Dispense 3MQ

Gennaio 2025

Le dimostrazioni segnate con \* non sono state svolte a lezione e alle volte richiederanno teoremi e metodi non visti, a meno che non sia specificato diversamente è possibile trovare tutto in [1].  $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$   $C_c^{\infty}(\mathbb{R}^n)$   $S(\mathbb{R}^n)$ 

# Indice

1	Mec	canica Quantistica
	1.1	Crisi della Fisica Classica
		1.1.1 Problema degli spettri atomici
		1.1.2 Problema della stabilità atomica
		1.1.3 Scoperte fondamentali
	1.2	Il Modello Atomico di Bohr
		1.2.1 Ipotesi del modello di Bohr
		1.2.2 Fonti di ispirazione
		1.2.3 Derivazione dei livelli energetici
	1.3	Relazione di dispersione per una Meccanica Ondulatoria
		1.3.1 Equazione di Klein-Gordon
		1.3.2 Equazione di Schrödinger
	1.4	L'Equazione di Schrödinger Libera
		1.4.1 Soluzione generale
	1.5	Teoria dell'Onda di Materia
		1.5.1 Interpretazione fisica
		1.5.2 Vantaggi della teoria
		1.5.3 Criticità della teoria
	1.6	Introduzione
2	Moi	200

## Capitolo 1

## Meccanica Quantistica

#### 1.1 Crisi della Fisica Classica

All'inizio del XX secolo, la fisica classica, basata principalmente sulle leggi di Newton per la meccanica e sulle equazioni di Maxwell per l'elettromagnetismo, sembrava una teoria completa e consolidata per descrivere i fenomeni naturali. Tuttavia, nuove osservazioni sperimentali misero in evidenza limiti insormontabili della fisica classica, portando a una profonda crisi concettuale.

#### 1.1.1 Problema degli spettri atomici

Gli spettri di emissione e di assorbimento della luce da parte degli atomi mostravano un comportamento discreto e non continuo, in netto contrasto con le previsioni della teoria elettromagnetica classica. Ogni elemento chimico presentava un insieme caratteristico di righe spettrali, il che suggeriva che gli atomi possedessero livelli energetici ben definiti. L'incapacità di spiegare la quantizzazione degli spettri rappresentava una sfida cruciale per i fisici dell'epoca.

#### 1.1.2 Problema della stabilità atomica

Secondo il modello atomico classico, un elettrone in orbita attorno al nucleo dovrebbe continuamente irradiare energia sotto forma di onde elettromagnetiche a causa della sua accelerazione centripeta. Questo porterebbe l'elettrone a spiraleggiare verso il nucleo in tempi brevissimi, distruggendo l'atomo. Tuttavia, gli atomi si dimostravano stabili e non collassavano, evidenziando l'inadeguatezza del modello classico.

### 1.1.3 Scoperte fondamentali

Nel contesto di questa crisi emergono scoperte fondamentali:

- L'elettrone: Nel 1897, J.J. Thomson scoprì l'elettrone mediante esperimenti con raggi catodici. Propose un modello atomico in cui gli elettroni erano immersi in una sfera di carica positiva, noto come modello a panettone.
- Esperimento di Rutherford: Nel 1911, Rutherford, attraverso il famoso esperimento della lamina d'oro, dimostrò che la carica positiva e la massa dell'atomo erano concentrate in un nucleo centrale molto piccolo, introducendo il modello planetario dell'atomo.

#### 1.2 Il Modello Atomico di Bohr

Nel 1913, Niels Bohr sviluppò un modello atomico che incorporava concetti quantistici per spiegare la stabilità degli atomi e la struttura discreta degli spettri di emissione.

### 1.2.1 Ipotesi del modello di Bohr

Bohr formulò tre ipotesi fondamentali:

- 1. Gli elettroni possono occupare solo determinate orbite stazionarie attorno al nucleo, senza emettere radiazione.
- 2. Le orbite stazionarie corrispondono a livelli discreti di energia.
- 3. La radiazione elettromagnetica viene emessa o assorbita quando un elettrone salta da un'orbita a un'altra, con un'energia pari alla differenza dei livelli energetici, secondo la relazione:

$$E = h\nu \tag{1.2.1}$$

dove h è la costante di Planck e  $\nu$  la frequenza della radiazione emessa.

#### 1.2.2 Fonti di ispirazione

Le idee di Bohr si basavano su due fondamentali risultati precedenti:

- Planck e la quantizzazione dell'energia (1900): Max Planck, studiando la radiazione del corpo nero, introdusse l'ipotesi che l'energia fosse emessa in quanti discreti.
- Einstein e l'effetto fotoelettrico (1905): Albert Einstein spiegò l'effetto fotoelettrico ipotizzando che la luce fosse composta da quanti di energia, detti fotoni.

#### 1.2.3 Derivazione dei livelli energetici

Nel modello di Bohr, il momento angolare dell'elettrone è quantizzato e dato da:

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
 (1.2.2)

Utilizzando questa quantizzazione e le leggi della dinamica classica, si ottengono i livelli energetici dell'atomo di idrogeno:

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \tag{1.2.3}$$

Le orbite consentite hanno raggi definiti, dati da:

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{ke^2 m_e} \tag{1.2.4}$$

## 1.3 Relazione di dispersione per una Meccanica Ondulatoria

Con l'introduzione del concetto di dualità onda-particella da parte di de Broglie nel 1924, divenne possibile associare un'onda a ogni particella materiale. La relazione di dispersione è fondamentale per descrivere il comportamento di queste onde.

#### 1.3.1 Equazione di Klein-Gordon

Per una particella relativistica libera, l'equazione di Klein-Gordon è:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 + m^2 c^4\right) \psi = 0 \tag{1.3.1}$$

Questa equazione descrive particelle relativistiche di spin nullo.

#### 1.3.2 Equazione di Schrödinger

Nel caso non relativistico, si ottiene l'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \tag{1.3.2}$$

Questa equazione rappresenta il punto di partenza per la meccanica quantistica.

## 1.4 L'Equazione di Schrödinger Libera

L'equazione di Schrödinger libera descrive l'evoluzione temporale di una particella quantistica non soggetta a potenziali esterni:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\tag{1.4.1}$$

#### 1.4.1 Soluzione generale

La soluzione generale per dati iniziali in  $L^2(\mathbb{R}^d)$  è una combinazione lineare di onde piane del tipo:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \int \tilde{\psi}(\mathbf{k})e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}d^{d}k$$
 (1.4.2)

## 1.5 Teoria dell'Onda di Materia

## 1.5.1 Interpretazione fisica

La teoria dell'onda di materia di de Broglie postula che a ogni particella sia associata un'onda con lunghezza d'onda  $\lambda = \frac{h}{p}$ . L'equazione di Schrödinger può essere vista come un'equazione di Hamilton derivata da un funzionale energia rispetto alla forma simplettica canonica.

## 1.5.2 Vantaggi della teoria

- Spiegazione delle righe spettrali dell'atomo di idrogeno.
- Predizione accurata della costante di Rydberg.

### 1.5.3 Criticità della teoria

Nonostante il successo nel caso dell'idrogeno, la teoria presenta criticità nel descrivere sistemi più complessi:

- Mancanza di compatibilità con la natura puntiforme delle interazioni particellarivelatore.
- Incapacità di spiegare le righe spettrali dell'elio.

#### Introduzione 1.6

Gli operatori autoaggiunti sono fondamentali nello studio dell'analisi funzionale e della meccanica quantistica, giocando un ruolo cruciale nella teoria spettrale degli operatori e nella formulazione matematica degli osservabili fisici. Questo documento fornisce una discussione dettagliata sugli operatori autoaggiunti limitati e illimitati, le loro definizioni, proprietà ed esempi.

**Definizione 1.6.1.** Un operatore T su uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  si dice *limitato* se esiste una costante C > 0 tale che

$$||Tx|| \le C||x||$$
 per ogni  $x \in \mathcal{H}$ .

La più piccola di queste costanti è chiamata norma di T, denotata con ||T||.

**Definizione 1.6.2.** Un operatore T su  $\mathcal{H}$  si dice *illimitato* se non è limitato. Tali operatori sono tipicamente definiti su un sottoinsieme denso  $\mathcal{D}(T) \subset \mathcal{H}$ , noto come dominio di T. L'operatore T è una mappa lineare  $T: \mathcal{D}(T) \to \mathcal{H}$ .

**Definizione 1.6.3.** È detto grafico di un operatore T in  $\mathcal{H}$  è il sottospazio di  $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \supseteq$  $\mathcal{G}(T) := \{(x, Tx) | x \in \mathcal{D}(T)\}$ . Diremo inolte che T è un operatore chiuso se il suo grafico è chiuso in  $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ .

È imporante notare che se  $\mathcal{H}$  è spazio di Hilber infinito dimensionale allora non è detto che  $\mathcal{G}(T)$  sia il grafico di qualche operatore lineare.

**Definizione 1.6.4.** Se A è un operatore in  $\mathcal{H}$  diremo che B è estensione di A se  $\mathcal{G}(A) \subseteq$  $\mathcal{G}(B)$  e scriveremo che  $A \subseteq B$ .

Esempio 1.6.5. Possiamo costruire una relazione d'ordine siano infatti  $T_1, T_2$  operatori in  $\mathcal{H}$  diremo che  $T_1 \leq T_2$  se  $\mathcal{D}(T_1) \subseteq \mathcal{D}(T_2)$  e per ogni  $\psi \in \mathcal{D}(T_1)$  vale  $T_1\psi = T_2\psi$ . Nell pratica considerando  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$  e  $T_1 = -i\frac{d}{dx}$  e  $T_2 = -i\frac{d}{dx}$  con  $\mathcal{D}(T_1) = C_c^{\infty}(\mathbb{R})$ 

e  $\mathcal{D}(T_2) = H^1(\mathbb{R})$  allora  $T_1 \leq T_2$ .

**Definizione 1.6.6.** Diremo che un operatore T è chiudibile se esiste un operatore B tale che  $T \subseteq B$  e B è chiuso. Allora la minima estensione chiusa di T detta chiusura  $\overline{T}$  è tale che  $\mathcal{G}(\overline{T}) = \mathcal{G}(T)$ .

**Proposizione 1.6.7.** Sia T operatore nello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ . I seguenti fatti sono equivalenti:

- 1. T è chiudibile.
- 2.  $\overline{\mathcal{G}(T)}$  è il grafico di un operatore lineare.
- 3.  $\overline{\mathcal{G}(T)}$  non contiene elementi del tipo (0, z) con  $z \neq 0$ .

Teorema 1.6.8. Tra le seguenti proprietà due implicano la terza:

- 1. T è chiuso.
- 2. T è limitato.
- 3.  $\mathcal{D}(T) = \mathcal{H}$  ossia T è ovunque definito.

Sia  $T \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$  un operatore limitato su  $\mathcal{H}$  per  $\psi \in \mathcal{H}$  fissato considero il funzionale lineare  $\phi \mapsto \langle \psi, T\phi \rangle$  per  $\phi \in \mathcal{H}$ . Per il teorema di rappresentazione di Riesz esiste un unico vettore  $T^*\psi \in \mathcal{H}$  tale che  $\langle \psi, T\phi \rangle = \langle T^*\psi, \phi \rangle$  per ogni  $\phi \in \mathcal{H}$ .

**Definizione 1.6.9.** Sia  $T \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$  un operatore limitato su  $\mathcal{H}$ . Definiamo *l'aggiunto* di T come l'operatore  $T^*$  tale che per ogni  $x, y \in \mathcal{H}$  vale  $\langle x, Ty \rangle = \langle T^*x, y \rangle$ .

Possiamo generalizzare la definizione di aggiunto per operatori illimitati. Sia T un operatore illimitato su  $\mathcal{H}$  definito su un dominio denso  $\mathcal{D}(T) \subseteq \mathcal{H}$ . Fisso  $psi \in \mathcal{H}$  considero il funzionale lineare non limitato  $f_{\psi}: \mathcal{D}(T) \to \mathbb{C}$  definito da  $f_{\psi}(\phi) = \langle \psi, T\phi \rangle$ . Posso però considerare  $\{\psi \in \mathcal{H} | f_{\psi} \text{ è limitato}\} = \{\psi \in \mathcal{H} | \sup_{\phi \in \mathcal{D}(T)} \frac{|\langle \psi, T\phi \rangle|}{||\phi||} < \infty\} = \mathcal{D}(T^*)$ . Posso quindi utilizzare il teorema di rappresentazione di Riesz su  $\mathcal{D}(T^*)$  per definire l'aggiunto di T.

**Definizione 1.6.10.** Sia T un operatore illimitato su  $\mathcal{H}$  con dominio denso  $\mathcal{D}(T)$ . Definiamo *l'aggiunto* di T come l'operatore  $T^*$  tale che per ogni  $\psi \in \mathcal{D}(T^*)$  e  $\phi \in \mathcal{D}(T)$  vale  $\langle \psi, T\phi \rangle = \langle T^*\psi, \phi \rangle$ .

Ora dalla definizione non sempre avremo che  $\mathcal{D}(T^*)$  è denso in  $\mathcal{H}$  per cui non avrà sempre senso parlare di  $(T^*)^*$ . Ma vale il seguente teorema:

**Teorema 1.6.11.** Sia T un operatore densamente definito su  $\mathcal{H}$  allora:

- 1.  $T^*$  è chiuso.
- 2. T è chiudibile se e solo se  $T^*$  è densamente definito. In tal caso  $\overline{T} = T^{**}$ .
- 3. Se T è chiudibile allora  $(\overline{T})^* = T^*$ .

**Definizione 1.6.12.** Diremo che un operatore T è autoaggiunto nel senso di Von Neumann se  $T = T^*$  e  $\mathcal{D}(T) = \mathcal{D}(T^*)$ .

Osservazione 1.6.13. L'aggiunzione ribalta le inclusioni: se  $T \subseteq S$ , allora  $S^* \subseteq T^*$ . Sia ad esempio  $T_i = -i\frac{d}{dx}$  e  $\mathcal{D}(T) = C_c^{\infty}(\mathbb{R}) \subseteq \mathcal{D}(T_2) = C_c^1(\mathbb{R}) \subseteq \ldots$ , allora  $\cdots \subseteq \mathcal{D}(T_2^*) \subseteq \mathcal{D}(T_1^*)$ , puó esistere quindi un "dominio di equilibrio" tale che  $\mathcal{D}(T_{opt}) = \mathcal{D}(T_{opt}^*)$ , in questo esempio  $\mathcal{D}(T_{opt}) = H^1(\mathbb{R})$ .

## Capitolo 2

## Monaco

Chiameremo  $\mathfrak{B}_{\infty}(\mathcal{H})$  l'insieme degli operatori compatti su  $\mathcal{H}$ .

**Definizione 2.0.1.** Sia  $\mathcal{H}$  con la norma indotta  $\|\|$  dal prodotto scalare, diremo che  $A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$  è un operatore di Hilber-Schmidt se esiste una base hilbertiana  $\{u_k\}$  tale che  $\sum \|Au_k\| < \infty$ .

Indicheremo la classe di operatori di Hilber-Schmidt su  $\mathcal{H}$  come  $\mathfrak{B}_2(\mathcal{H})$ , è possibile inoltre dimostrare che

**Definizione 2.0.2.** Una mappa lineare  $\Phi: \mathfrak{B}(\mathcal{H}) \to \mathbb{C}$  è detta una famiglia di valori attesi se valgono le seguenti:

- $\Phi(1) = 1$ .
- $\Phi(A)$  è reale quando A è autoaggiunto.
- $\Phi(A)$  è positivo quando A è autoaggiunto e positivo.
- Per ogni successione  $A_n \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$  se  $||A_n\psi A\psi|| \to 0$  per tutti  $\psi \in \mathcal{H}$  allora  $\Phi(A_n) \to \Phi(A)$ .

**Definizione 2.0.3.** Un operatore  $\rho \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$  è una matrice densità se  $\rho$  è autoaggiunto, non negativo e vale Tr  $\rho = 1$ .

**Definizione 2.0.4.** Siano  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$  spazi di Hilber definiremo il *prodotto tensore tra due spazi di Hilbert*  $\mathcal{H}_1 \, \hat{\otimes} \, \mathcal{H}_2$  come il completamento di  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  rispetto al prodotto:  $(u_1 \otimes v_1, u_2 \otimes v_2) = (u_1, u_2)_1(v_1, v_2)_2$ .

**Proposizione 2.0.5.** L'applicazione  $L^2(X_1, \mu_1) \hat{\otimes} L^2(X_2, \mu_2) \rightarrow L^2(X_1 \times X_2, \mu_1 \times \mu_2)$  è un isomorfismo.

Per la dimostrazione di veda [2].

Se ho n sistemi quantistici composti descritti da  $\mathcal{H}_1, \ldots, \mathcal{H}_n$  allora il sistema composto è descritto dallo spazio di hilber  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \ldots \hat{\otimes} \mathcal{H}_n$ . Per cui un sistema quantistico di n particelle puó essere descritto da  $L^2(\mathbb{R}^{nd}) = L^2(\mathbb{R}^n) \hat{\otimes} \ldots \hat{\otimes} L^2(\mathbb{R}^n)$ . Ora vogliamo generalizzare gli operatori a questi spazi tensore, siano  $A_i^* = A_i \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_1)$  definiremo l'osservabile del sistema composto come  $A(\psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_n) = A_1 \psi_1 \otimes \cdots \otimes A_n \psi_n$ . In particolare:

1. Se 
$$A_i^* = A_i \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_i)$$
 definisco  $\mathfrak{B}(\mathcal{H}) \ni A^{(i)} := \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1} \otimes A_i \otimes \mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}$ .

2. Se  $I = \{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}$  e  $A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_{i_1} \hat{\otimes} \dots \hat{\otimes} \mathcal{H}_{i_k})$  allora  $A^{(I)} \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$  agisce sui sottosistemi associati.

**Teorema 2.0.6.** Se  $\rho^* = \rho \geq 0$  Tr $(\rho) = 1$  matrice densità su  $\mathcal{H}$  allora siste una matrice densità  $\rho^{(I)}$  su  $\mathfrak{B}(\mathcal{H}_{i_1} \hat{\otimes} \dots \hat{\otimes} \mathcal{H}_{i_k})$  tale che

# Bibliografia

- [1] V. Moretti (2012) Teoria spettrale e meccanica quantistica, Springer.
- [2] Brian C. Hall (2013) Quantum Theory for Mathematicians, Springer New York.