coulombiano é facile vedere che (18.54) implica per ogni partizione P

$$|\nabla j_{\alpha(P)}| = O(\frac{1}{|x|}), \quad |x| \rightarrow \infty$$

Dunque il secondo termine a destra nella (18.54) é compatto relativamente a H .

Nel primo termine, posto $H = H_P + R_P$ notiamo che $j_{\alpha(P)}R_Pj_{\alpha(P)}$ é un potenziale di classe Kato rispetto a H_P e che si annulla all'infinito.

Anche esso é pertanto compatto rispetto ad H_P . Dunque si ha

$$H = j_{\alpha(P)}H_Pj_{\alpha(P)} + K \tag{18.55}$$

dove K é compatto relativamente a H_P . Dal teorema di Weyl si deduce

$$\sigma_{ess}(H) = \sigma_{ess}(\sum_P j_{\alpha(P)}H_Pj_{\alpha(P)}) \tag{18.56}$$

Notiamo ora che si ha, per qualunque partizione P si ha $H_P \geq \mu I$ (per la definizione di μ). Dunque

$$\sum_P j_{\alpha(P)}H_Pj_{\alpha(P)} \geq \mu \sum_P j_{\alpha(P)}^2 = \mu$$

Da qui si deduce

$$\sigma_{ess}(H) \subset [\mu, +\infty) \tag{18.57}$$

Poiché l'inclusione inversa é già stata dimostrata, questo conclude la dimostrazione del teorema di Zhislin.

♡

Nota 18.4

Si noti il *doppio commutatore* come termine che dá l'errore rispetto alla somma di

$$j_{\alpha(P)} H j_{\alpha(P)}, \quad P \in L$$

L'uso di questi doppi commutatori sarà importante in seguito.

Notare anche che, almeno formalmente, se le funzioni di partizione venissero sostituite con distribuzioni con supporto dato da iperpiani, l'errore riguarderebbe la regione di intersezione degli iperpiani..



18.2 STRUTTURA DELLO SPETTRO CONTINUO

Vogliamo ora studiare la struttura dello spettro di H in $[\mu, +\infty)$. Questo sarà necessario per giungere alla decomposizione asintotica.

In particolare dimostreremo che lo spettro in questa regione é assolutamente continuo, cosa essenziale per impostare la teoria della scattering e dimostrare la completezza asintotica, a sua volta strettamente connessa alla completezza della decomposizione.

Iniziamo con alcune considerazioni qualitative, che possono orientare nella comprensione dei procedimenti di stime a-priori che indicheremo in seguito.

Questo ci permetterà di vedere anche un nuovo ruolo dei doppi commutatori e del gruppo della dilatazioni.

E' comprensibile che questo gruppo giochi un ruolo importante perché studieremo il comportamento per λ molto grande dopo che alcune delle coordinate sono scalate secondo $x_i \rightarrow \lambda x_i$.

Basandoci sull'esperienza acquisita nello studio dello scattering da potenziale ci aspettiamo che nei diversi canali il comportamento asintotico per $t \rightarrow \pm\infty$ del sistema approssimi un moto *libero*; cosa debba intendersi per moto libero dipende naturalmente dal canale scelto.

Ci aspettiamo altresí che, se la funzione d'onda ϕ ha uno spettro di impulso molto localizzato, si abbia in qualche senso

$$(\phi_t, x^2 \phi_t) = \frac{1}{2} \theta_E t^2 (1 + O(t^{-1})), \quad t \rightarrow \infty \quad 18.58$$

dove θ_E deve essere in qualche modo connessa al quadrato di una velocità di gruppo.

La (18.53) può essere espressa anche come

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle_t \simeq \theta_E, \quad t \rightarrow \infty \quad 18.59$$

Svolgendo il calcolo del termine a sinistra

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle_t = \langle i[H, A] \rangle_t, \quad A \equiv i[H, x^2] = \frac{1}{2}(x.p + p.x)$$

da cui

$$i[H, A] = p^2 - x \cdot \nabla V(x), \quad p \equiv i\nabla \tag{18.60}$$

Da (18.58) e (18.59) ci aspettiamo che, se E non appartiene allo spettro puntuale di H , in particolare se appartiene allo spettro continuo, purché Δ sia abbastanza piccolo sia valida una disuguaglianza del tipo

$$B_\Delta(H) \equiv iE_\Delta(H)[H, A]E_\Delta(H) \geq (\theta_E - \epsilon_\Delta)E_\Delta(H) \tag{18.61}$$

per un opportuno ϵ_Δ con $\lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\epsilon_\Delta}{\Delta} = 0$.

Abbiamo denotato con E_Δ il proiettore spettrale di H associato all'intervallo Δ .

Nota 18.5

L'operatore A é autoaggiunto e ha come vettori analitici i vettori analitici dell'oscillatore armonico. Esso é *il generatore del gruppo delle dilatazioni* e sia ha

$$e^{i\lambda A} x e^{-i\lambda A} = e^\lambda x, \quad e^{i\lambda A} \hat{p} e^{-i\lambda A} = e^{-\lambda} \hat{p}$$



Nota 18.6

Se ϕ e ψ sono autovettori di H all'autovalore E si hanno le due relazioni equivalenti

$$(\phi, (x \cdot \nabla V)\psi) = 0, \quad \langle \phi, \hat{p}^2 \psi \rangle = \langle \phi, (x \cdot \nabla V)\psi \rangle$$

La seconda relazione viene spesso indicata con il nome di *teorema del Viriale*.



Dimostreremo (teorema di Mourre) che nel nostro contesto che vale (18.61) a meno dell'aggiunta di un operatore compatto.

Vedremo anche che θ_E é una funzione dei *valori di soglia* per H . A questo proposito, introduciamo una definizione.

Definizione 18.4

Un *valore di soglia* (o, brevemente *una soglia*) per H é un autovalore λ_i^P di H^P per qualche $P \neq \emptyset$. Si tratta quindi di stati legati in un sottocanalone non banale.



Per comprendere meglio la relazione tra θ_E e i valori di soglia, notiamo che per energie maggiori di λ_k^P ci aspettiamo di poter costruire stati che sono almeno approssimativamente prodotto diretto di uno stato legato di H^P , con autovalore λ_k^P e uno stato libero con quantità di moto p_P nel cluster complementare. L'evoluzione di questo stato é data allora, almeno in modo approssimato, da

$$\phi(t) \simeq e^{-(\frac{p_P^2}{2} + \lambda_P)t} \phi_P \otimes \phi^P, \quad \phi_P \in L^2(X_P), \quad H_P \phi_P = \lambda_P \phi_P \tag{18.62}$$

Per questo stato si ha

$$\langle x^2 \rangle_t \simeq \langle x_P^2 \rangle_t \simeq \langle p_P^2 \rangle_t \simeq 2(E - \lambda_P)t^2, \quad t \rightarrow \infty \quad 18.63$$

Da (18.63) deduciamo che per questi stati si ha $\frac{1}{2}\theta(E) \simeq E - \lambda_P$ se l'energia é concentrata intorno al valore E .

Questo argomento euristico suggerisce che, se uno stato ha energia approssimativamente E , e se indichiamo con λ_0 l'estremo inferiore dell'energia di uno stato di cluster, *rimane a disposizione* delle rimanenti particelle un'energia pari a $E - \lambda_0$.

Dobbiamo dunque aspettarci che (18.62) valga a meno di termini che riflettono proprietá del sistema a distanza finita.

Nota 18.7

Le affermazioni precedenti sulla stima di proprietá puramente locali sono una conseguenza del fatto che l'operatore $\xi_{R_1}(x) \cdot \xi_{R_2}(\hat{p}) \cdot \xi_{R_3}(x)$ é compatto per ogni scelta di R_1, R_2, R_3 finiti, dove $\xi_R(y)$ é la funzione indicatrice della palla di raggio R .



Da (18.62) dedurremo fra l'altro che gli autovalori non corrispondenti a soglie possono avere come punto d'accumulazione solo una soglia e sempre dal basso (questo é dovuto al fatto che gli stati legati hanno energia negativa).

D'altra parte le soglie sono autovalori di hamiltoniane che sono associate a un sottoinsieme. Ne segue che l'insieme delle soglie é chiuso e numerabile.

Studiamo piú in dettaglio il termine $i[H, A]$ dove A é il generatore del gruppo delle dilatazioni.

$$i[H, A] = -\Delta + x \cdot \nabla V \quad 18.64$$

Assumiamo che V sia tale che la funzione $W(x) \equiv x \cdot \nabla V$ (detto *viriale* di V), soddisfi le stesse condizioni che abbiamo imposto a V .

In particolare assumiamo che $V(x)$ sia un potenziale di classe Kato e in particolare che, posto

$$W(x) = \sum_m x_m \cdot \nabla_{x_m} \sum_{i < k} V_{i,k}(x_i - x_k) \equiv \sum_{i < k} W_{i,k}(x_i, x_k) \quad 18.65$$

si abbia

$$\lim_{|y| \rightarrow \infty} \sup_x W_{i,k}(x, y) = 0 \quad 18.66$$

Sotto queste ipotesi si puó dimostrare per il problema a N corpi il teorema del Viriale.

Lemma 18.9 (del Viriale)

Se valgono (18.65) e (18.66), e se ϕ e ψ sono autostati di H all'autovalore E allora

$$(\phi, [H, A]\psi) = 0 \quad 18.67$$

◇

Dimostrazione

Per la dimostrazione, conviene utilizzare una *regolarizzazione* dall'operatore di dilatazione A e poi passare al limite quando la regolarizzazione viene tolta. Utilizziamo la seguente regolarizzazione

$$A_\epsilon \equiv \frac{1}{2}[\hat{p}.xe^{-\epsilon x^2} + e^{-\epsilon x^2}x.\hat{p}], \quad \epsilon > 0 \quad x, p \in R^3$$

Poiché A_ϵ é limitato rispetto a \hat{p}^2 (questo non é vero per A) esso lascia invariante il dominio di \hat{p}^2 e su questo dominio si ha

$$[A_\epsilon, H]e^{-\epsilon x^2} = -\epsilon(\hat{p}.x)^2e^{-\epsilon x^2} - \epsilon(x.\hat{p})^2e^{-\epsilon x^2} - \epsilon e^{-\epsilon x^2}x.\nabla V(x) \quad 18.68$$

Poiché $\phi, \psi \in D(A_\epsilon)$ si ha $(\phi, [H, A_\epsilon]\psi) = 0$. Passando al limite $\epsilon \rightarrow 0$ si ottiene (18.67).

♡

Indichiamo con $\tau(H)$ l'insieme di tutte le soglie di H (ricordiamo che una soglia é un autovalore di H^P per qualche partizione).

Definiamo

$$\Theta(E) = \inf_{\lambda \in \tau(H), \lambda \leq E} 2(E - \lambda)\xi(E - \mu) \quad 18.69$$

dove $\mu \equiv \inf_{\lambda \in \tau(H)} \lambda$ e ξ é la funzione indicatrice del semiasse positivo. Si ha allora il seguente Teorema, dimostrato per il caso $N = 3$ da Mourre [M81] ed esteso al caso di N corpi in [PSS91].

Teorema 18.10 (Mourre)

Supponiamo che v e $x.\nabla V$ soddisfino (18.66).

Sia E_J la proiezione spettrale di H relativa all'intervallo J . Allora

i)

$\forall E \in R, \epsilon > 0$ esiste un operatore compatto K tale che

$$B_J(H) \equiv iE_J[H, A]E_J \geq (\Theta(E) - \epsilon)E_J + K \quad 18.70$$

ii)

Gli autovalori di H che non sono soglia hanno molteplicitá finita e possono accumularsi solo sulle soglie. Dunque l'insieme $\tau(H)$ é chiuso e numerabile.

◇

Nota 18.8

Useremo la notazione $J_n \rightarrow \{E_0\}$ per indicare una successione di intervalli che contengono E_0 , decrescenti e aventi $\{E_0\}$ per intersezione.

♣

Nota 18.9

Ricordiamo che K é un operatore compatto e che $E_J \rightarrow_s 0$ se $J_n \rightarrow \{E_0\}$ e E_0 non é un autovalore di H .

Moltiplicando a destra e a sinistra (18.35) per E_J si deduce che se E non é un autovalore allora

$$\|KE_J\| = (E_J K^* K E_J)^{1/2} \rightarrow 0$$

e dunque

$$B_J(H) \geq (\Theta(E_0) - \epsilon) \tag{18.71}$$

per J sufficientemente piccolo.



Dimostrazione del teorema di Mourre

Procediamo per induzione. Notiamo che il risultato é vero se $P = \emptyset$. Supponiamo che il teorema sussista per H^P con $P > \emptyset$ (il simbolo $>$ indica la relazione d'ordine parziale nel reticolo) nel seguente senso: $\tau(H^P)$ sono gli autovalori di $H^Q \forall Q > P$.

In questo caso la soglia $\Theta^P(E)$ é definita rispetto a $\tau(H^P)$ e la (18.70) diventa

$$B_J(H^P) \geq (\Theta(E) - \epsilon)E_J(H^P) + K \quad \text{su } L^2(H^P) \tag{18.72}$$

dove abbiamo posto

$$B_J(H^P) \equiv iE_J(H^P)[H^P, A^P] \quad i[H^P, A^P] = -\Delta^P - (x^P \cdot \nabla V^P(x^P)) \quad V^P = \sum_{i,j \in \alpha(P)} V_{i,j}$$

(abbiamo indicato con il simbolo A^P il generatore del gruppo delle dilatazioni nelle variabili x^P).

Se il teorema é vero per H^P dalla Nota 18.9 segue che se E non é un autovalore di H^P si ha

$$B_J(H^P) \geq (\Theta^P(E) - \epsilon)E_J(H^P)$$

e quindi, essendo $\Theta^P(E) \geq \Theta(E)$ si ha

$$B_J(H^P) \geq (\Theta(E) - \epsilon)E_J(H^P) \tag{18.73}$$

Sia ora E un autovalore di H^P con proiettore Π_E^P . Dobbiamo dimostrare che vale (18.68) con $\Theta(E) = 0$.

Poiché la dimensione di Π_E^P puó essere infinito, scegliamo una successione crescente di proiettori P_n che convergono fortemente a Π_E^P .

Dal teorema del viriale, essendo E un autovalore, vale

$$B_J = (I - \Pi_n)B_J(I - \Pi_n) + (\Pi_n B_J(I - \Pi_n^P) + (I - \Pi_n^P)B_J \Pi_n + \Pi_n B_J \Pi_n) \tag{18.74}$$

Da (18.73) e (18.74) si deduce

$$B_J \geq -\epsilon E_J + (1 - \Pi_n)K(I - \Pi_n) - 2\|\Pi_n B_J E_J(I - \Pi_n^P)\|I$$

$$\begin{aligned} \geq -\epsilon E_J - \|K(\Pi_E^P - \Pi_n)\|I - \|KE_J(I - \Pi_E^P)\|I - 2\|\Pi_n E_J(I - \Pi_E^P)\|I(I - \Pi_n)B_J(I - \Pi_n) \\ + (\Pi_n B_J(I - \Pi_n^P) + (I - \Pi_n^P)B_J\Pi_n \end{aligned}$$

Poiché K e $\Pi_n B_J$ sono operatori compatti (Π_n proietta su uno spazio di dimensione finita) e poiché $E_J(I - \Pi_E^P)$ converge fortemente a zero quando $J \rightarrow \{E\}$ si può scegliere prima n abbastanza grande e poi J abbastanza piccolo in modo da ottenere (18.68) anche quando $\Theta(E) = 0$.

Vogliamo ora migliorare questa stima e dimostrare che per ogni aperto $S \subset R$, $E \in S$ e dato $\epsilon > 0$ si può scegliere $\delta > 0$ in modo tale che per ogni $E \in S$ e $|J| < \delta$ valga

$$B_J(H^P) \geq (\Theta(E + \epsilon) - 2\epsilon)E_J(H^P) \tag{18.75}$$

Infatti se così non fosse, la disuguaglianza sarebbe violata per una successione

$$E_n \rightarrow E, \quad E_n \in S, \quad E_n \in J_n, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} |J_n| = 0$$

Sia n così grande che $|E_n - E| \leq \epsilon/2$. Dalla definizione segue che $\Theta(E + x) \leq \Theta(E) + x$ per ogni $x \geq 0$ e quindi

$$\Theta(E) \geq \Theta(E_n + \epsilon) - \epsilon + E - EN \geq \Theta(E_n - \epsilon) - \frac{3\epsilon}{2}$$

Da questo tenendo conto di

$$|J_n| < |J| \quad B_J(H^P) \geq (\Theta(E) - \epsilon/2)E_J(H^P)$$

deduciamo

$$B_J(H^P) \geq (\Theta(E_n + \epsilon) - 2\epsilon)E_{J_n}(H^P)$$

e questo dimostra (18.75).

Dobbiamo ora supplementare (18.75) con una stima di $B_J(H^\alpha)$ in modo da poter stimare $B_J(H)$.

Per questo mostriamo che per ogni $E \in R$ e per ogni $\epsilon > 0$ esiste un intervallo J che contiene E tale che

$$B_J(H_P) \geq (\Theta(E + \epsilon) - 2\epsilon)E_J(H_P) \tag{18.76}$$

Per dimostrare (18.76) conviene utilizzare la trasformata di Fourier rispetto alle sole coordinate x_α . In questa rappresentazione i vettori in $L^2(X)$ sono rappresentati da funzioni su $L^2(\tilde{X}_\alpha)$ a valori in $L^2(X^\alpha)$ e si ha

$$(H_P\psi)(k) = (k^2 + H^P)\psi(k), \quad (E_J(H_P)\psi)(k) = E_{J-k^2}(H^P)\psi(k)$$

$$i([H_P, A]\psi)(k) = (k^2 + i[H^P, A^P])\psi(k)$$

Posto $\phi = E_J(H_P)\psi$ si ha allora

$$(\phi, B_J(H^P)\phi) = \int_{\tilde{X}_P} [(\phi(k), (k^2 + B_{J-k^2}(H^P))\phi(k))]dk$$

dove abbiamo indicato con il simbolo $(,)$ il prodotto scalare in $L^2(\tilde{X}_P)$ e con $[,]$ quello in $L^2(X^P)$.

Poiché H^P é limitata dal basso, l'integrando si annulla al di fuori di un compatto.

Da (18.75) si deduce

$$(k^2 + \Theta(E - k^2 + \epsilon) - 2\epsilon)\|\phi(k)\|^2 \geq (\Theta(E + \epsilon) - 2\epsilon)\|\phi(k)\|^2 \quad 18.77$$

e pertanto abbiamo dimostrato (18.76).

Per proseguire nella dimostrazione del teorema di Mourre utilizziamo ora (18.70) e (18.71) e la formula di localizzazione che abbiamo discusso precedentemente

$$H = \sum_P j_{\alpha(P)} H j_{\alpha(P)} + \frac{1}{2} [j_{\alpha(P)} [j_{\alpha(P)}, H]] = \sum_P j_{\alpha(P)} H j_{\alpha(P)} - \frac{1}{2} \sum_P |\nabla j_{\alpha(P)}|^2$$

dove $\{j_{\alpha(P)},\}$ é una partizione dell'unitá ottenuta mediante funzione di classe C^∞ su X .

Sia $f \in C^\infty$, reale, $f \equiv 1$ in J , $E \in J$. Allora

$$if(H)[H, A]f(H) = i \sum_\alpha f(H) j_\alpha [H_\alpha, A] j_\alpha f(H) + K \quad 18.78$$

dove $K \in \mathcal{K}$ é un operatore compatto. Dimostreremo in seguito che

$$L \equiv f(H) j_{\alpha(P)} - j_{\alpha(P)} f(H) \in \mathcal{K} \quad 18.79$$

Data (18.74), la (18.71) si scrive

$$if(H)[H, A]f(H) \geq (\Theta(E + \epsilon) - 2\epsilon)f^2(H) + K$$

e, moltiplicando entrambi i termini per E_{J_1}

$$B_{J_1}(H) \geq (\Theta(E + \epsilon) - 2\epsilon)E_{J_1} + K$$

e questa disuguaglianza é equivalente a (18.70) se E non é un autovalore (se E non é un autovalore si ha $\Theta(E + \epsilon) = \Theta(E)$ per ϵ abbastanza piccolo.

Per concludere la dimostrazione del teorema di Mourre basta dunque dimostrare (18.79).

Sia \hat{f} la trasformata di Fourier di f , e poniamo $R_P \equiv (i + H_P)^{-1}$. Allora

$$LR_P = \int dt \hat{f}(t) e^{-itH} (j_{\alpha(P)} - e^{itH} j_{\alpha(P)} e^{-itH}) R_{\alpha(P)} = i \int dt \hat{f}(t) \int_0^s e^{-i(t-s)H} K e^{-isH_P}$$

$$K \equiv (Hj_{\alpha(P)} - j_{\alpha(P)}H_{\alpha(P)}R_{\alpha(P)}) = ([p^2, j_{\alpha(P)}] - j_{\alpha(P)}I_{\alpha(P)})R_{\alpha(P)}$$

e abbiamo dimostrato precedentemente che questo operatore é compatto. Poiché $\|LR_P\| < C\|K\|$ é sufficiente dimostrare il teorema per K di rango uno, dunque $K\psi = (u, \psi)v$. Ma allora l'integrando prende la forma

$$\psi \rightarrow \hat{f}(t)(e^{isH_P u}\psi)e^{-i(t-s)H}v$$

che é continuo in norma in s e in t . Dunque LR_P é compatto. Poniamo $f(x) = (i + x)g(x)$. Allora l'operatore

$$g(H)j_{\alpha(P)} - j_{\alpha(P)}g(H_P) = LR_{\alpha} + g(H)([p^2, j_{\alpha(P)}]R_P + j_{\alpha(P)}I_P R_P)$$

é compatto. Essendo g arbitrario abbiamo dimostrato (18.79). Questo conclude la dimostrazione del teorema di Mourre.

♡

Per un'analisi accurata del procedimento di Mourre e per stime ulteriori utilizzate in teoria dello scattering si può consultare utilmente il libro di Amrein [Am09].

Il teorema di Mourre é utile sia per dare stima a-priori di tipo esponenziale per le autofunzioni di H sia per analizzare le proprietà dello spettro continuo e dimostrare l'assenza dello spettro singolare continuo e la completezza asintotica nel problema a N corpi.

Una tipica stima del comportamento asintotico delle autofunzioni degli stati legati é il seguente teorema che non dimostreremo

Teorema 18.11 (Froese-Herbst 1) [FH82]

Sotto le ipotesi del teorema di Mourre, sia $H\phi = E\phi$ e sia

$$a \equiv \sup \{b \in \mathbb{R}, e^{bx}\phi \in L^2(X)\}$$

Allora se la quantità $E + \frac{1}{2}a^2$ é finita, essa é una soglia per H .

◇

Nota 18.10

Sia il teorema di Froese-Herbst sia quelli che formuleremo in seguito possono essere dimostrati seguendo la stessa traccia di dimostrazione del Teorema di Mourre sotto le seguenti ipotesi sul potenziale V e sul suo viriale

i)

V é un potenziale di tipo Kato su X .

ii)

Per ogni partizione P non banale esiste una decomposizione per x sufficientemente grande

$$V(x) = V^P(x^P) + I_P(x), \quad |I_P(x)| < f(|x_P|)$$

con $\lim_{s \rightarrow \infty} f(s) = 0$.

Nel caso $V = \sum_{i < j} V_{i,j}(x_i - x_j)$ le condizioni i) e ii) sono verificate se ciascun addendo é di tipo Kato e si annulla all'infinito. ♣

Dal teorema di Froese-Herbst I si deduce un importante risultato

Teorema 18.12 (Froese-Herbst 2) [FH82]

Sotto le ipotesi del teorema di Mourre, H non ha autovalori positivi. ◇

Dimostrazione

Dal teorema di Froese-Herbst 1, se $H\phi = E\phi$, $\phi \in L^2$ si ha

$$e^{a|x|}\phi(x) \in L^2(X) \quad \forall a > 0 \quad 18.80$$

se H non ha soglie positive.

Procedendo per induzione, a partire dal caso $\alpha \equiv X$, basta dimostrare che se vale (18.75) allora non esistono stati legati ad energia positiva.

Scegliamo ρ_0 in modo tale che

$$\int_{r < \rho_0} |\phi(x)|^2 dx \leq \int_{r > 2\rho} |\phi|^2(x) dx$$

e scegliamo $F(r) \in C^\infty$ con le proprietá

$$0 \leq rF(r) \leq r, \quad r < \rho_0 \quad F(r) \geq 0 \quad r \geq r_0 \rightarrow F(r) = r, \quad r \geq \rho_0$$

Poniamo

$$\phi_a(|x|) \equiv e^{aF(|x|)}$$

Da (18.80) si deduce

$$\int_{|x| < \rho_0} dx |\phi_a(x)|^2 \leq e^{-2\rho_0} |\phi|^2$$

Poniamo $|\phi|^2 = 1$. Notiamo che esiste c_1 tale che per ogni $a > 0$ valga

$$(\phi_a, H\phi_a) \geq |E + a^2/2 - c_1 a^2 e^{-2a\rho_0}| \quad 18.81$$

(Ricordiamo che $|\phi|_2 = 1$) Infatti, posto

$$H_a \equiv e^{aF} H e^{-aF} = H - \frac{a^2}{2} |\nabla F|^2 + i \frac{a}{2} (\nabla F \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \nabla F) \quad p_k = \nabla_k$$

da

$$H_a \phi_a = E \phi_a, \quad (\phi_a, H \phi_a) = E + \frac{a^2}{2} (\phi_a, |\nabla F|^2 \phi_a)$$

e $|\nabla F| = 1$ per $|x| \geq \rho_0$ si deduce

$$|(\phi_a, |\nabla F|^2 \phi_a) - 1| \leq c_1 e^{-2a\rho_0} \tag{18.82}$$

da cui segue (18.81) .

Analogamente possiamo dare una stima di $i(\phi_a, [H, A]\phi_a)$. Si ha

$$i(\phi_a, [H, A]\phi_a) = \frac{ia^2}{2} (\phi_a, [|\nabla F|^2, A]\phi_a) - 2a \operatorname{Re}(\phi_a, \gamma A \phi_a), \quad \gamma = \frac{1}{2} (\nabla F \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \nabla F) \tag{18.83}$$

Il primo termine in (18.83) é limitato da $c^2 a^2 e^{-2a\rho_0}$.

Per il secondo termine, si ha

$$2 \operatorname{Re}(\phi_a, \gamma A \phi_a) = (\phi_a, (\hat{p}_k (x_k F_{,l} + F_{,k} x_l) - \frac{d}{2} F_{,ll} - \frac{x_k}{2} F_{,llk}) \phi_a)$$

dove abbiamo usato la notazione $F_{,l} \equiv \frac{\partial F}{\partial x_l}$ e si intende eseguita la somma.

Il primo termine é positivo i rimanenti due sono limitati. Dunque per opportune costanti c_2, c_3

$$i(\phi_a, [H, A]\phi_a) = \langle \hat{p}^2 \rangle_a - \langle x, \nabla V \rangle_a \leq c_2 a^2 e^{-2a\rho} + ac_3 \tag{18.84}$$

dove $\langle \cdot, \cdot \rangle_a \equiv \langle \phi_a, \cdot \phi_a \rangle$. Sottraendo (18.81) da (18.84)

$$\frac{1}{2} \langle \hat{p}^2 \rangle_a - \langle V \rangle_a - \langle x, \nabla V \rangle_a \leq -E - \frac{a^2}{2} + (c_1 + c_2) a^2 e^{-2\rho_0} + ac_3 \tag{18.85}$$

La (18.85) porta ad una contraddizione. Infatti il termine a sinistra é limitato dal basso per ogni valore del parametro a (perché V e $x \cdot \nabla V$ sono piccoli rispetto a \hat{p}^2), mentre il termine a sinistra tende a $-\infty$ quando a tende all'infinito.

Poiché la sola ipotesi che avevamo fatto é che

$$H\phi = E\phi, \quad \phi \in L^2(X), \quad E > 0$$

ne concludiamo che non esistono autovalori positivi.

♡

Una seconda conseguenza importante del teorema di Mourre é una stima accurata della rapidità con cui il supporto essenziale degli stati nel continuo di H esce da qualunque compatto in X (stime dispersive).

Come corollario di queste stime sul decadimento (locale) nel tempo degli stati del continuo dedurremo che *non vi é spettro singolare continuo* .

Dalla compattezza locale (espressa dal teorema di Mourre) segue che se ϕ é uno stato del continuo, allora si ha

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\xi_R e^{-iHt} \phi| = 0 \tag{18.86}$$

(notare che il teorema di Ruelle provvede solo convergenza in media).
 Sotto ulteriori ipotesi sul potenziale sarà anche possibile precisare la velocità di convergenza a zero.

La (18.86) può essere anche dimostrata anche se si fa l'ipotesi che il *secondo viriale* (cioè $[[V, A]A]$) soddisfi le ipotesi fatte per V e per il primo viriale.

Per potenziale della forma $V = \sum_{i < j} V_{i,j}(x_i - x_j)$ la condizione è che per ciascuna coppia $i \neq j$ la funzione $(x_i - x_j)^2 \nabla^2 V_{i,j}(x_i - x_j)$ sia un potenziale di tipo Kato.

Per dimostrare che lo spettro singolare continuo di H è vuoto nel problema degli N corpi sotto le ipotesi fatte sul potenziale, è utile il seguente teorema

Teorema 18.12 [PSS81]

Supponiamo che $V(x)$ e $x \cdot \nabla V$ soddisfino le ipotesi i) e ii) del teorema di Mourre e che il secondo viriale sia limitato.

Indichiamo con S l'insieme delle soglie e degli autovalori di H . Allora per ogni $a > 1/2$ e per ogni compatto in $R - S$ se $E_J \phi = \phi$ si ha per una opportuna costante $c_\phi(J, a)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt |(1+x^2)^{-a/2} e^{-itH} \phi|^2 < c_\phi(J, a) |\phi|^2 \quad 18.87$$

◇

Non dimostreremo questo Teorema; una sua dimostrazione si può trovare in [Am09] ; in questo testo si può trovare una trattazione relativamente semplice ma molto chiara del metodo di Mourre e del metodo del doppio commutatore, con applicazioni alla teoria dello scattering e all'analisi spettrale.

Un corollario del Teorema 18.12 ha particolare interesse.

Corollario

Se sono soddisfatte le ipotesi del Teorema 18.12 l'operatore H non ha spettro singolare continuo .

◇

Dimostrazione

Sia $f \in C_0^\infty$ e sia $\phi = E_J \phi$. Allora da (18.57) si deduce

$$|(1+x^2)^{-\frac{a}{2}} f(H) \phi| \leq \frac{1}{2\pi} \int dt \hat{f}(t) |(1+|x|^2)^{-\frac{a}{2}} e^{itH} \phi| \leq |f|_2 |\phi|$$

Prendendo limiti puntuali questa disuguaglianza si estende ad ogni funzione caratteristica di un insieme di Borel limitato. Dunque $\phi \in \mathcal{H}_{a.c.}$.

Gli stati che soddisfano $\phi = E_J \phi$ per qualche J compatto nel complemento di S sottendono il codominio di E_{R-S} perché $R - S$ è aperto.

Dunque il codominio di E_{R-S} è contenuto in $\mathcal{H}_{a.c.}$.

D'altra parte il codominio di E_S sono gli stati legati poiché S é numerabile e contiene tutti gli autovalori.

♡

Utilizzeremo il teorema 18.6 per dedurre delle disuguaglianze che saranno utilizzate nella dimostrazione della completezza asintotica.

Lemma 18.13

Poniamo $\mathcal{R} \equiv (i + H)^{-1}$. Se $A\mathcal{R}^m(1 + x^2)^{\frac{a}{2}}$ é limitato per qualche $a > 1/2, m \geq 1$ allora per ogni compatto J in $R - S$ si ha

$$\int_0^\infty |Ae^{-itH} E_J(H)\psi|^2 < c|\phi|^2$$

◇

Dimostrazione

Si ha

$$|Ae^{-itH} E_J(H)\phi| \leq |A\mathcal{R}^m(1 + x^2)^{\frac{a}{2}}| \cdot |(1 + x^2)^{\frac{a}{2}} e^{-itH} E_J(i + H)^m E_J\phi|^2$$

Se $a > \frac{1}{2}$ il secondo fattore é minore di $c_1|\phi|$.

◇

Nel seguito sará conveniente utilizzare la notazione

$$A = O_m(|x|^{-a}) \leftrightarrow A\mathcal{R}^m(1 + |x|^2)^{\frac{a}{2}} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \tag{18.89}$$

Ponendo $\langle x \rangle^a \equiv (1 + |x|^2)^{\frac{a}{2}}$ e utilizzando il fatto che

$$[\langle x \rangle^a, \mathcal{R}] = \mathcal{R}[\langle x \rangle^a, H]\mathcal{R}$$

si conclude

$$A\hat{p}_k \mathcal{R} \langle x \rangle^a = A \langle x \rangle^a \hat{p}_k \mathcal{R} + A[p_k, \langle x \rangle^a]\mathcal{R} + \hat{p}_k \mathcal{R}[\langle x \rangle^a, H]\mathcal{R}$$

Se $a \leq 1$ tutti i termini a destra solo limitati. Questi termini sono anche limitati se $a \leq b$ e $A = O_0(|x|^{-b})$.

Questo dimostra

$$A = O_0(|x|^{-b}) \leftrightarrow A\hat{p}_k = O_1(|x|^{-a}) \quad a \equiv \max(1, b) \tag{18.90}$$

Un'altra conseguenza importante é data dal seguente Lemma

Lemma 18.14

Supponiamo che l'operatore A possa essere fattorizzato come prodotto $A = B.C$ dove B e C sono $O_m(|x|^{-a})$ per qualche $a > \frac{1}{2}$. Allora il seguente limite esiste in norma

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T dt E_J(H) e^{itH} A e^{-itH} E_J(H) \phi \tag{18.91}$$

◇

Dimostrazione

Denotiamo con $\phi(t)$ l'integrando in (18.86). Allora

$$\begin{aligned} & \left| \int_T^\tau dt |\phi(t)|^2 \right| = \sup_{|\psi|=1} \left| \int_T^\tau dt (\psi, \phi(t))^2 \right| \leq \\ & \leq \sup_{|\psi|=1} \left| \int_T^\tau dt |BE_J(H)e^{-itH}\psi|^2 \int_T^\tau dt |Ce^{-itH}E_J(H)\psi|^2 \right| \end{aligned}$$

Per ipotesi J é separato dagli autovalori di H e anche dalle soglie. Dunque il primo fattore é limitato mentre il secondo fattore converge a zero per t , $\tau \rightarrow \infty$.

♡

Vogliamo ora utilizzare queste stime, dedotte dal teorema di Mourre, per dimostrare che vale la completezza asintotica nel problema a N corpi se i potenziali $V_{i,j}(x_i - x_j)$ sono a *corta portata* e soddisfano un ulteriore proprietá di regolaritá che preciseremo.

Premettiamo una definizione

Definizione 18.5

Un potenziale $V(x)$ é detto essere a *corta portata* (*short range*) se per ogni partizione α si ha per $|x_\alpha|$ sufficientemente grande

$$V(x) = V^\alpha(x_\alpha) + J(x^\alpha), \quad |J(x^\alpha)| \leq |x^\alpha|^{-\mu}, \quad \mu > 1 \quad 18.92$$

Abbiamo posto $|x_\alpha| \equiv \min_{i \perp k} (m_i m_k)^{1/2} (m_i + m_k)^{-1/2} |x_i - x_k|$ dove con il simbolo $x_i \perp x_k$ abbiamo indicato che x_i e x_k appartengono a cluster diversi.

♣

Se le condizioni imposte dal teorema di Mourre sono soddisfatte e i singoli potenziali sono a corto range, si puó dimostrare la completezza asintotica. La dimostrazione del seguente teorema si puó trovare in [SS87], [SS0]

Teorema 18.15 (Sigal-Soffer)

Supponiamo che $V(x)$ soddisfi le condizioni del teorema di Mourre, che sia di corto range e che inoltre

$$|\nabla I_P(x)| \leq c |x_P|^{-\mu}, \quad \mu > 1 \quad 18.93$$

Allora $\mathcal{H}^+ = \mathcal{H}_c = \mathcal{H}_{a.c.}$ cioé ogni orbita in \mathcal{H}_c ha il comportamento asintotico

$$\phi_t \equiv e^{-itH}\phi \simeq \sum_{P \neq \{\emptyset\}} e^{-itH_P} (I \otimes \Pi_B(H^P)) \phi_P \quad 18.94$$

dove $\Pi_B(H_P)$ é il proiettore sugli stat legati del canale P e utilizziamo la notazione

$$u(t) \simeq v(t) \leftrightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} |u(t) - v(t)| = 0 \quad 18.95$$



Nota 18.8

Nel caso $V(x) = \sum_{i < j} V_{i,j}(x_i - x_j)$ le condizioni di validità del teorema di Sigal-Soffer sono che ciascun $V_{i,j}$ sia piccolo nel senso di Kato rispetto al laplaciano e che per ogni elemento della somma si abbia

$$|V_{i,j}(y)|, |\nabla V_{i,j}(y)| \leq c|y|^{-\mu}, \quad \mu > 1$$



Daremo solo un breve cenno alla dimostrazione del Teorema 18.15 . Essa si svolge per iterazione, partendo dalla partizione che non ha stati legati.

Un ruolo importante é svolto dai generatori di *dilatazioni parziali* , mediante i quali vengono dilatate solo alcune delle variabili.

Specificatamente, se si vuole analizzare il comportamento asintotico nel tempo di una specifica divisione P in clusters, si utilizza il generatore della dilazioni delle variabili baricentrali dei cluster.

Questo fa sí che grosso modo, nelle variabili trasformate, l'evoluzione secondo la hamiltoniana totale H e secondo la hamiltoniana H^P tendono a coincidere (la differenza di coordinate che appartengono a cluster diversi tende all'infinito).

Questo rende efficace il metodo di Mourre, che si basa sul commutatore della hamiltoniana con il generatore del gruppo delle dilatazioni.

La dimostrazione del teorema di Segal-Soffer si basa quindi sulla costruzione di una collezione di osservabili che commutano localmente con la hamiltoniana e la cui evoluzione controlla la propagazione asintotica nei possibili canali di scattering.

In particolare un ruolo importante é giocato dal comportamento asintotico nel tempo dell'operatore $\gamma_P \equiv i[H, g_P]$ dove g_P sono funzioni che caratterizzano una partizione regolare *asintoticamente lineare* (cosí che su scala grande sia simile a una partizione secondo iperpiani).

Si ha $\gamma = \gamma_0 + \sum_P \gamma_P$ dove per ogni P abbiamo indicato con γ_P un operatore di dilatazione approssimato che viene utilizzato per descrivere il comportamento asintotico delle soluzioni nel settore P .

Corrispondentemente viene introdotto l'operatore *asintotico*

$$\gamma_P^+ = s - \lim_{t \rightarrow \infty} e^{itH} \gamma_P e^{-itH} E_\Delta(H_P)$$

e si dimostra facilmente che γ applica \mathcal{H}_Δ in se, e inoltre su \mathcal{H}_Δ vale $\gamma^+ = \sum_P \gamma_P^+$.

Ogni vettore $\psi \in \mathcal{H}_\Delta$ può essere espresso nella forma

$$\psi = \sum_P \gamma_P^+ \phi, \quad \phi \in \mathcal{H}_\Delta \tag{18.96}$$

e quindi

$$\psi_t = e^{-itH}\psi \simeq \sum_P \gamma_P e^{-itH}\phi = \sum_\alpha e^{-itH_P} e^{itH_P} \gamma_P e^{-itH}\phi \simeq e^{-itH_P} \psi_P \quad 18.97$$

dove $\psi_P = W_P^+ \phi$ e W_P^+ é l'operatore d'onda nel canale P dato da

$$W_P^+ \equiv s - \lim_{t \rightarrow \infty} e^{itH_P} \gamma_P e^{-itH} E_\Delta(H)$$

A partire dall'equazione (18.97) si sviluppa il procedimento di iterazione che porta a dimostrare il teorema di Segal-Soffer e quindi la completezza asintotica. ♡

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [Am09] W.Amrein *Hilbert space methods in Quantum Mechanics* EPFL press 2009
- [ABG96] W.Amrein, A.Boutet de Monvel, V.Georgescu, *Commutator Methods and Spectral Theory* Progress of Mathematics Birkhauser 1996
- [FH82] R.G Froese, I.Herbst I *Duke Math. Journal* 49 (1982) 1075-1085
- [FH82'] R.G. Froese, I. Herbst II *Comm. Math. Phys.* 87 (1982) 429-447
- [HS95] W.Hunziker, I.Sigal *The General Theory of N-body Quantum Systems* CRM Lecture Notes vol 8, 1995
- [HS00] W.Hunziker, I.Sigal *The Quantum N-Body Problem* Journ. of Mathematical Physics 41 (2000) 3448-3509.
- [M81] E.Mourre *Comm.Math.Phys.* 78 (1981) 519-567
- [M83] E.Mourre *Comm.Math.Phys.* 91 (1983) 279-300
- [PSS81] P. Perry, I.M. Segal, B.Simon *Annals of Mathematics* 114 (1981) 519-547
- [RSIV] M.Reed, B.Simon *Methods of Modern Mathematical Physics* vol IV, ch. XIII.
- [SS87] I.M.Sigal, A. Soffer *Ann. of Math.* 1126 (1987) 35-108
- [SS90] I.M Sigal, A. Soffer *Comm. Math. Phys.* 132 (1990) 73-101
- [S9] J.Shabani *J. of Operator Theory* 28 (1997) 297-322

CAPITOLO 19
APPLICAZIONI POSITIVE, SEMIGRUPPI MARKOVIANI,
IPERCONTRATTIVITÀ. FORME DI DIRICHLET
CONTRATTIVE, DISEGUAGLIANZE DI SOBOLEV
LOGARITMICHE.

Nella parte dedicata ai primi elementi della teoria degli operatori di Schrödinger, in particolare alle condizioni affinché l'operatore $-\Delta+V$ sia autoaggiunto, abbiamo notato che le condizioni imposte sulla parte positiva di V sono relativamente deboli in confronto con le limitazioni sulla parte negativa.

Considerate come operatori di moltiplicazione su $\mathcal{H} \equiv L^2(R^d, \mu)$, dove μ è una misura regolare su R^d , le funzioni positive preservano la positività, cioè lasciano invariante il cono \mathcal{K}_+ delle funzioni positive.

Notiamo anche che in questo caso la risolvente del Laplaciano è un operatore il cui nucleo integrale è di tipo positivo.

Ne segue che se la funzione V soddisfa opportune condizioni abbastanza deboli è possibile associare all'operatore $\Delta-V$ un semigruppato di contrazione che preserva la positività (lascia invariante \mathcal{K}_+) e quindi un processo stocastico.

Queste semplici affermazioni lasciano intravedere una generalizzazione non banale.

Né gli operatori di moltiplicazione né \mathcal{K}_+ sono insiemi invarianti per una generica trasformazione unitaria di $L^2(X, \mu)$.

Ad esempio, per trasformazione di Fourier gli elementi di \mathcal{K}_+ diventano operatori definiti da un nucleo di convoluzione di tipo positivo.

Ma le loro proprietà di essere piccoli rispetto ad un operatore dato, ad esempio il Laplaciano, oppure di lasciare invariante un opportuno cono nello spazio di Hilbert, non possono dipendere dalla rappresentazione scelta.

Siamo portati quindi a considerare il caso in cui nello spazio di Hilbert \mathcal{H} esista un cono convesso \mathcal{K} che è lasciato invariante da una classe di operazioni.

Definizione 19.1

Sia Y uno spazio lineare topologico in cui è definito un cono strettamente convesso \mathcal{K} e generante (le combinazioni convesse degli elementi in $-\mathcal{K} \cup \mathcal{K}$ generano Y).

Sia \mathcal{K}_0 l'interno di \mathcal{K} .

Chiameremo *positivi* gli elementi di \mathcal{K} , strettamente positivi gli elementi di \mathcal{K}_0 . Diciamo che un'operazione T su Y

preserva la positività se $T(x) \in \mathcal{K}$ per ogni $x \in \mathcal{K}$,

migliora la positività se $T(x) \in \mathcal{K}_0$ per ogni $x \in \mathcal{K}$.

◇

La teoria che descriveremo si applica in particolare quando $Y \equiv L^2(X, \mu)$ dove X è uno spazio di misura e μ è la corrispondente misura.

Studieremo in dettaglio solo il caso in cui $X = R^d$, $d < +\infty$, e μ è la misura di Lebesgue.

In questo caso \mathcal{K} sarà il cono delle funzioni a valori positivi e \mathcal{K}_0 sarà il cono delle funzioni strettamente positive in ogni compatto.

Notiamo tuttavia che la teoria può essere estesa al caso in cui Y è una C^* -algebra \mathcal{A} , \mathcal{K} è il cono dei suoi elementi positivi e il ruolo della misura è preso da uno stato su \mathcal{A} .

In quest'ultimo caso alcuni risultati possono posti nel contesto dell'integrazione non-commutativa cui si è fatto cenno nel Capitolo 15.

Studieremo solo il caso in cui l'operazione considerata è lineare. In questo caso la definizione 19.1 prende la forma seguente:

Definizione 19.1'

Un operatore (lineare) T su $L^2(X, \mu)$ *preserva la positività* se $f \geq 0$ implica $(Tf)(x) \geq 0$ e *migliora la positività* se $f(x) \geq 0$ implica $(Tf)(x) > 0$ su qualunque compatto.

◇

Definizione 19.2

Un operatore T su $L^2(X, \mu)$ è *ergodico* se preserva la positività e per ogni g positiva e f strettamente positiva si ha $(f, T^n g) > 0$ per qualche intero n .

◇

Nota 19.1

Se un operatore migliora la positività esso è certamente ergodico perché la disuguaglianza richiesta è soddisfatta per ogni intero n .

♣

Nota 19.2

Se $x \mapsto \phi(t, x)$ è un sistema dinamico in X , l'evoluzione $f \mapsto Tf(x) \equiv f(\phi(t, x))$ preserva la positività ma non la migliora. Il semigruppò è *ergodico* se e solo se il sistema dinamico è ergodico nel senso tradizionale (i soli insiemi misurabili invarianti sono l'insieme vuoto e tutto X).

♣

L'evoluzione descritta dal semigruppò $e^{t\Delta}$ su $L^2(R^d)$ *migliora la positività*.

Infatti per ogni $t > 0$ si ha

$$(e^{t\Delta} f)(x) = \frac{1}{(4\pi t)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\|x-y\|^2/4t} f(y) dy$$

e il nucleo integrale che rappresenta $e^{t\Delta}$ è strettamente positivo.

Analogamente l'operatore $(-\Delta + 1)^{-1}$ migliora la positività.

Se H è un operatore autoaggiunto positivo, l'operatore e^{-tH} preserva (rispettivamente migliora) la positività se e solo se l'operatore $(H + \lambda)^{-1}$, $\lambda > 0$ ha questa proprietà .

Questo segue immediatamente dalle identità

$$(H + \lambda)^{-1} = \int_0^\infty e^{-t(H+\lambda)} dt \quad e^{-t(H+\lambda)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{t}{n} (H + \lambda) \right)^{-n} .$$

Lemma 19.2

Se μ è assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue e l'operatore T preserva la positività, allora $|Tf| \leq T|f|$ per ogni $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$ (la disuguaglianza è intesa valere quasi ovunque).

◇

Dimostrazione

Per densità, è sufficiente dare la dimostrazione per $f(x)$ continua.

Se f è a valori reali, si ha $|f|(x) \pm f(x) \geq 0$. Poiché T è lineare e preserva la positività si ha $T|f|(x) \pm Tf(x) \geq 0$ e quindi $T|f|(x) \geq |Tf|(x)$.

Se f è a valori complessi, si ha per ogni x

$$|f(x)| = \sup_{\theta \in Q} \Re(e^{i\theta} f(x)) .$$

Poiché Q è numerabile e f è continua, si ha

$$\sup_{\theta \in Q} \Re(e^{i\theta} Tf(x)) = T \sup_{\theta \in Q} \Re(e^{i\theta} f(x)) \leq T|f|(x) .$$

♡

Definizione 19.3

Assumiamo che la misura μ sia finita.

Un operatore T limitato, che preserva la positività e soddisfa

$$T\iota = \iota, \quad T^*\iota = \iota, \quad \iota(x) \equiv 1 \quad \text{q.o.}$$

viene detto *doppiamente Markoviano* .

Questa notazione è dovuta al fatto che si richiede che ι sia autofunzione all'autovalore 1 sia di T che di T^* .

◇

Lemma 19.3

Se l'operatore T è doppiamente Markoviano, allora

$$\|Tf\|_p \leq \|f\|_p, \quad 1 \leq p \leq +\infty$$

(cioè T contrae in tutti gli spazi $L^p(X, \mu)$).

◇

Dimostrazione

Per interpolazione, è sufficiente dare la dimostrazione per $p = 1$ e $p = +\infty$.
 Se $f \geq 0$ si ha

$$\|Tf\|_1 = (\iota, Tf) = (T^* \iota, f) = (\iota, f) = \|f\|_1.$$

Se f non è a valori positivi, dal lemma precedente

$$\|Tf\|_1 \leq \|T|f|\|_1 = \||f|\|_1 = \|f\|_1.$$

Se $f, g \in L^2(X, \mu)$, $f \geq 0$, $g \geq 0$ allora $(f, Tg) \geq 0$.

Dunque anche T^* preserva la positività, e quindi $\|T^*f\|_1 \leq \|f\|_1$. Per definizione

$$\|g\|_\infty = \sup_{f, \|f\|_1=1} |(g, f)|$$

e dunque

$$\|Tg\|_\infty = \sup_{f, \|f\|_1=1} |(Tg, f)| = \sup_{f, \|f\|_1=1} |(g, T^*f)| \leq \sup_{f, \|T^*f\|_1=1} |(g, f)| = \|g\|_\infty.$$

♡

Nota 19.3

Il nucleo integrale $T(x, x')$ di un operatore doppiamente Markoviano può essere utilizzato per definire la *probabilità di transizione* di un processo stocastico a valori in R^n , in analogia a quanto abbiamo notato nel caso del moto Browniano e del processo di Ornstein-Uhlenbeck.

Vedremo in seguito (Teorema di Beurling-Deny) che se la forma quadratica associata all'operatore H ha opportune proprietà di contrazione, allora $e^{-tH}(x, x')$ definisce un semigruppoo doppiamente Markoviano.

♣

Studiamo ora alcune proprietà degli operatori che preservano la positività.

Successivamente studieremo condizioni sul potenziale V sotto le quali se l'operatore e^{-tH_0} preserva (o migliora) la positività anche $e^{-t(H_0+V)}$ gode di questa proprietà.

Teorema 19.4

Sia T chiuso, limitato e positivo su $L^2(X, \mu)$. Supponiamo che T preservi la positività e $\|T\|$ sia un suo autovalore (necessariamente il più grande autovalore). Allora le seguenti affermazioni sono tra loro equivalenti

- a) $\|T\|$ è un autovalore semplice e la corrispondente autofunzione ψ_0 può essere scelta positiva.
- b) T è ergodico.
- c) $L^\infty(X, \mu) \cup \{T\}$ è irriducibile (ogni operatore limitato che commuta con T e con la moltiplicazione per ogni funzione essenzialmente limitata è un multiplo dell'identità).

◇

Nota 19.4

Questa è un'estensione del classico teorema di Frobenius che fa la stessa affermazione per matrici; $L^\infty(X, \mu)$ gioca il ruolo delle matrici che sono diagonali in qualche base.

♣

Dimostrazione del teorema 19.4

a) implica b)

Sia $B \equiv \frac{T}{\|T\|}$, e siano λ_n gli autovalori di B elencati in ordine decrescente. Per ipotesi

$$\lambda_0 = 1, \quad \lambda_n < 1, \quad \forall n \geq 1.$$

Ne segue che $s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} B^n = P_0$, dove abbiamo indicato con P_0 il proiettore ortogonale su ϕ_0 .

Dunque per ogni $\phi \in L^2(X, \mu)$ si ha

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (\phi, B^n \phi) = |(\phi, \phi_0)|^2 > 0$$

(l'ultima diseuguaglianza segue dal fatto che ϕ_0 è una funzione strettamente positiva sui compatti).

Ne segue che esiste un indice n_ϕ tale che $(\phi, B^{n_\phi} \phi) > 0$.

b) implica c)

Supponiamo che il sottospazio chiuso \mathcal{S} sia lasciato invariante da $L^\infty(X, \mu)$ e da T .

Se $f \in \mathcal{S}$ nei punti dove $f(x) \neq 0$ poniamo $g(x) \equiv \frac{\bar{f}(x)}{|f(x)|}$. Allora $g \in L^\infty(X, \mu)$ e $gf = |f| \in \mathcal{S}$.

In modo analogo si dimostra che se $g \in \mathcal{S}^\perp$ allora anche $|g| \in \mathcal{S}^\perp$.

Ma allora si avrebbe $(|g|, T^n |f|) = 0 \forall n$ e quindi $f \equiv 0$.

c) implica a)

Indichiamo con ϕ_0 un autovettore di T all'autovalore $\|T\|$.
 Notiamo innanzitutto che anche $|\phi_0|$ è un autovettore allo stesso autovalore.
 Questo segue dal lemma 19.2 e dal fatto che per ogni ψ sia ha $|(\psi, T\phi_0)| \leq \|T\|$.
 Dobbiamo ora dimostrare che per qualunque compatto \mathcal{K} si ha $\inf_{x \in \mathcal{K}} |\phi_0(x)| > 0$.
 Sia

$$\Gamma \equiv \{f \in L^2(X, \mu), f\phi_0 = 0 \text{ q.o.}\}.$$

Per costruzione Γ è un sottospazio chiuso invariante per moltiplicazione per funzione in $L^\infty(X, \mu)$. Sia

$$\Gamma_+ \equiv \{f \in \Gamma, f(x) \geq 0\}.$$

Allora anche $Tf \in \Gamma_+$. Infatti se $f \in \Gamma_+$ si ha

$$(Tf, |\phi_0|) = (f, T|\phi_0|) = \|T\|(f, |\phi_0|) = 0.$$

Ma $\Gamma = \Gamma_+ - \Gamma_- + i\Gamma_+ - i\Gamma_+$ e quindi $T\Gamma \subset \Gamma$. Dall'ipotesi c) segue allora l'alternativa $\Gamma = \{0\}$ oppure $\Gamma = L^2(X, \mu)$.

Ma la seconda alternativa non è possibile perché $\phi_0 \notin \Gamma$.

Dunque $\Gamma = \{0\}$ e questo implica che non esistono funzioni $f \in L^2(X, \mu)$ tali che $f(x)\phi_0(x) = 0$ q.o..

L'unicità della autofunzione all'autovalore più elevato segue dal fatto che non possono esistere due funzione entrambe strettamente positive e tra loro ortogonali.

♡

Utilizziamo il Teorema 19.4 per dimostrare il seguente Teorema che dà condizioni necessarie e sufficienti affinché lo stato fondamentale di una Hamiltoniana sia semplice.

Nel seguito studieremo condizioni sufficienti affinché uno stato fondamentale esista (nel teorema che qui segue l'esistenza è postulata).

Teorema 19.5

Sia H autoaggiunto e limitato dal basso. Sia $E \equiv \inf \sigma(H)$.

Allora sono equivalenti

- a) E è un autovalore semplice con autofunzione strettamente positiva.
- b) Esiste $\lambda < E$ per il quale $(H - \lambda I)^{-1}$ è ergodico.
- c) Esiste $t > 0$ per il quale e^{-tH} è ergodico.
- d) $\forall \lambda < E$ l'operatore $(H + \lambda)^{-1}$ migliora la positività.

e) $\forall t > 0$ l'operatore e^{-tH} migliora la positività .

◇

Dimostrazione

Dal teorema precedente segue che a), b), c) sono tra loro equivalenti, che d) implica b) e che e) implica c).

Dimostriamo le due implicazioni rimanenti:

c) implica d)

Dall'ergodicità sappiamo che per ogni coppia di funzioni $u > 0$, $v \geq 0$ esiste s_0 tale che $(u, e^{-s_0 H} v) > 0$.

Per continuità $(u, e^{-s H} v)$ è strettamente maggiore di zero quando s è in un intorno di s_0 .

Ne segue dalla proprietà additiva dell'integrale

$$(u, (H + \lambda)^{-1} v) = \int_0^\infty e^{s\lambda} (u, e^{-sH} v) ds > 0.$$

Dunque

$$((H + \lambda)^{-1} v)(x) > 0 \quad \forall x.$$

c) implica e)

Siano u, v non negative e non identicamente nulle. Definiamo

$$\mathcal{N} \equiv \{t > 0 : (u, e^{-tH} v) > 0\}.$$

Poiché la funzione $(u, e^{-tH} v)$ è analitica in un intorno dell'asse reale positivo l'insieme $(0, \infty) \setminus \mathcal{N}$ non può avere zero come punto di accumulazione, dunque \mathcal{N} contiene numeri arbitrariamente piccoli.

Per dimostrare che $\mathcal{N} \equiv (0, +\infty)$ basta quindi dimostrare che $t > s$, $s \in \mathcal{N}$ implica $t \in \mathcal{N}$.

Sia $s_0 \in \mathcal{N}$. Per ipotesi $(u, e^{-s_0 H} v) > 0$ e dunque $\bar{u}(x)(e^{-s_0 H} v)(x)$ non è identicamente nulla come funzione di x .

Pertanto

$$w(x) = \min_s \{u(x), (e^{-sH} v)(x)\}$$

non è identicamente nulla (come funzione di x). Poiché e^{-tH} preserva la positività

$$(u, e^{-tH} (e^{-sH} v)) \geq (u, e^{-tH} w) = (u, e^{-tH} w) \geq (w, e^{-tH} w) = \|e^{-\frac{t}{2} H} w\|_2 > 0.$$

Dunque se $t > 0$ e $s \in \mathcal{N}$ allora $t + s \in \mathcal{N}$.

Questo conclude la dimostrazione del Teorema 19.4.

♡

Esempio

Sia $A \geq cI$, $c > 0$, un operatore su $\mathcal{H}_1 \equiv L^2(\mathbb{R}^d)$ e sia $H = d\Gamma(A)$ su $\mathcal{H} = \Gamma(\mathcal{H}_1)$ la seconda quantizzazione di A .

Identifichiamo \mathcal{H} con $L^2(X, \mu)$ per un opportuno spazio di misura (X, μ) .

In teoria dei campi quantizzati \mathcal{H}_1 è lo spazio di una particella di massa $m > 0$ (ad esempio $L^2(\mathbb{R}^3)$), A è la Hamiltoniana a una particella, X (lo spazio di Fock) è uno spazio di distribuzioni in \mathbb{R}^3 e μ è una misura Gaussiana su X .

Indichiamo con Ω il vettore *di vuoto* nello spazio di Fock della seconda quantizzazione.

Per costruzione

$$H\Omega = 0, \quad H|_{\Omega^\perp} \geq cI$$

Dunque H ha uno stato fondamentale semplice che può essere scelto positivo.

Dal teorema 19.4 si deduce che se e^{-tA} preserva la positività, allora $\Gamma(e^{-tA}) \equiv e^{-tH}$ migliora la positività in $L^2(X, \mu)$.

♡

Applichiamo il Teorema 19.5 al problema degli N corpi in Meccanica Quantistica.

Teorema 19.6

Sia H la Hamiltoniana del problema degli N corpi nel sistema di riferimento del baricentro.

Se l'estremo inferiore dello spettro è un autovalore allora questo autovalore è non-degenere e la corrispondente autofunzione può essere scelta positiva.

◇

Dimostrazione

Il Teorema 19.5 afferma che è sufficiente dimostrare le seguenti proprietà.

L'operatore e^{-tH} preserva la positività e l'insieme $\{e^{-tH}\} \cup L^\infty(\mathbb{R}^{3N-3})$ è irriducibile.

Sappiamo che entrambe le affermazioni sono vere per $H_0 \equiv -\sum_n \Delta_n$. Poniamo

$$V_{i,j}^N(x) \equiv V_{i,j}(x) \text{ se } |V_{i,j}(x)| < N, \quad 0 \text{ altrimenti.}$$

Allora $e^{-tV_{i,j}^N(x)} \in L^\infty(\mathbb{R}^{3N-3})$ ed è invertibile.

Dunque l'algebra \mathcal{A} generata da $e^{-t(H_0+V_{i,j}^N)}$ e dagli elementi di $L^\infty(\mathbb{R}^{3N-3})$ (visti come operatori di moltiplicazione) è irriducibile.

Inoltre $e^{-t(H_0+\sum_{i,j} V_{i,j}^N)}$ preserva la positività (per vedere questo, utilizzare la formula di Trotter-Kato e notare che separatamente i fattori hanno questa proprietà).

Si può verificare che $\sum_{i,j} V_{i,j}^N$ converge nel senso delle forme quadratiche a $\sum_{i,j} V_{i,j}$ quando $N \rightarrow \infty$.

Quindi $H_0 + \sum_{i,j} V_{i,j}^N$ converge nella topologia forte della risolvente (e quindi in senso forte dei semigrupp associati) a $H_0 + \sum_{i,j} V_{i,j}$.

Utilizzando il fatto che il limite forte in $L^2(R^{3N-3})$ preserva la positività e che \mathcal{A} è debolmente chiusa, si conclude la dimostrazione del teorema 19.6.

♡

Ricordiamo (Lemma 19.3) che se T è limitato e doppiamente Markoviano su $L^2(X, \mu)$ con μ misura finita, allora T è una contrazione su tutti gli spazi $L^p(X, \mu)$, $1 \leq p \leq +\infty$, cioè vale $\|Tu\|_q \leq \|u\|_p$.

Introduciamo adesso una condizione più forte, cioè che esistano due costanti p e q , con $p < q$, tali che T sia limitato da $L^p(X, \mu)$ a $L^q(X, \mu)$, cioè valga $\|\cdot\|_q \leq C \|\cdot\|_p$.

Ricordiamo che, poiché la misura μ è per ipotesi finita, si ha sempre $\|\cdot\|_q \geq \|\cdot\|_p$ con disuguaglianza stretta se la misura μ non è portata da un numero finito di punti.

Definizione 19.5

Sia (X, μ) uno spazio di misura finita. Un operatore limitato T si dice essere *ipercontrattivo* se esiste $q > 2$ tale che T sia limitato da $L^2(X, \mu)$ a $L^q(X, \mu)$, cioè

$$\forall f \in L^2(X, \mu), \quad \|Tf\|_q \leq C \|f\|_2.$$

Si dice ipercontrattivo in senso stretto se $C = 1$.

◇

Si ha il seguente teorema

Teorema 19.7 (L. Gross)

Supponiamo che $H \geq 0$ generi un gruppo che preserva la positività e che inoltre esista $t_0 > 0$ tale che $e^{-t_0 H}$ sia ipercontrattivo in senso stretto da $L^2(X, \mu)$ a $L^4(X, \mu)$. Allora $\inf \sigma(H) \equiv E$ è un autovalore.

◇

Dimostrazione

Consideriamo una partizione $\alpha \equiv \{S_1, \dots, S_N\}$ di X , cioè una collezione finita di insiemi misurabili tale che

$$\bigcup_{n=1}^N S_n = X, \quad S_i \cap S_k = \emptyset \quad i \neq k$$

Sia $\xi(S_k)$ la funzione indicatrice dell'insieme S_k e definiamo l'operatore P_α nel modo seguente:

$$(P_\alpha f)(x) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\mu(S_i)} \xi(S_i)(x) \int_{S_i} f(y) d\mu(y). \quad 19.2$$

Si ha

- 1) $P_\alpha \rightarrow I$ fortemente quando la partizione α viene raffinata indefinitamente.
- 2) P_α preserva la positività.
- 3) P_α contrae su ogni $L^p(X, \mu)$.

Infatti $\|P_\alpha f\|_\infty \leq \|f\|_\infty$ per costruzione e contrae anche in $L^1(X, \mu)$ (è simmetrico e $P_\alpha \iota = \iota$).

Poniamo $T \equiv e^{-t_0 H}$, $T_\alpha \equiv P_\alpha T P_\alpha$.

Dalle proprietà 1), 2), 3) segue (utilizziamo la notazione $\lim_{\alpha \rightarrow \infty}$ per descrivere il limite quando la partizione è raffinata indefinitamente)

a) $\text{s-lim}_{\alpha \rightarrow \infty} T_\alpha = T$;

b) $\|T\| = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \|T_\alpha\|$;

c) per ogni $\phi \in L^2(X, \mu)$ $\|T_\alpha \phi\|_4 \leq \|T_\alpha\| \|\phi\|_2$.

(la proprietà c) segue da a) e b) e dall'ipotesi fatta su $e^{-t_0 H}$).

Per ogni partizione finita l'operatore T è identificabile con una matrice $N \times N$ che conserva la positività. Per il teorema di Perron-Frobenius esiste $\phi_\alpha \in P_\alpha \mathcal{H}$ tale che

$$T_\alpha \phi_\alpha = \|T_\alpha\| \phi_\alpha. \quad 19.3$$

Normalizziamo questo vettore ponendo $\|\phi\|_2 = 1$. Da c) segue $\|\phi_\alpha\|_4 \leq K$.

La disuguaglianza di Hölder $\|\phi_\alpha\|_2 \leq \|\phi_\alpha\|_1^{\frac{1}{3}} \|\phi_\alpha\|_4^{\frac{2}{3}}$ implica allora

$$\|\phi_\alpha\|_1 = \int_X |\phi_\alpha(x)| d\mu(x) \geq 1. \quad 19.4$$

Poiché la palla unitaria in $L^2(X, \mu)$ è compatta per la topologia debole possiamo estrarre dalla successione (o filtro) ϕ_α (al variare del raffinamento α) una successione che converge debolmente.

Per definizione di convergenza debole, e considerato che $\iota \in L^2(X, \mu)$ si ha

$$\|\phi_\alpha\|_1 \equiv \int_X \phi_\alpha d\mu \rightarrow \int_X \phi(x) d\mu = \|\phi\|_1.$$

Dunque $\|\phi\|_1 \geq 1$ e quindi $\phi \neq 0$.

D'altra parte, per tutti gli elementi $\psi \in L^2(X, \mu)$ si ha, utilizzando a) e b),

$$(\psi, T\phi) = (T\psi, \phi) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} (T\psi, \phi_\alpha) = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \|T_\alpha\| (\psi, \phi_\alpha) = \|T\| (\psi, \phi). \quad 19.5$$

Poiché questa relazione vale per ogni ψ , si deduce $T\phi = \|T\|\phi$.

♡

Nota 19.4

Se lo spazio ha misura finita e l'operatore \tilde{R} ipercontrattivo

$$\|T\phi\|_q \leq M\|\phi\|_2, \quad M > 0, \quad 19.6$$

un'analisi simile a quella che abbiamo descritto porta a concludere che $\|T\|$ è un autovalore di T con molteplicità m che soddisfa la disuguaglianza

$$m \leq m_0 \equiv \left(\frac{M}{\|T\|} \right)^{\frac{2q}{q-2}} \mu(X). \quad 19.7$$

La dimostrazione si può trovare in [G72].

Essa utilizza il fatto che da stime dello stesso tipo di quelle riportate qui sopra, si deduce che per ogni soluzione di $A\phi = \|A\|\phi$ si ha

$$(\phi, \iota) \geq \left(\frac{\|T\|}{M} \right)^{\frac{q}{q-2}}.$$

Poiché la molteplicità si determina prendendo soluzioni ortogonali tra loro, il loro numero non può essere maggiore di $\left(\frac{\|T\|}{M} \right)^{\frac{q}{q-2}}$. Se in particolare l'operatore è ipercontrattivo in senso stretto si ha che l'autovalore $E \tilde{R}$ non degenera e pertanto l'autofunzione corrispondente può essere scelta positiva.

♣

Consideriamo infine il problema di determinare condizioni sufficienti sull'operatore B affinché le proprietà utilizzate qui sopra del semigruppato $T_t = e^{-tA}$ (preservare o migliorare la positività, essere doppiamente Markoviano, essere ipercontrattivo,...) implicino le stesse proprietà anche per $e^{-t(A+B)}$.

Noi saremo particolarmente interessati al caso in cui $A \equiv -\Delta$ e B è l'operatore di moltiplicazione per una funzione V .

Un primo risultato in questa direzione è il seguente

Teorema 19.8

Sia $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d, \mu)$, $H_0 \geq 0$ dove μ è una misura assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue, e supponiamo che $(H_0 + \lambda)^{-1}$ preservi la positività per ogni $\lambda > 0$.

Siano $U(x)$, $-W(x)$, funzioni reali positive.

Supponiamo che l'intersezione dei domini della forma quadratiche associate a H e a Q cioè $Q(H_0) \cap Q(U)$ sia densa in \mathcal{H} .

Supponiamo inoltre che W sia piccolo rispetto a H_0 nel senso delle forme quadratiche.

Posto

$$H \equiv H_0 + U + W \tag{19.8}$$

nel senso delle forme quadratiche, si ha che per $\lambda > \lambda_0$ l'operatore $(H - \lambda I)^{-1}$ preserva la positività, dove λ_0 è l'estremo inferiore dello spettro di $H_0 + W$.

◇

Dimostrazione

Poniamo

$$U_k(x) = \xi_{U(x) \leq k}(x) U(x), \quad W_h = \xi_{|W(x)| \leq h}(x) W(x),$$

dove ξ è la funzione indicatrice dell'insieme indicato. Consideriamo

$$H_{k,h} \equiv H_0 + U_k + W_h. \tag{19.9}$$

Poiché U_k e W_h sono limitati, pur di scegliere λ abbastanza grande la serie

$$(H_{k,h} + \lambda I)^{-1} = (H_0 + \lambda I)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} ((U_k + V_h)(H_0 + \lambda I)^{-1})^n \tag{19.10}$$

è assolutamente convergente e ciascun termine preserva la positività.

D'altra parte, se $H_0 + W > -b I$ per ogni valore del parametro h , si ha $H_0 + W_h > -b I$.

Allora $H_{k,h} + b$ è invertibile e si ha

$$(H_{h,k} + b I)^{-1} = (H_{h,k} + \lambda I)^{-1} (I + \sum_n ((\lambda - b)(H_{h,k} + b I)^{-1})^n). \tag{19.11}$$

La serie converge uniformemente e ciascun termine preserva la positività.

Dunque $(H_{h,k} + b I)^{-1}$ preserva la positività per ogni $b > \lambda_0$ dove λ_0 è l'estremo inferiore dello spettro di $H + W$.

Dobbiamo ora passare al limite $h, k \rightarrow \infty$.

Poiché il cono delle funzioni positive è chiuso nella topologia debole, basta dimostrare che $H_{h,k}$ converge a H in risolvente in senso forte.

Questo è stato dimostrato, nelle ipotesi del teorema 19.7, nel capitolo 5, in cui è stata discussa la convergenza di successioni di operatori.

♡

Nota 19.5

Il cono delle funzioni *strettamente* positive non è chiuso per convergenza debole. Dunque, anche se $H_{h,k}$ avesse una risolvente che migliora la positività, *questo potrebbe non essere vero per H* .

♣

Nella dimostrazione dell'autoaggiuntezza di $H_0 + V$ e nella formula di Feynman-Kac un ruolo importante è giocato dalla richiesta che $Q(H_0) \cap Q(V)$ sia denso in \mathcal{H} .

Il preservare la positività è di aiuto in questo.

Teorema 19.10

Sia

$$\mathcal{H} = L^2(X, \mu), \quad H_0 \geq 0, \quad H_0 \phi_0 = 0, \quad \phi_0 \in \mathcal{H}$$

e sia ϕ_0 strettamente positivo. Assumiamo inoltre che $(H_0 + \lambda I)^{-1}$ preservi la positività per ogni $\lambda > 0$.

Sia $V(x) \geq 0$, $(\phi_0, V\phi_0) < +\infty$.

Allora $D(H_0) \cap D(V)$ è denso in \mathcal{H} e quindi a fortiori è denso in \mathcal{H} l'insieme $Q(H_0) \cap Q(V)$.

◇

Dimostrazione

Definiamo $\mathcal{L}_{\phi_0}^\infty \equiv \{f : \pm f \leq t \phi_0\}$ per qualche $t > 0$.

Notiamo che da $\phi_0(x) > 0 \quad \forall x$ segue che $\mathcal{L}_{\phi_0}^\infty$ è denso in \mathcal{H} . Si vede anche che

$$(H_0 + \lambda I)^{-1} \mathcal{L}_{\phi_0}^\infty \subset \mathcal{L}_{\phi_0}^\infty. \quad 19.13$$

Infatti

$$(H_0 + \lambda I)^{-1} f \leq t(H_0 + \lambda I)^{-1} \phi_0 = \frac{t}{\lambda} \phi_0.$$

Per ipotesi $V \in L^1(X, \phi_0^2(x) dx)$ e quindi $\mathcal{L}_{\phi_0}^\infty \subset Q(V)$.

Dunque

$$(H_0 + \lambda I)^{-1} \mathcal{L}_{\phi_0}^\infty \subset D(H_0) \cap Q(V). \quad 19.14$$

Ma $\mathcal{L}_{\phi_0}^\infty$ è denso in \mathcal{H} , dunque $(H_0 + \lambda I)^{-1} \mathcal{L}_{\phi_0}^\infty$ è denso in $(H_0 + \lambda I)^{-1} \mathcal{H} \equiv D(H_0)$.

◇

Come conseguenza del teorema 19.8 e dei teoremi dimostrati per le forme quadratiche sappiamo che $H + V$ è un operatore autoaggiunto.

Vogliamo dimostrare che $D(H_0) \cap D(V)$ è un suo nocciolo (*core*).

Teorema 19.9

Sia $H_0 \geq 0$, $\phi_0 \in L^2(X, \phi_0^2 dx)$, $\phi_0(x) > 0$ e supponiamo che $(H_0 + \lambda I)^{-1}$ preservi la positività.

Sia $V \in L^2(X, \phi_0^2 dx)$. Allora $H_0 + V$ è essenzialmente autoaggiunto su $D(H_0) \cap D(V)$.

◇

Dimostrazione

Dobbiamo dimostrare che $D(H_0) \cap D(V)$ è denso in $D(H)$ nella topologia del grafico di H . Abbiamo già visto che $(H - \lambda I)^{-1}$ preserva la positività per λ abbastanza grande, e quindi lascia invariante $\mathcal{L}_{\phi_0}^\infty$.

Poniamo $\mathcal{K} \equiv (H - \lambda I)^{-1} \mathcal{L}_{\phi_0}^\infty$. Allora

$$\mathcal{K} \subset D(H) \cap \mathcal{L}_{\phi_0}^\infty = D(H) \cap D(V) \quad 19.15$$

Sia $g \in \mathcal{K}$, $Hg \in \mathcal{H}$, $Vg \in \mathcal{H}$; dunque $H_0g \in \mathcal{H}$ e quindi $g \in D(H)$.
 Ne segue $\mathcal{K} \subset D(H_0) \cap D(V)$. Ma $\mathcal{L}_{\phi_0}^\infty$ è denso in \mathcal{H} e quindi $\mathcal{L}_{\phi_0}^\infty$ è denso in
 $(H - \lambda I)^{-1}\mathcal{H}$.

La chiusura di $(H - \lambda I)^{-1}\mathcal{H}$ nella norma del grafico di H coincide con $D(H)$;
 quindi \mathcal{K} è denso in $D(H)$ nella topologia del grafico di H .

Ma $\mathcal{K} \subset D(H_0) \cap D(V)$ e quindi anche quest'ultimo insieme è denso in \mathcal{H} nella
 stessa topologia.

♡

Nota 19.6

Nel Teorema 19.1 abbiamo visto che per un operatore limitato che preserva
 la positività l'autovalore più basso ha molteplicità uno se l'operatore è ergodico.
 Nella teoria classica dei sistemi ergodici la proprietà di essere ergodico è equi-
 valente ad essere indecomponibile (metricamente transitivo).

Una analoga definizione può essere introdotta per operatori definiti su $L^2(X, \mu)$;
 questa definizione coincide con quella classica nel caso di operatori ottenuti per
 dualità da applicazioni di X in sè.

Diamo qui la definizione, la dimostrazione del fatto che indecomponibilità implica
 unicità della stato fondamentale e anche due risultati che garantiscono che $H_0 +$
 V è indecomponibile se H_0 lo è e V soddisfa opportune condizioni.

Definizione 19.6

L'operatore chiuso e limitato T su $L^2(X, \mu)$ è detto *indecomponibile* se esso
 non commuta con la proiezione su $L^2(Y, \mu)$ dove $Y \subset X$ e $X \setminus Y$ sono insiemi
 misurabili di misura non nulla.

♣

Teorema 19.11

Sia T un operatore su $L^2(X, \mu)$ limitato autoaggiunto e che preserva la
 positività. Sia $\|T\|$ un autovalore di T .

Condizione necessaria e sufficiente affinché T sia indecomponibile è che l'auto-
 valore $\|T\|$ abbia molteplicità uno e la corrispondente autofunzione possa essere
 scelta positiva.

◇

Dimostrazione

Per la necessità, sia $Tu = \|T\|u$, $u \in L^2(X, \mu)$, $\|u\|_2 = 1$.
 Possiamo assumere che u sia reale poiché T preserva la realtà. Allora da

$$\|T\| = (u, Tu) \leq (|u|, T|u|) \tag{19.16}$$

segue

$$T|u| = \|T\| |u|.$$

Dunque

$$Tu_{\pm} = \|T\| u_{\pm}.$$

Qui abbiamo definito $u_+(x) \equiv \max\{u(x), 0\}$ e $u_- \equiv u_+ - u$, così che $u_+ = (|u| + u)/2 \geq 0$ e $u_- = (|u| - u)/2 \geq 0$.

Se $f \in \mathcal{S}_\pm \equiv \{f \in L^2(X, \mu) : f \geq 0, (f, u_\pm) = 0\}$ si ha $(Tf, u_\pm) = \|T\|(f, u_\pm) = 0$ e dunque $Tf \in \mathcal{S}_\pm$.

Poiché T è indecomponibile, deve essere $u_- = 0$ oppure $u_+ = 0$.

Dunque u ha segno determinato, e questo implica unicità.

Reciprocamente, per la sufficienza, supponiamo che $\|T\|$ sia un autovalore con molteplicità uno, con autovettore $u > 0$ e che esista un insieme Y , μ -misurabile e tale che il proiettore P su $L^2(Y, \mu)$ commuti con T .

Ne segue $Pu = u$. Ma questo è possibile solo se $Y \equiv X$ o se Y ha misura zero.

♡

Nel caso di operatori autoaggiunti non limitati la definizione di irriducibilità richiede maggior cura.

Definizione 19.7

Sia A autoaggiunto non limitato su $L^2(X, \mu)$. A è *indecomponibile* se non esiste un sottoinsieme misurabile $Y \subset X$ con misura maggiore di zero e minore di uno, tale che

$$f \in D(A) \Rightarrow P_Y f \in D(A), \quad P_Y A - A P_Y = 0 \quad \text{su } D(A),$$

dove abbiamo indicato con P_Y il proiettore ortogonale su $L^2(Y, \mu)$.

Se A è limitato inferiormente questa condizione equivale alla condizione che $(A + \lambda I)^{-1}$ sia indecomponibile (nel senso della definizione precedente) per un λ sufficientemente grande.

◇

Diamo ora un risultato che data l'indecomponibilità di H_0 assicura quella di $H_0 + V$ sotto opportune condizioni sul potenziale V .

Se $H_0 + V$ e H_0 sono limitati dal basso, questo risultato garantisce l'unicità dello stato fondamentale di $H_0 + V$ se H_0 ha uno stato fondamentale unico (come è il caso se H_0 è la Hamiltoniana dell'oscillatore armonico).

Teorema 19.12

Sia $\mathcal{H} = L^2(X, \mu)$, H_0 autoaggiunto e positivo. Siano U e $-W$ funzioni misurabili positive su X . Sia $Q(U) \cap Q(H_0)$ denso in \mathcal{H} e sia W piccolo in forma rispetto a H_0 .

Definiamo $H = H_0 + U + W$ come somma di forme quadratiche, e indichiamo con \hat{H}_0 l'estensione di Friedrichs della forma quadratica chiusa positiva che si ottiene chiudendo la forma di H_0 ristretta a $Q(H_0) \cap Q(W)$.

Allora se \hat{H}_0 è indecomponibile lo è anche H .

◇

Nota 19.7

Se U soddisfa $(\phi_0, U\phi_0) < +\infty$ allora $Q(H_0) \cap Q(U)$ è denso in $Q(H_0)$.

Dunque $\hat{H}_0 = H_0$ e H è indecomponibile. ♣

Dimostrazione del Teorema 19.12

E' facile verificare che P_Y commuta con H se e solo se $g \in Q(H)$ implica

$$P_Y g \in Q(H), \quad (f, H P_Y g) - (P_Y f, H g) = 0 \quad \forall f, g \in Q(H). \quad 19.18$$

In particolare se $H \geq 0$ si ha

$$P_Y H \psi = H P_Y \psi, \quad \psi \in D(H) \Rightarrow P_Y \sqrt{H} \phi = \sqrt{H} P_Y \phi, \quad \phi \in D(\sqrt{H}). \quad 19.19$$

Supponiamo ora che P_Y commuti con H .

Poché P_Y commuta con U e W , se $Q(H)$ è denso in $Q(H_0)$ da (19.18) segue

$$(f, H_0 P_Y g) = (P_Y f, H_0 g) \quad \forall f, g \in Q(H_0). \quad 19.20$$

Ne deduciamo che $\mu(Y) = 0$ oppure $\mu(X \setminus Y) = 0$, poiché per ipotesi H_0 è indecomponibile.

Se $Q(H)$ non è denso in $Q(H_0)$ notiamo che $(P_Y g, H_0 P_Y g) = (g, H_0 g)$ se $g \in Q(H)$. Dunque l'applicazione $g \mapsto P_Y g$ è continua nella topologia di $Q(H_0)$.

Ne segue che $g \in Q(\hat{H}_0) \Rightarrow P_Y g \in Q(\hat{H}_0)$ e che $g \mapsto P_Y g$ è continua nella topologia di \hat{H}_0 .

Dunque (19.19) vale anche per \hat{H}_0 e quindi P_Y commuta con \hat{H}_0 . ♡

Dato il ruolo privilegiato che hanno gli operatori limitati su $L^2(X, \mu)$ che preservano la positività, è importante avere dei criteri che permettano di determinare se un operatore autoaggiunto genera un semigruppone che preserva la positività. Il criterio sarà particolarmente interessante se riguarda solo la forma quadratica associata all'operatore, e quindi solo *gli elementi di matrice*.

Questo porterà a caratterizzare quelle forme quadratiche che definiscono operatori autoaggiunti che generano semigruppone che preservano la positività.

I risultati di base in questa direzione sono dovuti a Beurling e Deny.

Teorema 19.13 (Beurling-Deny I)

Sia $H \geq 0$ su $L^2(X, \mu)$. Poniamo $(\psi, H\psi) = +\infty$ se $\psi \notin D(H)$. Allora sono equivalenti

a)

e^{-tH} preserva la positività per ogni $t > 0$.

b)

$$(|u|, H|u|) \leq (u, Hu) \quad \forall u \in L^2(X, \mu).$$

c)

e^{-tH} preserva la realtà per ogni t e inoltre $(u_+, Hu_+) \leq (u, Hu) \quad \forall u \in L^2(X, \mu)$.

d) e^{-tH} preserva la realtà per ogni t e inoltre $(u_+, Hu_+) + (u_-, Hu_-) \leq (u, Hu)$.
Qui abbiamo utilizzato le notazioni $u_+(x) \equiv \max\{u(x), 0\}$ e $u_- \equiv u_+ - u$.

◇

Nota 19.8

Gli enunciati diventano più semplici se sono espressi in termini delle corrispondenti forme quadratiche. Indichiamo con \mathcal{E}_H la forma quadratica associata all'operatore H e con $Q(\mathcal{E}_H)$ il corrispondente dominio di forma.

Nel seguito omettiamo il pedice H .

In questo caso, la condizione in b) diventa

b')

$$u \in Q(\mathcal{E}) \Rightarrow |u| \in Q(\mathcal{E}), \text{ e inoltre } \mathcal{E}(|u|, |u|) \leq \mathcal{E}(u, u).$$

Analogamente le condizioni in c) e d) diventano rispettivamente

c')

$$u \in Q(\mathcal{E}) \Rightarrow u_+ \in Q(\mathcal{E}), \quad \mathcal{E}(u_+, u_+) \leq \mathcal{E}(u, u).$$

d')

$$u \in Q(\mathcal{E}) \Rightarrow u_+, u_- \in Q(\mathcal{E}), \quad \mathcal{E}(u_+, u_+) + \mathcal{E}(u_-, u_-) \leq \mathcal{E}(u, u).$$

Nella applicazioni che daremo la parte interessante di questo teorema è l'equivalenza $a) \Leftrightarrow b)$. Questa è la sola parte del teorema di cui daremo la dimostrazione; la dimostrazione della altre equivalenze si ottiene procedendo in modo simile.

♣

Dimostrazione di $a) \Leftrightarrow b)$ nel Teorema 19.13

a) \Rightarrow b)

Si ha

$$(u, Hu) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} (u, (I - e^{-tH})u), \quad 19.21$$

$$(u, e^{-tH}u) = \|e^{-\frac{t}{2}H}u\|_2^2 \leq \|e^{-\frac{t}{2}H}|u|\|_2^2 = (|u|, e^{-tH}|u|). \quad 19.22$$

Dunque

$$(u, (I - e^{-tH})u) \geq (|u|, (I - e^{-tH})|u|). \quad 19.23$$

Passando al limite $t \rightarrow \infty$ si deduce b).

Si può notare che il risultato si esprime più precisamente nella forma 2') poiché (19.23) vale per ogni $u \in L^2(X, \mu)$ e il limite a destra in (19.21) esiste per ogni $u \in Q(\mathcal{E})$ e vale $\mathcal{E}(u, u)$.

b) \Rightarrow a)

Sia $u \geq 0$, $\lambda > 0$. Definiamo

$$w \equiv (H + \lambda I)^{-1}u. \quad 19.24$$

Vogliamo dimostrare che $w \geq 0$. Questo dimostra che la risolvante preserva la positività, e pertanto anche il semigruppone ha questa proprietà, da cui segue la tesi.

Poniamo

$$\mathcal{E}(u, u) \equiv (u, Hu) + \lambda(u, u). \quad 19.25$$

Svolgendo i calcoli si vede che

$$\mathcal{E}(u + v, u + v) = \mathcal{E}(u, u) + \mathcal{E}(v, v) + 2\Re((H + \lambda)u, v).$$

Se $\Re(v) > 0$

$$\mathcal{E}(w + v, w + v) = \mathcal{E}(w, w) + \mathcal{E}(v, v) + \Re(u, v) \geq \mathcal{E}(w, w) + \mathcal{E}(v, v). \quad 19.26$$

Si può notare l'analogia con la disuguaglianza che caratterizza gli operatori dissipativi. Se si ha uguaglianza in (19.26) allora $v = 0$ poiché $u \geq 0$.

Poniamo $v = |w| - w$. Allora

$$\mathcal{E}(|w|, |w|) \geq \mathcal{E}(w, w) + \mathcal{E}(|w| - w, |w| - w) \quad 19.27$$

e l'identità vale se $v = 0$.

Poiché per ipotesi $\mathcal{E}(|w|, |w|) \leq \mathcal{E}(w, w)$ da (19.27) si deduce $v = 0$.

♡

Teorema 19.14 (Beurling-Deny II)

Sia $H \geq 0$ un operatore autoaggiunto su $L^2(X, \mu)$ generatore di un semigruppone che preserva la positività.

Allora sono equivalenti

a)

Per ogni valore di $t > 0$ l'operatore e^{-tH} definisce una contrazione su $L^p(X, \mu)$, $1 \leq p \leq \infty$.

b)

Per ogni valore di $t > 0$ l'operatore e^{-tH} definisce una contrazione su $L^\infty(X, \mu)$.

c)

Per ciascun elemento f si ha $(f \wedge 1, H f \wedge 1) \leq (f, H f)$
 (abbiamo definito $(f \wedge 1)(x) = \min\{f(x), 1\}$ e $(f, H f) = \infty$ se $f \notin D(H)$).

d)

Se la funzione F soddisfa $|F(x)| \leq |x|$ e $|F(x) - F(y)| \leq |x - y|$, $\forall x, y \in R$, allora

$$(F_f, H F_f) \leq (f, H f) \quad \forall f \in L^2(X, \mu),$$

dove abbiamo posto $F_f(x) \equiv F(f(x))$.

◇

Nota 19.9

Abbiamo utilizzato la notazione *definisce una contrazione* perché inizialmente l'operatore e^{-tH} è definito solo su $L^2(X, \mu)$.

L'estensione a spazi $L^p(X, \mu)$, $p \neq 2$, si ottiene restringendo l'operatore a $L^2(X, \mu) \cap L^p(X, \mu)$ (un sottoinsieme denso sia di $L^2(X, \mu)$ che di $L^p(X, \mu)$) e poi estendendolo a tutto $L^p(X, \mu)$.

Questo è possibile perché e^{-tH} è per ipotesi limitato in norma da uno su $L^2(X, \mu) \cap L^p(X, \mu)$ nella topologia degli operatori limitati lineari su $L^p(X, \mu)$. ♣

Nota 19.10

Anche in questo teorema, la formulazione migliore è ottenuta facendo uso della forma quadratiche. Ad esempio, il punto c) si riformula come

c')

$$f \in Q(\mathcal{E}) \Rightarrow f \wedge 1 \in Q(\mathcal{E}), \quad \mathcal{E}(f \wedge 1), f \wedge 1 \leq \mathcal{E}(f, f)$$

e il punto d) si riformula

d')

$$|F(x)| \leq |x|, \quad |F(x) - F(y)| \leq |x - y| \Rightarrow f \in Q(\mathcal{E}) \rightarrow F(f) \in Q(\mathcal{E})$$

e inoltre $\mathcal{E}(F_f, F_f) \leq \mathcal{E}(f, f)$.

Si noti anche che la funzione F per ipotesi è una contrazione con costante Lipschitz minore o uguale 1.

Quindi d') è la richiesta che per queste funzioni l'applicazione $x \mapsto F_f(x)$ lasci invariato il dominio di forma e operi come una contrazione. ♣

Dimostrazione del Teorema 19.14.

Le implicazioni $d) \Rightarrow c)$, $b) \Rightarrow a)$, $c) \Rightarrow b)$ sono semplici. Dimostriamo $c) \Rightarrow b)$, $a) \Rightarrow d)$.

$c) \Rightarrow d)$

Sia $u \in L^2(X, \mu)$, $0 \leq u(x) \leq 1 \quad \forall x$.

Definiamo, per $v \in Q(\mathcal{E})$

$$\psi(v) = (v, Hv) + \|u - v\|_2^2 = (v, (H + I)v) + \|u\|_2^2 - 2\Re(u, v) \quad 19.28$$

e poniamo $R_1 \equiv (H + I)^{-1}$. Allora $\psi(R_1 u) = \|u\|_2^2 - (u, R_1 u)$ e

$$((R_1 u - v), (H + I)(R_1 u - v)H(R_1 u - v)) = (u, R_1 u) + (v, (H - I)v) - 2\Re(u, v).$$

Dunque

$$\psi(v) = \psi(R_1 u) + ((R_1 u - v), (H + I)(R_1 u - v)H(R_1 u - v))$$

$$= (u, R_1 u) + (v, (H - I)v) - 2\Re(u, v). \quad 19.29$$

Ne consegue che $\psi(v)$ raggiunge il suo valor massimo solo per $v = R_1 u$. Poiché $u \leq 1$ si ha

$$|u(x) - \max\{v(x), 1\}| \leq |(u(x) - v(x))|.$$

Dunque

$$\psi((R_1 \wedge 1)) \leq \psi(R_1 u).$$

Essendo $R_1 u$ un punto di minimo si ha $(R_1 \wedge 1) = R_1$ e quindi $R_1 u \leq 1$.

Ne segue che R_1 contrae in $L^\infty(X, \mu)$.

Nello stesso modo si dimostra che R_ϵ è una contrazione in $L^\infty(X, \mu)$ e dunque

$$e^{-tH} \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left(I + \frac{t}{n} H \right)^{-n}$$

è una contrazione in $L^\infty(X, \mu)$.

a) \Rightarrow d)

Basta dimostrare che, sotto le ipotesi fatte su F vale

$$(Ff, (I - e^{-tH})Ff) \leq (f, e^{-tH}f). \quad 19.30$$

Infatti da (19.30) si può ottenere d) dividendo per t e passando al limite $t \rightarrow 0$. Consideriamo una partizione α di X in insiemi disgiunti misurabili $S_1^\alpha, \dots, S_N^\alpha$. Denotiamo con u_k^α la funzione indicatrice dall'insieme S_k^α e con Π_k^α il proiettore su u_k^α definito da $\Pi_k^\alpha f = (u_k^\alpha, f)u_k^\alpha$.

Per densità, basterà dimostrare, per ogni partizione finita,

$$\sum_k (F\Pi_k^\alpha f, (I - e^{-tH})F\Pi_k^\alpha f) \leq \sum_k (\Pi_k^\alpha f, e^{-tH}\Pi_k^\alpha f).$$

Posto

$$b_{k,h}^\alpha \equiv (u_k^\alpha, (I - e^{-tH})u_h^\alpha),$$

dobbiamo dimostrare

$$\sum_{h,k} \bar{F}\Pi_k^\alpha f F\Pi_k^\alpha f b_{h,k} \leq \sum_{h,k} \bar{u}_k^\alpha u_h^\alpha b_{h,k} \quad 19.31$$

sotto le ipotesi

$$|F\Pi_k^\alpha f| < \Pi_k^\alpha f, \quad |F\Pi_k^\alpha f - F\Pi_k^\beta f| \leq |\Pi_k^\alpha f - \Pi_k^\beta f|.$$

Poniamo

$$\lambda_k \equiv (u_k^\alpha, u_k^\alpha), \quad b_{h,k} \equiv \lambda_k \delta_{h,k} - a_{h,k}, \quad a_{h,k} \equiv (u_h^\alpha, e^{-tH}u_k^\alpha).$$

Dunque $\sum_h a_{h,k} \leq \lambda_k$. Si ha quindi

$$\sum_{h,k} \bar{z}_h z_k b_{h,k} = \sum_{h < k} a_{h,k} |z_h - z_k|^2 + \sum_k m_k |z_k|^2, \quad m_k \equiv \lambda_k - \sum_h a_{h,k} \geq 0. \quad 19.32$$

Posto $z_k \equiv F_{\pi_k^\alpha} f$, l'implicazione a) \Rightarrow d) nel teorema resta dimostrata. \heartsuit

Un'ulteriore caratterizzazione, di cui non faremo direttamente uso, si basa sul seguente lemma.

Lemma 19.15 (Lévy-Khinchin)

Sia $F(x)$ una funzione a valori complessi su R^d , con $\Re F(x) \geq -c$. Definiamo $e^{-F(i\nabla)}$ mediante

$$e^{-F(i\nabla)} = \mathcal{F} e^{-F} \mathcal{F}^{-1}$$

dove \mathcal{F} indica la trasformata di Fourier.

Allora sono equivalenti

- a) L'operatore $e^{-F(i\nabla)}$ preserva la positività;
- b) $\forall t \geq 0$ il nucleo di $e^{-tF(i\nabla)}$ è una distribuzione positiva nel senso di Bochner.
- c)

$$\bar{F}(x) = F(-x), \quad \sum_1^m (\mathcal{F}F)(z_i - z_j) \bar{z}_i z_j \leq 0, \quad \forall x_i \in R^d, \quad z \in C^m, \quad \sum_1^m z_i = 0.$$

\diamond

Dimostrazione

b) \Rightarrow a)

Poniamo $G(x) \equiv e^{-tF(x)}$ e siano $f, g \in C_0^\infty(R^d)$, $f \geq 0$, $g \geq 0$.

Indicando con \hat{G} la trasformata di Fourier di G e con $*$ la convoluzione si ha

$$(f, G(-i\nabla)g) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} (\hat{G} * (\hat{g} * \hat{f}))(0).$$

Dunque, se \hat{G} è una misura positiva, allora $(f, G(-i\nabla)g) \geq 0$.

a) \Rightarrow b)

Supponiamo che $G(-i\nabla)$ preservi la positività.

Poniamo $g_y(x) \equiv f(x + y)$.

Prendendo la trasformata di Fourier

$$(2\pi)^{-\frac{d}{2}} (\hat{G} * (\hat{f} * \hat{f}))(y) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} (\hat{G} * (\hat{g}_y * \hat{f}))(0) = (f, G(-i\nabla)g) \geq 0.$$

Poiché $\Re F(x) \geq -C$ si ha $G(x) \leq e^{tC} \quad \forall x$.

Dunque $G(x)$ è una distribuzione temperata e così è anche G .

Prendendo ora $f(x) = j_\epsilon(x)$ dove j_ϵ è un'approssimazione della delta e passando al limite $\epsilon \rightarrow 0$ si ha

$$\hat{g}_\epsilon(k) \hat{G}(k) \rightarrow \hat{G}(k)$$

uniformemente sui compatti, e dunque $\hat{G}(k)$ è una misura positiva.

b) \Leftrightarrow c)

Se indichiamo con A la matrice i cui elementi sono $a_{i,j}$ e con $M(t)$ la matrice i cui elementi sono $e^{ta_{i,j}}$ dobbiamo dimostrare che $M(t)$ è positiva definita se e solo se A è positiva definita quando ristretta al sottospazio $\sum_k \xi_k = 0 \equiv (\hat{1}, \xi)$, dove $\hat{1}$ è il vettore che ha tutti le componenti uguali al numero 1.

Dimostriamo che la condizione è necessaria.

Da $M(0)_{i,j} = 1$ segue $(\xi, M(0)\xi) = 0$ se $(\xi, \hat{1}) = 0$. Poiché $(\xi, M(t)\xi) \geq 0 \quad \forall t \geq 0$, si ha

$$(\xi, A\xi) \equiv \frac{d}{dt}(\xi, M(t)\xi)_{t=0} > 0. \quad 19.33$$

Dimostriamo adesso che la condizione è sufficiente.

Indichiamo con $I - P$ il proiettore su $\hat{1}$.

Per ipotesi, $PAP > CI$.

Ma

$$A = PAP + (I - P)A(I - P) + PA(I - P) + (I - P)AP, \quad 19.34$$

dunque

$$a_{i,j} = \tilde{a}_{i,j} + \bar{b}_i + b_j,$$

dove la matrice \tilde{A} con elementi $\tilde{a}_{ij} = (PAP)_{ij}$ è definita positiva.

Ne segue

$$M(t)_{i,j} = e^{t\bar{b}_j} e^{t\tilde{a}_{i,j}} e^{tb_i}$$

Quindi la matrice $M(t)$ viene ottenuta dalla matrice positiva $\tilde{M}(t)$ con elementi $e^{t\tilde{a}_{i,j}}$ mediante una trasformazione lineare su R^N ed è pertanto anch'essa positiva.

♡

Una generalizzazione del Teorema II di Beurling-Deny è stata data da Fukushima.

Essa provvede una corrispondenza biunivoca tra semigrupperi che preservano la positività e forme di Dirichlet con speciali proprietà.

Teorema 19.16 (Fukushima)

Nella relazione data dal teorema II di Beurling-Deny, il semigruppoo *migliora* la positività precisamente se la corrispondente forma di Dirichlet è *strettamente contrattiva* cioè

$$|f| \geq c > 0, \quad E(|f|, |f|) = E(f, f) \Rightarrow f = \alpha|f|.$$

◇

Per una dimostrazione di questo teorema e per una descrizione dettagliata della relazione tra forme quadratiche e processi di Markov si può vedere [F80]

19.1 PROPRIETÀ DI REGOLARIZZAZIONE, IPERCONTRATTIVITÀ

Discutiamo ora condizioni sotto le quali il semigruppoo e^{-tH} ha delle proprietà di regolarizzazione.

Notiamo che se T è un toro in dimensione d e H è il Laplaciano definito su T da condizioni periodiche, per ogni funzione $f \in L^2(T)$ e per ogni $t > 0$ si ha $e^{tH} f \in C^\infty(T)$. Infatti utilizzando la serie di Fourier si ha

$$\mathcal{F}(e^{tH} f) = \sum_{k=1}^d \sum_{n_k \in \mathbb{N}} e^{-n_k^2 t} f_{n_1, \dots, n_d}$$

e la serie è uniformemente convergente per ogni $t > 0$.

Lo stesso avviene se X è una varietà Riemanniana compatta e H è l'operatore di Laplace-Beltrami.

Nel caso di varietà non compatte e in generale se X è uno spazio di misura, la possibile proprietà di regolarizzazione è di natura diversa ed è una generalizzazione della proprietà di ipercontrattività che abbiamo già discusso in questo capitolo.

Sia μ una misura di probabilità in uno spazio X . Si avranno le inclusioni

$$L^p(X, \mu) \subset L^q(X, \mu), \quad 1 \leq p \leq q \leq \infty, \quad 19.35$$

e le inclusioni sono strette se la misura μ non carica solo un insieme *finito* di X . Definiamo

$$\|e^{-tH}\|_{q \rightarrow p} \equiv \sup\{\|e^{-tH} f\|_p, f \in L^q(X, \mu) \cap L^p(X, \mu), \|f\|_q \leq 1\}. \quad 19.36$$

La relazione (19.35) si traduce in

$$\|e^{-tH}\|_{q \rightarrow p} \leq 1 \quad q \geq p.$$

La proprietà di regolarizzazione in cui siamo interessati riguarda in caso $q < p$.

Definizione 19.8

Il semigruppò e^{-tH} è detto essere (q, p, t_0) -ipercontrattivo, con $q < p$, se esistono $C_0 > 0$ e $t_0 > 0$ tali che si abbia

$$\|e^{-t_0 H}\|_{q \rightarrow p} \leq C_0, \quad q < p. \quad 19.37$$

◇

Nota 19.11

Se (19.37) è soddisfatta per $t = t_0$ essa è anche soddisfatta per $t > t_0$.

♣

Nota 19.12

La proprietà di essere (q, p, t_0) ipercontrattivo è importante perché vale per perturbazioni singolari dell'operatore di Laplace-Beltrami (che non hanno la proprietà di regolarizzazione $L^2(X, \mu) \rightarrow L^\infty(X, \mu)$) e anche in alcuni casi di spazi di misura di dimensione infinita.

Vale ad esempio in R^∞ con la *distribuzione normale debole* di I. Segal (una misura di Gauss) nel caso di modelli di Teoria di Campo Quantizzato e con la misura di Dobrushin-Ruelle (generalizzazione della misura di Gibbs nel limite termodinamico) nel caso di modelli di Meccanica Statistica per sistemi di infinite particelle.

♣

Dimostreremo che se H ha zero come autovalore semplice, la disuguaglianza (19.37) implica che questo autovalore è isolato.

E' quindi interessante dare, in termini dei loro generatori, una caratterizzazione dei semigruppò che preservano la positività e sono ipercontrattivi.

Questo porta all'analisi delle *disuguaglianze di Sobolev logaritmiche*.

Definizione 19. 9

Sia (X, μ) uno spazio di probabilità, e sia \mathcal{E} una forma quadratica chiusa non negativa densamente definita su $L^2(X, \mu)$.

Diciamo che \mathcal{E} *determina* (o *soddisfa*) una disuguaglianza di Sobolev logaritmica (abbreviata *S.L.*) se esiste una costante positiva K tale che

$$K \int_X |f(x)|^2 \log \frac{|f(x)|}{\|f\|_2} d\mu(x) \leq \mathcal{E}(f, f), \quad \forall f \in Q(\mathcal{E}) \cap L^2(X, \mu), f \neq 0. \quad 19.38$$

◇

La massima costante positiva K per la quale vale (19.38) è detta *costante di Sobolev logaritmica* (relativa alla terna \mathcal{E}, X, μ).

Nota 19. 13

Per costruzione, entrambi i termini in (19.38) sono omogenei di ordine due per il riscaldamento $f \rightarrow \lambda f$, $\lambda > 0$. Pertanto la (19.38) può anche essere riscritta

nella forma

$$K \int_X |f(x)|^2 \log |f(x)| d\mu(x) \leq \mathcal{E}(f, f), \quad \|f\|_2 = 1.$$



Dimostreremo che la (19.38) è *condizione necessaria e sufficiente* affinché l'operatore autoaggiunto associato alla forma quadratica \mathcal{E} mediante l'estensione di Friedrichs generi un semigruppato ipercontrattivo.

Prima di far questo, confrontiamo, nel caso di R^d e con μ misura di Lebesgue, la relazione di (19.38) con le classiche disuguaglianze di Sobolev. Queste disuguaglianze sono, come abbiamo visto nel Capitolo 12,

$$\|f\|_q \leq C_{p,d} \|\nabla f\|_p, \quad \frac{1}{q} = \frac{1}{p} - \frac{1}{d}, \quad 1 \leq p \leq \infty, \quad 19.39$$

dove $C_{p,d}$ sono opportune costanti positive.

Le (19.39) vengono dimostrate inizialmente sotto l'ipotesi $f \in C_0^\infty(R^d)$, ma rimangono valide per densità e continuità per tutte le funzioni f per le quali il termine a destra è finito (ed a fortiori valgono se il termine a destra è infinito). Denotiamo le disuguaglianze (19.39) con le lettere $S_{d,p}$ (S per Sobolev).

Nota 19.14

Dal confronto tra (19.38) e (19.39) risulta che $S_{d,p}$ contengono più informazioni di $S.L.$ sulle possibili singolarità locali della funzione f . Tuttavia queste informazioni divengono sempre più deboli al crescere di d (la dimensione dello spazio) e perdono di interesse nel limite $d \rightarrow \infty$. In questo caso limite, come vedremo, le $S.L.$ rimangono uno strumento utile.



Per quanto riguarda il comportamento all'infinito (se X non è una varietà compatta) notiamo che le disuguaglianze $S_{d,p}$ valgono solamente per l'insieme di funzioni contenute nella chiusura nella norma $\|\nabla f\|_p$ delle funzioni C_0^∞ . Questo insieme non contiene tutte le funzioni il cui gradiente ha norma $L_p(X, \mu)$ limitata.

Nel caso di una varietà non compatta il confronto va fatto piuttosto con le *disuguaglianze coercive* di Sobolev

$$\|f\|_q \leq c_p \|\nabla f\|_p + b_p \|f\|_p, \quad \frac{1}{q} = \frac{1}{p} - \frac{1}{d}, \quad 1 \leq p \leq \infty \quad 19.40$$

per opportune costanti $c_p, b_p > 0$.

Nelle (19.40) il simbolo $\|f\|_p$ va inteso

$$\|f\|_p^p = \int_X |f(x)|^p d\mu(x),$$

dove μ è una misura (non necessariamente di peso totale finito) assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue.

Per completezza, notiamo che in R^d (o su una varietà non compatta di dimensione d) le (19.40) con $b_p > 0$ implicano *S.L.* .

Per vedere questo ad esempio nel caso $p = 2$, scegliamo f positiva e poniamo $d\nu = f^2 d\mu$.

Notiamo che la disuguaglianza di Jensen (Capitolo 12) implica

$$\begin{aligned} \frac{2}{q-2} \int_X \log f^{q-2}(x) d\nu(x) &\leq \frac{2}{q-2} \log \int_X f^{q-2}(x) d\nu(x) = \\ &= \frac{q}{q-2} \log \|f\|_q^2 \leq \frac{q}{q-2} (\|f\|_q^2 - 1) \end{aligned} \quad 19.41$$

dove, nell'ultima disuguaglianza abbiamo fatto uso del fatto che $\alpha \geq 1$ implica $\log \alpha \leq \alpha - 1$.

Da queste disuguaglianze deduciamo, per f reale positiva e per opportune costanti $a > 0$, $b > 1$,

$$\int_X f^2(x) \log \frac{f^2(x)}{\|f\|_2^2} d\mu(x) \leq c \frac{q}{q-2} \int_X \|\nabla f(x)\|^2 d\mu(x) + (b-1) \frac{q}{q-2} \int_X f^2(x) d\mu(x). \quad 19.42$$

Se X non è compatto, non si possono dedurre le *S.L.* dalle $S_{d,2}$ perché le *S.L.* pongono condizioni più stringenti al comportamento della funzione f a grandi distanze.

Tuttavia le *S.L.* possono essere dedotte dalle $S_{d,2}$ se si chiede inoltre che la funzione f soddisfi la *disuguaglianza di Poincaré*

$$\alpha_d \|f - E(f)\|_2^2 \leq \int_X \|\nabla f(x)\|^2 d\mu(x) \equiv \mathcal{E}(f, f) \quad 19.43$$

dove abbiamo indicato con \mathcal{E} la forma di energia, α_d è un'opportuna costante e abbiamo posto

$$E(f) \equiv \int_X f(x) d\mu(x), \quad f \in C^\infty(R^d)$$

Nota 19.15

Grosso modo, se una funzione soddisfa la disuguaglianza di Poincaré la sua norma $\|f\|_2$ è controllata dalla sua media e dalla norma L^2 del suo gradiente. ♣

Da (19.43) si deduce che se $E(f) = 0$, allora $\alpha_d \|f\|_2^2 \leq \mathcal{E}(f, f)$.

Quindi, a meno di un opportuno riscaldamento delle costanti, *S.L.* segue, per $d < \infty$, da $S_{d,2}$.

Notiamo però che $\lim_{d \rightarrow \infty} \alpha_d = 0$.

Se $E(f) \neq 0$ poniamo

$$\tilde{f} \equiv f - E(f) \tag{19.44}$$

Se la misura μ è finita si ha $\tilde{f} = \pi(f)$, dove π è il proiettore ortogonale in $L^2(X, \mu)$ sulla funzione costante. Un calcolo esplicito mostra che

$$\int_X |f(x)|^2 \log \frac{|f(x)|^2}{\|f\|_2^2} d\mu(x) \leq \int_X |\tilde{f}(x)|^2 \log \frac{|\tilde{f}(x)|^2}{\|\tilde{f}\|_2^2} d\mu(x) + 2 \int_X |\tilde{f}(x)|^2 d\mu(x) \tag{19.45}$$

e quindi esiste una costante K_d tale che

$$K_d \int_X |f(x)|^2 \log \frac{|f(x)|}{\|f\|} d\mu(x) \leq \mathcal{E}(f, f), \quad K_d^{-1} = C_d + \frac{b_d + 2}{\alpha_d}. \tag{19.46}$$

Supponiamo adesso che su $L^2(X, \mu)$ agisca un semigruppato T_t contrattivo e Markoviano (tale cioè che $T_t \iota = \iota$) e che il suo generatore $-L$ sia l'estensione di Friedrichs associata alla forma quadratica \mathcal{E}

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (T_t f - f, f) = \mathcal{E}(f, f) = -(f, Lf). \tag{19.47}$$

La funzione ι è un autovettore di L all'autovalore zero. Se zero è un autovalore semplice e isolato

$$\sigma(L) \subseteq \{0\} \cup [\alpha, \infty), \quad \alpha > 0, \tag{19.48}$$

dalla teoria spettrale si deduce

$$\alpha^2 \|f - E(f)\|^2 \leq \mathcal{E}(f, f). \tag{19.49}$$

Vedremo in seguito che la disuguaglianza *S.L.* (19.46) implica (19.49) (con $2K \leq \alpha$).

Nota 19.16

Nel contesto delle C^* -algebre analoghe definizioni di forme di Dirichlet e semigruppato markoviano sono stati introdotti e studiati in [AHK77] e [GR72] nel caso che esista uno stato traccia, ed estesa a casi più generali di stati che soddisfano la condizione G.N.S. (cfr. Capitolo 15) in [GL93] e in [Ci97].

La costruzione di semigruppato su C^* -algebra che soddisfano proprietà di Feller è studiata in [Sa96].

La relazione tra ipercontrattività e disuguaglianza di Sobolev logaritmica nel caso (non commutativo) della forma di Clifford-Dirichlet (campi di Fermi quantizzati) è stata approfondita in [GR75] e ripresa in [CL93].



19.1.1 RELAZIONE CON L'ENTROPIA

La presenza della funzione logaritmo in $S.L$ suggerisce una relazione tra le disuguaglianze di Sobolev Logaritmiche e la *funzione entropia*.

Ricordiamo che date due misure di probabilità μ, ν su X l'entropia relativa di μ rispetto a ν , indicata con $H(\mu|\nu)$, è definita nel seguente modo:

1)

se μ non è assolutamente continua rispetto a ν , allora $H(\mu|\nu) = \infty$

2)

Se μ è assolutamente continua rispetto a ν con derivata di Radon-Nikodym f_μ

$$H(\mu|\nu) \equiv \int_X f_\mu(x) \log f_\mu(x) d\nu(x)$$

E' facile verificare la proprietà riflessiva:

$$H(\mu|\nu) = H(\nu|\mu) \tag{19.50}$$

e che $H(\mu|\nu) = 0$ se e solo se $\mu = \nu$.

Utilizzando la disuguaglianza, valida per $y \in (0, +\infty)$,

$$3(y-1)^2 \leq (4+2y)(y \log y - y + 1),$$

ricordando che per la derivata di Radon-Nikodym f_μ di μ rispetto a ν vale $\int_X f_\mu(x) d\nu(x) = 1$ e facendo uso della disuguaglianza di Schwarz e del fatto che

$$y \log y - y + 1 \geq 0 \quad \forall y > 0,$$

si deduce

$$\begin{aligned} 3\|\mu - \nu\|_{var}^2 &\equiv 3\|f_\mu - 1\|_{L^1(X,\nu)}^2 \leq \left\| (4-2f_\mu)^{\frac{1}{2}} (f_\mu \log f_\mu - f_\mu + 1)^{\frac{1}{2}} \right\|_{L^1(X,\nu)}^2 \leq \\ &\leq \|4+2f_\mu\|_{L^1(X,\nu)} \|f_\mu \log f_\mu - f_\mu + 1\|_{L^1(X,\nu)} \equiv 6H(\mu|\nu). \end{aligned} \tag{19.51}$$

Nell'ultima identità abbiamo utilizzato

$$\|f_\mu \log f_\mu - f_\mu + 1\|_{L^1(X,\nu)} \equiv \int_X [f_\mu(x) \log f_\mu(x) - f_\mu(x) + 1] d\nu(x) = \int_X f_\mu(x) \log f_\mu(x) d\nu(x).$$

19.1.2 RELAZIONE TRA S.L. E DENSITÀ SPETTRALE

Studiamo ora la relazione tra la disuguaglianza di Sobolev logaritmica e le proprietà spettrali dell'operatore di Laplace-Beltrami su una varietà Riemanniana compatta.

Generalizzeremo poi questa relazione nel contesto di semigrupperi su spazi di probabilità.

Se X è una superficie di Riemann compatta, indichiamo con μ la misura di Riemann-Lebesgue.

Essa soddisfa

$$P_t^* \mu \equiv \mu \cdot P_t = \mu$$

dove abbiamo indicato con P_t il semigruppero generato dall'operatore di Laplace-Beltrami \mathcal{L} definito da

$$(u, \mathcal{L}u) = - \int_X \|\nabla u(x)\|^2 d\mu(x), \quad u \in D(\mathcal{L}).$$

Qui ∇ indica il gradiente rispetto alla metrica Riemanniana g su X e $\|\nabla u(x)\|$ indica la norma su $T_x X$, lo spazio tangente a X in x , calcolata usando il tensore metrico $g_{ij}(x)$.

Indichiamo con f_t la derivata di Radon-Nikodym di $P_t^* \nu$ rispetto a μ (omettiamo d'ora in poi il pedice μ)

$$f_t \equiv \frac{d(P_t^* \nu)}{d\mu}.$$

Con queste notazioni la diseguaglianza *S.L.* (19.38) dà

$$\frac{K}{2} H(P_t^* \nu | \mu) \leq \mathcal{E}(f_t^{\frac{1}{2}}, f_t^{\frac{1}{2}}). \tag{19.52}$$

Per calcolo diretto otteniamo

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} H(P_t^* \nu | \mu) &= \int_X (\log f_t(x)) (\mathcal{L} f_t)(x) d\mu(x) = \\ &= - \int_X \|\nabla f_t(x)\|^2 (f_t(x))^{-1} d\mu(x) = -4 \mathcal{E}(f_t^{\frac{1}{2}}, f_t^{\frac{1}{2}}). \end{aligned} \tag{19.53}$$

Da (19.52) e (19.53) si deduce

$$\frac{d}{dt} H(P_t^* \nu | \mu) \leq -2K H(P_t^* \nu | \mu)$$

e quindi, usando la diseguaglianza di Gronwall,

$$H(P_t^* \nu | \mu) \leq e^{-2Kt} H(\nu | \mu). \tag{19.55}$$

Da (19.51) segue allora

$$\|P_t^* \nu - \mu\|_{var} \leq \sqrt{2H(\mu | \nu)} e^{-Kt}, \quad t \geq 0, \tag{19.56}$$

che si può riscrivere, posto $f \equiv \frac{d\nu}{d\mu}$, nella forma

$$\|P_t f - 1\|_1 \leq \sqrt{2H(\mu | \nu)} e^{-Kt}, \quad \forall f \in L^1(X, \mu), \quad \|f\|_1 = 1. \tag{19.57}$$

Dalla (19.56) deduciamo che, per ogni misura di probabilità ν , la misura $P_t^*\nu$ converge in modo esponenziale alla "misura di equilibrio" μ . Analogamente dalla (19.57) deduciamo che $P_t f$ converge in modo esponenziale alla costante 1. Se la convergenza in (19.57) vale anche in $L^2(X, \mu)$ allora lo spettro dell'operatore \mathcal{L} è contenuto nell'insieme

$$\{0\} \cup [K, +\infty)$$

e zero è un autovalore non degenere.

Nota 19.17

Una disuguaglianza della forma (19.54) può essere verificata in contesti più generali, ed è utile per studiare casi in cui $X = R^\infty$ con un'opportuna topologia. E' sufficiente che sia definibile una forma quadratica del tipo

$$\mathcal{E}(u, u) = \sum_{n=1}^{\infty} \int_X \left| \frac{\partial u}{\partial x_n} \right|^2 d\mu \tag{19.58}$$

e che sia legittima l'integrazione per parti che conduce a (19.54).

La (19.58) è definibile per funzioni su R^∞ che dipendono solo da un numero finito di coordinate x_n e sono nel dominio della derivata parziale rispetto a queste coordinate.

Indichiamo con D_0 la collezione di queste funzioni (funzioni cilindriche).

Si dimostra, sotto opportuna condizioni sulla misura μ , che la forma quadratica definita da (19.58) su D_0 è chiudibile e che la sua chiusura soddisfa (19.54).



Abbiamo visto che la costante K che entra nella disuguaglianza di Sobolev logaritmica costituisce una stima dal basso dell'intervallo che separa l'autovalore (semplice) zero del resto dello spettro.

Per questo motivo ha notevole rilevanza il seguente problema:

Sia μ una misura di probabilità su una varietà di Riemann X di dimensione d . Consideriamo la forma quadratica

$$\mathcal{E}(\phi, \phi) \equiv \int_X \|\nabla \phi(x)\|^2 d\mu(x)$$

definita su $C_0^\infty(X)$ e chiudibile.

Supponiamo che sia soddisfatta la *S.L.* con costante K

$$K \int_X |\phi(x)|^2 \log \frac{|\phi(x)|}{\|\phi\|_2} d\mu(x) \leq \mathcal{E}(\phi, \phi) \tag{19.59}$$

per ogni funzione ϕ a valori reali, $\phi \in D(\mathcal{E}) \cap L^2(X, \mu)$.

Data una funzione $U \in C^\infty(X)$ definiamo una nuova misura di probabilità ν_U su X , equivalente a μ , mediante

$$\nu_U(dx) \equiv Z^{-1} e^{-U(x)} \mu(dx), \quad 19.60$$

dove abbiamo assunto che la funzione U sia integrabile rispetto a μ e Z è un fattore di normalizzazione che rende ν_U una misura di probabilità.

Definiamo una nuova forma quadratica \mathcal{E}_U mediante

$$\mathcal{E}_U(\phi, \phi) \equiv \int_X \|\nabla\phi(x)\|^2 d\nu_U(x) = Z^{-1} \int_X \|\nabla\phi(x)\|^2 e^{-U(x)} d\mu(x). \quad 19.61$$

Ci chiediamo se \mathcal{E}_U soddisfi una *S.L.*, e in caso affermativo se sia possibile dare una stima della nuova costante K_U .

A questo risponde il lemma seguente.

Lemma 19.17

Se $U \in C_0^\infty(X)$ la forma quadratica

$$\mathcal{E}_U(\phi, \phi) \equiv \int_X \|\nabla\phi(x)\|^2 d\nu_U(x)$$

soddisfa una disuguaglianza di Sobolev logaritmica e si ha

$$K_U \geq K e^{-\text{osc}(U)},$$

dove l'*oscillazione* di U , indicata con $\text{osc}(U)$, è definita da

$$\text{osc}(U) \equiv \max_{x \in X} U(x) - \min_{x \in X} U(x)$$

◇

Dimostrazione

Per ogni misura di probabilità ν su X , ogni funzione a valori reali $\phi \in L^2(X, \nu)$ ed ogni $t > 0$ vale

$$0 \leq \phi^2(x) \log \frac{\phi^2(x)}{\|\phi\|_\nu^2} \leq \phi(x)^2 \log \phi^2(x) - \phi^2(x) \log t^2 - \phi^2(x) + t^2$$

Infatti il termine a destra è una funzione convessa di t che raggiunge il suo minimo per

$$t = \|\phi\|_{L^2(X, \nu)} \equiv \|\phi\|_\nu.$$

Integrando rispetto a $\nu \equiv \nu_U$ e prendendo $t = \|\phi\|_{L^2(X, \mu)} \equiv \|\phi\|_2$ si ottiene, tenendo conto del fatto che \mathcal{E} soddisfa per ipotesi *S.L.*,

$$\int_X \phi^2(x) \log \frac{\phi(x)}{\|\phi\|_\nu} d\nu(x) \leq$$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{1}{2} \left(\int_X \phi(x)^2 \log \frac{\phi^2(x)}{\|\phi\|_2^2} d\nu(x) - \int_X \phi^2(x) d\nu(x) + \int_X \|\phi\|_2^2 d\nu(x) \right) \leq \\ &\leq \frac{1}{Z} \exp \left(- \min_{x \in X} U(x) \right) \int_X \phi^2(x) \log \frac{|\phi(x)|}{\|\phi\|_2} d\mu(x) \leq \\ &\leq \frac{1}{KZ} \exp \left(- \min_{x \in X} U(x) \right) \int_X \|\nabla \phi(x)\|^2 d\mu(x) \leq \frac{e^{\text{osc}(U)}}{K} \int_X \|\nabla \phi(x)\|^2 d\nu(x). \end{aligned}$$

♡

Nota 19.18

Una caratteristica notevole delle disuguaglianze di Sobolev logaritmiche è la loro *proprietà di additività* che qui non dimostreremo (per la dimostrazione si può vedere ad esempio [S84]).

Le *S.L.* sono preservate dal prodotto tensoriale tra spazi di misura, e la costante che ne risulta è maggiore o uguale al *minimo* tra le costanti associate ai fattori. Procedendo per induzione questo permette di dedurre la validità delle disuguaglianze di Sobolev logaritmiche per una forma quadratica definita su $\mathcal{H} \equiv \oplus_n \mathcal{H}_n$ da $Q = \sum_n Q_n$ dal fatto che ciascuna delle Q_n le soddisfa.

Nell'appendice utilizzeremo questa proprietà di additività per dedurre che la forma di Gauss-Dirichlet, definita da

$$\mathcal{E}(f, f) \equiv \int_{R^d} \|\nabla f(x)\|^2 d\mu_G(x)$$

dove $d\mu_G$ è una misura di probabilità Gaussiana, soddisfa *S.L.*.

Utilizzeremo il fatto che la forma $Q(f)$ definita sullo spazio $X = \{1\} \cup \{-1\}$ da $Q(f) = \frac{1}{4}(f(1) - f(-1))^2$, soddisfa *S.L.*.

Con lo stesso procedimento si può dimostrare che le *S.L.* sono verificate per la forma di Gauss-Dirichlet in R^∞ .

Quest'ultimo risultato è alla base dello studio delle proprietà del campo quantistico scalare libero (e di alcuni campi in interazione) fatto da Nelson.

♣

Discutiamo ora brevemente alcune proprietà spettrali e di ipercontrattività che sono conseguenza del fatto che il generatore del semigruppò è associato ad una forma di Dirichlet che soddisfa le *S.L.*.

Teorema 19.18 (Federbush, Gross, Faris)

Se la forma quadratica \mathcal{E} soddisfa le *S.L.* con costante K e V è una funzione su X a valori reali che soddisfa $\|e^{-V}\|_2 < \infty$ allora vale

$$\frac{1}{K} \mathcal{E}(f, f) + (f, Vf) \geq -\|f\|_2^2 \log \|e^{-V}\|_2 \quad \forall f \in L^2(X, \mu) \cap Q(\mathcal{E}). \quad 19.62$$

Reciprocamente, se $\|e^{-V}\|_2 < \infty$ implica che vale (19.62) per ogni $f \in L^2(X, \mu) \cap Q(\mathcal{E})$, allora \mathcal{E} soddisfa le *S.L.* con costante K .

◇

Dimostrazione

Per la prima parte dal teorema, consideriamo in dettaglio solo il caso in cui $\|e^{-V}\|_2 < \infty$ e V è limitata dall'alto; il caso generale segue poi per continuità. L'integrale $\int_X V(x)|f(x)|^2 d\mu(x)$ è ben definito. Utilizzando la disuguaglianza

$$st \leq s \log s - s + e^t, \quad s \geq 0, \quad t \in R,$$

e ponendo $s = |f(x)|^2$, $t = -2V(x)$, si ottiene

$$\begin{aligned} -(Vf, f) &\leq \frac{1}{2} \int_X [|f(x)|^2 \log |f(x)|^2 - |f(x)|^2] d\mu(x) + \frac{1}{2} \int_X e^{-2V(x)} d\mu(x) \\ &\leq \frac{1}{K} \mathcal{E}(f) + \|f\|_2^2 \log \|f\|_2 - \frac{1}{2} \|f\|_2^2 + \frac{1}{2} \|e^{-V}\|_2^2. \end{aligned}$$

Da questo deduciamo

$$\frac{1}{K} \mathcal{E}(f) + (Vf, f) \geq -\|f\|_2^2 \log \|f\|_2 + \frac{1}{2} (\|f\|_2^2 - \|e^{-V}\|_2^2). \quad 19.63$$

Poiché *S.L.* è omogenea (invariante per $f \rightarrow \lambda f$) basta verificare la disuguaglianza per $\|f\|_2 = \|e^{-V}\|_2$.

Ma in questo caso (19.63) coincide con (19.62).

Dimostriamo ora la seconda parte.

Consideriamo una generica funzione $f \in Q(\mathcal{E}) \cap L^2(X, \mu)$ e poniamo $V(x) \equiv -\log |f(x)|$.

Allora $\|e^{-V}\|_2 = \|f\|_2 < \infty$.

Per ipotesi vale (19.63).

Abbiamo dunque

$$\frac{1}{K} \mathcal{E}(f, f) - \int_X |f(x)|^2 \log |f(x)| d\mu(x) \geq -\|f\|_2^2 \log \|f\|_2.$$

Quindi *L.S.* vale per la funzione f . Ma f era arbitraria, e quindi \mathcal{E} soddisfa *L.S.*

♡

Il teorema successivo afferma che, se \mathcal{E} soddisfa le *S.L.* e alcune condizioni supplementari, l'estremo inferiore dello spettro dell'operatore (di Friedrichs) associato è un autovalore semplice isolato.

Teorema 19.19 (Rothaus, Simon)

Se $\mu(X) = 1$ e $\mathcal{E}(f, F)$, f reale, soddisfa le *S.L.* con costante K , e se inoltre

i)

$$\mathcal{E}(\iota) = 0$$

ii)

$L^\infty(X, \mu) \cap Q(\mathcal{E})$ è un nocciolo per \mathcal{E}

allora, per g reale

$$g \perp \iota \Rightarrow \mathcal{E}(g) \geq K \|g\|_2^2 \quad 19.64$$

(abbiamo indicato con ι la funzione che vale uno su tutto X).

◇

Dimostrazione

Indichiamo con $\mathcal{E}(f, g)$ la forma bilineare ottenuta per polarizzazione da $\mathcal{E}(f, f)$.
 Da $\mathcal{E}(f, \iota) \leq \mathcal{E}(f, f)\mathcal{E}(\iota, \iota)$ segue $\mathcal{E}(f, \iota) = 0 \quad \forall f \in Q(\mathcal{E})$ e

$$\mathcal{E}(\iota + sg, \iota + sg) = s^2 \mathcal{E}(g, g), \quad \|\iota + sg\|_2^2 = 1 + s^2 \|g\|_2^2 \quad \forall g \in Q(\mathcal{E}).$$

Se $g \in L^\infty(X, \mu)$ ed s è abbastanza piccolo, si possono sviluppare $(1 + sg(x))^2 \log(1 + sg(x))^2$ e $(1 + s^2 \|g\|_2^2) \log(1 + s^2 \|g\|_2^2)$ in potenze di s .

Utilizzando questo sviluppi nella *S.L.* si ottiene

$$\begin{aligned} & \frac{K}{2} \left(\int_X (1 + sg(x))^2 \log(1 + sg(x))^2 d\mu(x) - (1 + s^2 \|g\|_2^2) \log(1 + s^2 \|g\|_2^2) \right) = \\ & = \frac{K}{2} \int_X (2sg(x) + 3s^2 g^2(x)) d\mu(x) - s^2 \|g\|_2^2 + O(s^3) \leq s^2 \mathcal{E}(g, g). \end{aligned}$$

Per ipotesi $\int_X g(x) d\mu(x) = 0$ e quindi

$$K s^2 \|g\|_2^2 + O(s^3) \leq s^2 \mathcal{E}(g, g).$$

Dividendo per s^2 e passando al limite $s \rightarrow 0$ otteniamo (19.64) per tutte le funzioni $g \in L^\infty(X, \mu)$ tali che $(g, \iota) = 0$.

Sia ora $f \in Q(\mathcal{E})$, $(f, \iota) = 0$. Per l'ipotesi ii) del teorema, esiste una successione $\{f_n\}_1^\infty$, $f_n \in Q(\mathcal{E}) \cap L^\infty(X, \mu)$ tale che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\|_2 = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{E}(f_n - f, f_n - f) = 0.$$

Poiché $\lim_{n \rightarrow \infty} (f_n - f, \iota) = 0$ possiamo sostituire f_n con $f_n - (f_n, \iota) \iota$ e supporre che $(f_n, \iota) = 0$ per ogni n .

Per passaggio al limite otterremo dunque (19.64) per tutte le funzioni $f \in Q(\mathcal{E})$ tali che $(\iota, f) = 0$.

♡

19.1.3 RELAZIONE TRA IPERCONTRATTIVITÀ E DISEGUALIANZE DI SOBOLEV LOGARITMICHE

Studiamo infine la relazione tra le disequaglianze di Sobolev logaritmiche e la proprietà di ipercontrattività del semigruppato generato dall'operatore (di Friedrichs) associato alla forma quadratica.

Utilizzeremo la seguente notazione: per $p > 1$, $f_p(x) \equiv \text{sign}(f(x))|f(x)|^{p-1}$ (con la convenzione $\text{sign}(0) = 0$).

Definizione 19.11

Sia μ una misura di probabilità su X e sia $p \in (1, \infty)$.

Un operatore H su $L^p(X, \mu)$ è detto essere un *generatore di Sobolev di indice p* se è il generatore di un semigruppato continuo di contrazione in $L^p(X, \mu)$ ed esistono delle costanti $C > 1$ e $\gamma \in \mathbb{R}$ tali che la disequaglianza

$$\int_X |f(x)|^p \log |f(x)| d\mu(x) - \|f\|_p^p \log \|f\|_p \leq K \Re((H + \gamma)f, f_p), \quad f \in D(H), \tag{19.65}$$

è soddisfatta.

La costante K è detta *simbolo principale* dell'operatore H e γ è detta *norma locale* di H .



Nota 19.18

Se $p = 2$ e $f \geq 0$ la (19.65) è identica alla disuguaglianza di Sobolev logaritmica.



Definizione 19.12

Diciamo che l'operatore H è un *generatore di Sobolev* nell'intervallo (a, b) , $0 \leq a < b \leq \infty$, se esistono in questo intervallo due funzioni $K(s)$, $\gamma(s)$ e una famiglia di semigruppato e^{-tH_s} su $L^s(X, \mu)$ fortemente continui in t tali che

$$e^{-tH_s}|_{L^r(X, \mu)} = e^{-tH_r}, \quad a < s < r < b,$$

e il generatore del semigruppato e^{-tH_s} ha coefficiente principale $K(s)$ e norma locale $\gamma(s)$.



Nota 19.19

Facendo uso della disuguaglianza di Jensen e della (19.65) si vede che

$$\|(H + \gamma + \lambda)f\|_p \geq \lambda \|f\|_p \tag{19.66}$$

e pertanto, per il teorema di Hille-Yosida,

$$\|e^{-t(H+\gamma)}\|_{p \rightarrow p} \leq 1. \tag{19.67}$$

In particolare se $\gamma(p) = 0$ il semigruppò e^{-tH} è di contrazione in $L^p(X, \mu)$. ◇

Teorema 19.20

Se H è un generatore di Sobolev in (a, b) allora il semigruppò associato a H è ipercontrattivo. ◇

Dimostrazione

Daremo la dimostrazione solo nel caso che l'operatore H sia dato da

$$(Hf, f) \equiv \int_{R^d} \|\nabla f(x)\|^2 d\mu(x), \quad 19.73$$

dove μ è una misura su R^d assolutamente continua rispetto a Lebesgue con derivata di Radon-Nikodym di classe C^∞ .

Il teorema vale più in generale, sotto la sola condizione che H sia un operatore autoaggiunto su $L^2(X, d\mu)$ tale che e^{-tH} preservi la positività e sia una contrazione in $L^\infty(X, \mu)$ (vedere ad esempio [S84, pg. 196])

Possiamo limitarci a considerare il caso di f reale positiva e di classe C^∞ .

Dal teorema di derivazione per le funzione composte otteniamo

$$\|\nabla f^{\frac{p}{2}}(x)\|^2 = \frac{p^2}{4} f^{p-2}(x) \|\nabla f(x)\|^2$$

e anche

$$\nabla f(x) \cdot \nabla f^{p-1}(x) = (p-1) f^{p-2}(x) \|\nabla f(x)\|^2$$

Ne segue

$$\frac{p^2}{4(p-1)} \nabla f(x) \cdot \nabla f^{p-1}(x) = \|\nabla f(x)^{\frac{p}{2}}\|^2$$

e pertanto, se H soddisfa

$$\int_X f^2(x) \log f(x) d\mu(x) \leq K(Hf, f) + \|f\|_2^2 \log \|f\|_2$$

sostituendo f con $f^{\frac{p}{2}}$ si ottiene

$$\int_X f^p(x) \log f(x) d\mu(x) \leq \frac{Kp}{2(p-1)} (Hf, f_p) + \|f\|_p^p \log \|f\|_p.$$

La dimostrazione nel caso f positiva e nel dominio di H si ottiene con un procedimento di approssimazione. ♡

Una relazione tra generatori di Sobolev e proprietà di ipercontrattività è data dal seguente Teorema che qui non dimostriamo.

Teorema 19.21 (Gross)

Sia H un generatore di Sobolev in (a, b) con coefficiente principale $K(s)$ e norma locale $\gamma(s)$. Per $q \in (a, b)$ denotiamo con $p(t, q)$ la soluzione di

$$K(p) \frac{dp}{dt} = p, \quad p(0) = q, \quad t \geq 0,$$

e poniamo

$$M(t, q) \equiv \int_0^t \gamma(p(s, q)) ds$$

($\gamma(t, q)$ e $M(t, q)$ sono definiti fino a che $p(t, q) < b$). Allora si ha

$$\|e^{-tH}\|_{q \rightarrow p(t, q)} \leq e^{M(t, q)} \tag{19.68}$$

◇

Nota 19.20

Se la norma locale è zero, il semigruppato generato da H contrae da $L^q(X, \mu)$ a $L^{p(t, q)}(X, \mu)$.

♣

Come esempio di applicazione del Teorema 19.21 dimostriamo il seguente risultato di ipercontrattività, dovuto a E.Nelson, per la forma di Gauss-Dirichlet in R^d .

Il risultato, con dimostrazione analoga, si estende al caso di R^∞ ed è alla base dello studio fatto da Nelson del campo libero relativistico di massa m .

Esso è anche alla base dei risultati rigorosi che si hanno per interazioni polinomiali in teoria dei campi quantizzati in dimensione spazio-temporale due.

Se μ_G è una misura Gaussiana in R^d con media zero e covarianza uno, denotiamo con N l'operatore di Gauss-Dirichlet definito dalla forma quadratica

$$(Nf, f) \equiv \int_{R^d} \|\nabla f(x)\|^2 d\mu_G(x) \tag{19.70}$$

(l'operatore N è l'operatore numero di particelle nella rappresentazione di Fock). Un'integrazione per parti provvede

$$(Nf, f) \equiv \sum_{j=1}^d \int_{R^d} \left[-\frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_j}(x) + x_j \frac{\partial f}{\partial x_j}(x) \right] f(x) d\mu_G(x), \quad f \in D(N). \tag{19.71}$$

Si ha allora

Teorema 19.22 (Nelson)

Se

$$1 \leq q, p < \infty, \quad e^{-2t} \leq \frac{q-1}{p-1}$$

allora

$$\|e^{-tN}\|_{q \rightarrow p} = 1. \quad 19.72$$

◇

Dimostrazione

Utilizziamo il fatto che L soddisfa una disuguaglianza di Sobolev logaritmica; per una dimostrazione vedere l'appendice B.

Sostituendo $f \geq 0$ con $f^{\frac{p}{2}}$ nella (19.B3) si ottiene

$$\int_{R^d} f(x)^p \log f(x) d\mu_G(x) \leq \frac{p}{2(p-1)} (Nf, f^{p-1}) + \|f\|_p^p \log \|f\|_p.$$

Dunque per la funzione f considerata la norma locale è zero e il coefficiente principale è $K(p) = \frac{p}{2(p-1)}$.

Il semigruppoo e^{-tN} preserva la positività ed è una contrazione in $L^p(R^d, \mu_G)$ per ogni $p \in [1, \infty)$.

Possiamo quindi utilizzare il Teorema 19.21; la soluzione di

$$\frac{dp}{dt} = 2(p-1), \quad p(0) = q, \quad t \geq 0,$$

è

$$p(t, q) = 1 + (q-1)e^{2t}, \quad q \geq 2, \quad t \geq 0.$$

Inoltre $\gamma = 0$, $e^{-tN}\iota = \iota$ per ogni $t \geq 0$ e la funzione ι appartiene ad ogni $L^p(R^d, \mu_G)$ e $N\iota = 0$.

Si deduce allora

$$\|e^{-tN}\|_{q \rightarrow p(q,t)} \leq 1, \quad q \geq 2.$$

Poiché $e^{-tN}\iota = \iota$, vale l'eguaglianza

$$\|e^{-tN}\|_{q \rightarrow p(q,t)} = 1, \quad q \geq 2.$$

♡

Nota 19.21

Utilizzando la dualità tra $L^p(R^d, \mu_G)$ e $L^q(R^d, \mu_G)$, $q \equiv \frac{p}{p-1}$ si può dimostrare che le conclusioni del teorema precedente valgono per ogni $1 < q < p < \infty$.

♣

Il teorema di Nelson, che provvede l'ipercontrattività del semigruppoo di Ornstein-Uhlenbeck, dà in un certo senso un risultato massimale.

Lemma 19.23

Sia N la Hamiltoniana dell'oscillatore armonico in $d = 1$.

Se $p > 1 + e^{2t}(q-1)$ l'operatore e^{-tN} non è limitato da $L^q(R, \mu_G)$ a $L^p(R, \mu_G)$, $t \geq 0$.

◇

Dimostrazione

Il nucleo del semigruppò e^{-tN} è dato esplicitamente da

$$(e^{-tN} f)(x) = \int_R f(e^{-t}x + \sqrt{1 - e^{-2t}}y) \frac{e^{-\frac{y^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dy. \quad 19.74$$

Consideriamo la funzione $f_\lambda(x) \equiv e^{\lambda x}$, $\lambda \in R$, che appartiene al dominio di N . Si ha

$$(e^{-tN} f_\lambda)(x) = e^{\frac{\lambda^2}{2}(1 - e^{-2t})} f_\lambda(e^{-t}x).$$

Per calcolo esplicito ne segue

$$\|e^{-tN} f_\lambda\|_p = e^{\frac{\lambda^2}{2}[e^{-2t}(p-1)+1-q]} \|f_\lambda\|_q.$$

Questa quantità non è limitata come funzione di $\lambda \in R$ se $p-1 > e^{2t}(q-1)$. ♡

Concludiamo questo capitolo con la seguente Proposizione.

Proposizione 19.24

Sia T_t un semigruppò di ipercontrazione su $L^2(X, \mu)$ tale che $T_t : L^\infty(X, \mu) \rightarrow L^\infty(X, \mu)$.

Allora per ogni $1 < q < p < \infty$ esiste una costante reale positiva $C_{q,p}$ e un tempo $t_{q,p} > 0$ tali che

$$\|T_t u\|_p \leq C_{q,p} \|u\|_q, \quad t \geq t_{q,p}, \quad \forall u \in L^q(X, \mu). \quad 19.75$$

◇

Dimostrazione

Poiché $T_{t_0} : L^2(X, \mu) \rightarrow L^{p_0}(X, \mu)$, $p_0 > 2$, e $T_{t_0} : L^\infty(X, \mu) \rightarrow L^\infty(X, \mu)$, per il teorema di interpolazione di Riesz-Thorin esiste una costante C tale che

$$\|T_{t_0} u\|_r \leq C \|u\|_{\frac{2r}{p_0}}, \quad \forall r \geq p_0. \quad 19.76$$

Scegliendo n tale che $2(\frac{p_0}{2})^n > p$ si ottiene

$$\|T_{nt_0} u\|_p \leq \|T_{nt_0} u\|_{2(\frac{p_0}{2})^n} \leq C^n \|u\|_2.$$

Se $q \geq 2$ la tesi segue da $\|u\|_2 \leq \|u\|_q$.

Supponiamo ora $1 < q < 2$ e scegliamo n tale che $2(\frac{p_0}{2})^n > p > q > q_0$, dove

$$q_0^{-1} + \left(2\left(\frac{p_0}{2}\right)^n\right)^{-1} = 1.$$

Poiché T_{nt_0} è un'applicazione limitata da $L^2(X, \mu)$ a $L^{2(\frac{p_0}{2})^n}(X, \mu)$, per dualità $T_{nt_0}^*$ è limitata da $L^{q_0}(X, \mu)$ a $L^2(X, \mu)$.

Se (come abbiamo assunto) T_t coincide con il suo aggiunto, risulta che anche T_{nt_0} è limitato da $L^{q_0}(X, \mu)$ a $L^2(X, \mu)$ e dunque T_{2nt_0} è limitato da $L^{q_0}(X, \mu)$ a $L^{2(\frac{p_0}{2})^n}(X, \mu)$.

Da $q_0 < q < p < 2(\frac{p_0}{2})^n$ segue poi che T_{2nt_0} è limitato da $L^q(X, \mu)$ a $L^p(X, \mu)$.

♡ Una stima più accurata [GL68] porta a dimostrare che il semigruppone dell'oscillatore armonico è strettamente ipercontrattivo da L^2 ad L^p per ogni $p \geq 2$

APPENDICE 19A: IL SEMIGRUPPO DELL'OSCILLATORE ARMONICO È
 IPERCONTRATTIVO.

In questa appendice daremo una dimostrazione alternativa del fatto che il semigruppone dell'oscillatore armonico è ipercontrattivo.

Ricordiamo che nello spazio di Hilbert $L^2(R, \mu_G)$, con $d\mu_G \equiv \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} dx$, l'operatore oscillatore armonico ha la forma

$$H_0 \equiv -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx}$$

L'operatore H_0 è essenzialmente autoaggiunto sulle combinazioni lineari finite di polinomi di Hermite P_n e si ha $H_0 P_n = n P_n$.

Utilizzando questo si può vedere che $T_t \equiv e^{-tH_0}$ è un semigruppone di contrazione su ogni $L^p(R, \mu_G)$. Notare che e^{-tH_0} preserva la positività, contrae da $L^\infty(R, \mu_G)$ a $L^\infty(R, \mu_G)$ e contrae anche da $L^1(R, \mu_G)$ a $L^1(R, \mu_G)$ (poiché $e^{-tH_0} \iota = \iota$).

Per interpolazione esso contrae in ogni $L^p(R, \mu_G)$, $1 \leq p \leq \infty$.

Dimostriamo che esiste $t_0 > 0$ tale che

$$\|e^{-tH_0} u\|_4 \leq C \|u\|_2, \quad t \geq t_0. \tag{19A.1}$$

Posto

$$x = \left(\frac{a + a^*}{\sqrt{2}} \right), \quad [a, a^*] = 1,$$

si ha

$$P_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^*)^n P_0 = \frac{1}{\sqrt{n!}} 2^{\frac{n}{2}} : \left(\frac{a + a^*}{\sqrt{2}} \right)^n : P_0$$

dove $(\dots) :$ è l'ordinamento di Wick di un polinomio negli operatori a, a^* ottenuto ponendo gli operatori a a destra degli operatori a^* .

Ne segue

$$\|x^n P_n(x)\|_{L^2(R)} \leq 2^n \left(\frac{(2n)!}{(n!)^2} \right)^{\frac{1}{2}} \leq 4^n.$$

D'altra parte è facile verificare che

$$\|x^n\|_4 = \|x^n P_n(x)\|_{L^2(R)}^{\frac{1}{2}}. \quad 19A.2$$

Ponendo

$$\phi(x) = \sum_n a_n x^n \in L^2(R, \mu_G) \cap \mathcal{S}(R),$$

si ha allora

$$\begin{aligned} \|e^{-tH_0}\phi\|_4 &\leq \sum_n e^{-tn} |a_n| \|x^n P_n(x)\|_{L^2(R)}^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \left(\sum_n |a_n|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_n e^{-2tn} 4^n \right)^{\frac{1}{2}} \leq C \|\phi\|_2 \end{aligned}$$

per $t > \log 2$.

♡

APPENDICE 19B: ESEMPI.

Diamo in questa appendice alcuni semplici esempi di forme quadratiche che soddisfano la disuguaglianza di Sobolev logaritmica,

Esempio 1

Sia

$$X \equiv \{1, -1\} \quad \mu(\{1\}) = \mu(\{-1\}) = \frac{1}{2}.$$

Se $f : X \rightarrow R$ definiamo

$$\nabla f \equiv \frac{1}{2} [f(1) - f(-1)].$$

Definiamo la forma quadratica

$$Q(f) \equiv \int_X |\nabla f|^2(x) d\mu(x) = \frac{1}{4} (f(1) - f(-1))^2. \quad 19B.1$$

Lemma 19B.1

Q soddisfa una disuguaglianza di Sobolev logaritmica con coefficiente principale uno e norma locale zero.

◇

Dimostrazione

Poiché $Q(|f|) \leq Q(f)$ è sufficiente considerare il caso $f > 0$. Ogni funzione f su X è della forma

$$f(x) = a + bx$$

La condizione $f \geq 0$ si traduce in $a > 0$, $|b| < 1$.

Data l'omogeneità delle $S.L.$ è sufficiente considerare il caso $a = 1$ e per simmetria è sufficiente considerare il caso $0 \leq b \leq 1$.

Poniamo quindi $f_s(x) = 1 + sx$, $0 \leq s \leq 1$.

Si ha $\|f_s\|^2 = 1 + s^2$.

Definiamo la funzione (entropia)

$$H(s) = \int f_s^2 \log f_s \, d\mu - \int \|f_s\|_2^2 \log \|f_s\|_2 \, d\mu.$$

Esplicitando i calcoli

$$H(s) = \frac{1}{2} [(1+s)^2 \log(1+s) + (1-s)^2 \log(1-s)] - \frac{1}{2} (1+s^2) \log(1+s^2). \quad 19B.2$$

Dalla definizione di Q segue $Q(f_s) = s^2$. Pertanto per verificare $S.L.$ è sufficiente dimostrare

$$H(s) \leq s^2, \quad 0 \leq s \leq 1.$$

Poiché $H(0) = 0$ è sufficiente dimostrare che $H'(s) \leq 2s$ e poiché $H'(0) = 0$ basta dimostrare $H''(s) \leq 2$.

Si calcola facilmente

$$H''(s) = 2 + \log \frac{1-s^2}{1+s^2} - \frac{2s^2}{1+s^2}$$

e la disuguaglianza è soddisfatta perché per $0 \leq s \leq 1$ il secondo e terzo termine sono negativi o nulli.

♡

Esempio 2 (forma quadratica di Gauss-Dirichlet)

La misura di Gauss con covarianza uno su R^d è

$$d\mu_G(x) = (2\pi)^{-\frac{d}{2}} e^{-\frac{\|x\|^2}{2}} dx, \quad x \in R^d.$$

La forma quadratica di Gauss-Dirichlet è

$$\mathcal{E}(f, f) \equiv \int_{R^d} \|\nabla f(x)\|^2 d\mu_G(x),$$

dove il gradiente è inteso in senso distribuzionale. Dobbiamo dimostrare che se $f \in Q(\mathcal{E}) \cap L^2(R^d, \mu_G)$ vale

$$\int_{R^d} |f(x)|^2 \log |f(x)| \, d\mu(x) - \|f\|_2^2 \log \|f\|_2 \leq \int_{R^d} \|\nabla f(x)\|^2 d\mu(x). \quad 19B.3$$

Per il teorema di additività è sufficiente dare la dimostrazione per $d = 1$.

Utilizziamo ancora il teorema di additività facendo l'identificazione, come spazio di misura, di R dotato delle misura di Gauss con il prodotto diretto numerabile dello spazio di misura utilizzato nell'esempio 1.

Questo procedimento è della stessa natura di quello che abbiamo utilizzato nel Cap.14 per dare una rappresentazione del processo di Orstein-Uhlenbeck come misura sullo spazio delle traiettorie continue.

Poniamo quindi

$$\Omega_K \equiv \prod_{j=1}^K X_j, \quad \mu_K \equiv \prod_{j=1}^K \mu_j$$

dove (X_j, μ_j) sono copie identiche di (X, μ) . Per il teorema di additività abbiamo

$$\int_{\Omega_K} f(x)^2 \log |f(x)| d\mu_K(x) \leq \mathcal{E}_K(f, f) + \|f\|_2 \log \|f\|_2. \quad 19B.4$$

Abbiamo posto

$$\mathcal{E}_K(f, f) = \sum_{j=1}^K \int_{\Omega_K} (\delta_j f(x))^2 d\mu_K(x),$$

$$(\delta_j f)(x) = \frac{1}{2} [f(x_1, x_2, x_{j-1}, 1, x_{j+1}, \dots, x_K) - f(x_1, x_2, x_{j-1}, -1, x_{j+1}, \dots, x_K)]. \quad 19B.5$$

Poniamo $y = \frac{1}{\sqrt{K}}(x_1 + \dots + x_K)$ e valutiamo (19B.5) su una funzione f della forma $f(x_1, \dots, x_k) = \phi(y)$ con $\phi \in C_0^\infty(R)$.

Il teorema del limite centrale (vedere Appendice A al capitolo 14) applicato alla somma di variabili Gaussiane di media zero e covarianza uno assicura che il termine a sinistra nella disuguaglianza converge, per $K \rightarrow \infty$ a

$$\int_R |\phi(t)|^2 \log |\phi(t)| d\nu(t),$$

dove abbiamo posto $d\nu(t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}} dt$.

per lo stesso motivo il secondo termine a destra converge a

$$\|\phi\|_2^2 \log \|\phi\|_2, \quad \|\phi\|_2^2 \equiv \int_R |\phi(t)|^2 d\nu(t).$$

Rimane da dimostrare che $\mathcal{E}_K(f, f)$ verifica

$$\lim_{K \rightarrow \infty} \mathcal{E}_K(f, f) = \int_R |\phi'(t)|^2 d\nu(t). \quad 19B.6$$

Poiché $\phi \in C_0^\infty(R)$, per il teorema di Dini esiste una funzione $g(t, x, h)$ limitata in $R \times \{1, -1\} \times (0, 2)$ tale che

$$\frac{1}{2} [\phi(t - hx + h) - \phi(t - hx - h)] - \phi'(t)h = h^2 g(t, x, h).$$

Si ha

$$(\delta_j f)(x) = \frac{1}{2}[\phi(y - hx_j + h) - \phi(y - hx_j - h)] = \phi'(y)h + h^2 g((y, x_j, h))$$

e pertanto

$$\sum_{j=1}^K |(\delta_j f)(x)|^2 = |\phi'(y)|^2 + \psi_K(x, h).$$

dove il termine ψ_K è la somma di K addendi ciascuno dei quali è di ordine di grandezza h^3 o h^4 . Ponendo $h = \frac{1}{\sqrt{K}}$ si ha

$$\mathcal{E}_K(f, f) = \int_X |\phi'(y)| d\mu(y) + \int_X \psi(x, h) d\mu(x) \quad 19B.7$$

con $\psi(x, h) < Ch$ per un'opportuna costante C .

Utilizzando ancora una volta il teorema del limite centrale otteniamo

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{E}_K(f, f) = \int_R |\phi'(t)|^2 d\nu(t).$$

Questo dimostra (19B.2) per $f \in C_0^\infty(R)$.

Per estendere la dimostrazione a tutto $Q(\mathcal{E}) \cap L^2(R, \nu)$ si fa uso di un procedimento di limite.

Se $f \in L^2(R, \nu)$ e la sua derivata distribuzionale soddisfa $f' \in L^2(R, \nu)$ allora esiste una successione di funzioni f_n di classe $C_0^\infty(R)$ che converge a f nella norma $\|f\|_{L^2(R, \nu)} + \|f'\|_{L^2(R, \nu)}$.

La funzione $t^2 \log t$ è limitata dal basso per $t \geq 0$, quindi si può applicare il lemma di Fatou (eventualmente passando ad una sottosuccessione che converge quasi ovunque).

La disuguaglianza di Sobolev logaritmica risulta così dimostrata per ogni $f \in Q(\mathcal{E}) \cap L^2(R, \nu)$.

♡

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [AHK77] S.Albeverio, R.Hoegh-Krohn *Comm. Math. Physics* 56 (1977) 173-187
- [Ci97] F.Cipriani *Journal of Functional Analysis* 147 (1997) 259-300
- [CL93] E.Carlen, E.Lieb *Comm.Math. Physics* 155 (1993) 27-46
- [F80] M.Fukushima, *Dirichlet forms and Markov Processes* North-Holland 1980.
- [GL93] S.Goldstein, J.Lindsay *C.R. Acad. Sci. Paris Ser I*, 317 (1993) 1053-1057

-
- [GL68] J.Glimm, *Comm. Math. Phys.* 3, (1968) 12-25
- [Gr75] L.Gross, *Am. J. Mathematics* 97, (1975) 1061-1083
- [Gr72] L.Gross, *Journ. Funct. Analysis* 10, (1972) 52-109
- [Gr75] L.Gross *Duke Math. Journal* 42 (1975) 383-396
- [Sa96] J-L Sauvageot *Journal Operator Theory* 42 (1999) 83-102
- [St84] D.W.Stroock, *An introduction to the Theory of Large Deviations*, Springer 1984

