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]. $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$ $\mathrm{C}^{\infty}_{\mathrm{c}}(\mathbb{R}^{\mathrm{n}})$ $\mathrm{S}(\mathbb{R}^{\mathrm{n}})$

Indice

Capitolo 1

Monaco

Definizione 1.0.1. Sia T operatore nello spazio di Hilbert $\mathcal{H}$:

1. Chiameremo insieme risolvente di T l'insieme $\rho(T)$ dei numeri complessi z tali che:
   - $T - z\,\mathbb{1}$ è iniettivo.
   - $\mathrm{Ran}(T - z\,\mathbb{1})$ è denso in $\mathcal{H}$.
   - $(T - z\,\mathbb{1})^{-1}$ è limitato.
2. Chiameremo risolvente di T l'operatore $(T - z\,\mathbb{1})^{-1}$ per $z \in \rho(T)$.
3. Chiameremo spettro di T l'insieme $\sigma(T) := \mathbb{C} \setminus \rho(T)$. Lo spettro è unione disgiunta di tre insiemi:
   - Spettro puntuale $\sigma_p(T)$ formato dai $\lambda \in \mathbb{C}$ tali che $T - \lambda\,\mathbb{1}$ non è iniettivo.
   - Spettro continuo $\sigma_c(T)$ formato dai $\lambda \in \mathbb{C}$ tali che $T - \lambda\,\mathbb{1}$ è iniettivo, $\mathrm{Ran}(T - \lambda\,\mathbb{1})$ è denso in $\mathcal{H}$ ma $(T - \lambda\,\mathbb{1})^{-1}$ non è limitato.
   - Spettro residuale $\sigma_c(T)$ formato dai $\lambda \in \mathbb{C}$ tali che $T - \lambda\,\mathbb{1}$ è iniettivo e $\mathrm{Ran}(T - \lambda\,\mathbb{1})$ non è denso in $\mathcal{H}$.

1.1 Sistemi invarianti per rotazioni

Modellizzazione matematica dell'atomo di idrogeno

Studieremo la dinamica di una particella quantistica carica e^- sotto l'azione del campo di forze elettrostatiche generato dal nucleo:

$$-\nabla V(\mathbf{r}) = \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma}{|\mathbf{r}|^3}\mathbf{r}, \quad V(\mathbf{r}) = \frac{-e^2}{|\mathbf{r}|}$$

Il modello quantistico ha per hamiltoniana:

$$H = H_0 + V = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

Più in generale, $H = H_0 + V$, che sono sistemi invarianti per rotazioni quindi

$$G = SO(3) = \{R \in M_{3\times 3}(\mathbb{R}) : R^T R = I, \det R = 1\}$$

è il gruppo di simmetrie dinamiche del sistema.

Per descrivere $SO(3)$ possiamo specificare:

- Asse di rotazione $\hat{n} \in S^2$;
- Angolo di rotazione $\alpha \in [\pi, \pi]$.

Prendere un tale α in tale dominio è ridondate poichè $R(\alpha, \hat{n}) = R(-\alpha, -\hat{n})$ ma tale scelta ci sarà utile in seguito.

Esempio:

$$R(\alpha, \hat{e_3}) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Per questa lezione lavoreremo nel costesto $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ facendo agire $SO(3)$ sul sistema quantistico come:

$$SO(3) \to \mathcal{U}(\mathcal{H}) \quad R \mapsto (U_R\psi)(\mathbf{r}) := \psi(R^{-1}\mathbf{r})$$

Diciamo che H descrive un sistema quantistico invariante per rotazioni se vale $U_R^{-1} H U_R = H$ per ogni $R \in SO(3)$ dal teorema di Noether $U_R^{-1} H U_R = H$ se e solo se $[H, L_i] = 0$ dove L_i sono i generatori infinitesimali di $SO(3)$.

Da Stone:

$$U(\alpha, \hat{e}_i) = e^{\frac{-i\alpha L_i}{\hbar}}, \quad L_i = L_i^*, \mathbf{L} = (L_1, L_2, L_3)$$

Dove L_1, L_2, L_3 sono gli operatori momento angolare, infatti

Proposizione 1.1.1. $\mathbf{L}$ *sono gli operatori momento angolare. Quindi* $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$.

Dimostrazione. Per brevità dimostreremo che $L_3 = x_1 p_2 - x_2 p_1 = -i\hbar(x_1\partial_2 - x_2\partial_1)$: □

Proposizione 1.1.2. *Gli operatori momento angolare soddisfano le regole di commutazione dell'algebra di Lie* $\mathfrak{so}(3)$*:*

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= i\hbar L_3, \\ [L_3, L_1] &= i\hbar L_2, \\ [L_2, L_3] &= i\hbar L_1. \end{aligned}$$

Dimostrazione. Anche qui per brevità dimostreremo solo il primo commutatore:

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] =& [x_2p_3 - x_3p_2, x_3p_1 - x_1p_3] = \\ =& [x_2p_3, x_3p_1] - [x_2p_3, x_1p_3] - [x_3p_2, x_3p_1] + [x_3p_2, x_1p_3] = \\ =& i\hbar(x_1p_2 - x_2p_1) = i\hbar L_3 \end{aligned}$$

□

Definiamo l'operatore di Casimir:

$$\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

Proposizione 1.1.3. *L'operatore di Casimir commuta con ogni componente di L:*

$$[\mathbf{L}^2, L_i] = 0 \quad \forall i \in \{x, y, z\}$$

Dimostrazione. Dimostriamo che $[\mathbf{L}^2, L_3] = 0$:

$$\begin{aligned}[\mathbf{L}^2, L_3] =&[L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, L_3] = \\ =&[L_1^2, L_3] + [L_2^2, L_3] = L_1[L_1, L_3] + [L_1, L_3]L_1 + L_2[L_2, L_3] + [L_2, L_3]L_2 = \\ =&i\hbar L_1L_2 - i\hbar L_2L_1 - i\hbar L_1L_2 + i\hbar L_2L_1 = 0\end{aligned}$$

□

Passiamo ora in coordinate sferiche per sfruttare la simmetria del sistema:

Lemma 1.1.4. *Esiste un isomorfismo unitario:*

$$\begin{aligned}\mathcal{R} : L^2(\mathbb{R}_+) \,\hat{\otimes}\, L^2(\mathbb{S}^2) \to& L^2(\mathbb{R}^3) \\ (r, \theta, \phi) \mapsto& f(r, \theta, \phi) := \frac{1}{r}R(r)Y(\theta, \phi)\end{aligned}$$

Dimostrazione.

$$\begin{aligned}\|f\|^2 =& \int_{\mathbb{R}^3} |f(\mathbf{x})|^2 \mathrm{d}^3x = \\ =& \int_{\mathbb{R}_+\times\mathbb{S}^2} r^2 sint\theta \left|\frac{1}{r}R(r)Y(\theta, \phi)\right|^2 \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi = \\ =& \int_{\mathbb{R}_+} |R(r)|^2\mathrm{d}r \int_{\mathbb{S}^2} |Y(\theta, \phi)|^2\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi =: \|R \otimes Y\|^2\end{aligned}$$

f allora si estende ad un isomorfismo unitario. □

Ora per coloro che studiano matematica piccola digressione sul motivo formale per cui è interessante studiare l'operatore di Casimir, è immediato vedere come l'operatore di Casimir cosí definito sia un elemento del centro dell'algebra inviluppante universale di $\mathfrak{so}(3) \simeq \mathfrak{sl}(2)$ e quindi agirà come moltiplicazione per uno scalare sui moduli di Verma associati, ora è possibile dimostrare che è anche l'unico elemento del centro (per cui definisce univocamente il carattere associato al modulo di Verma) per cui per il teorema di Harish-Chandra basterà studiare la sua azione per conoscere completamente il modulo irriducibile associato. Per maggiori informazioni sulle rappresentazioni di $\mathfrak{so}(3)$ (che espande leggermente quello che vedremo tra poco) si veda [4] Sezione 7, per una esaustiva trattaziona del teorema di Harish-Chandra, che esula dagli argomentri trattati in questo corso, si veda sempre [4] Sezione 23.

Per un sistema quantistico con simmetria rotazionale, lo spettro dell'operatore di Casimir è discreto:

$$\mathbf{L}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell + 1)Y_{\ell m}$$

dove $\ell \in \mathbb{N}$ e $m \in \{-\ell, \ldots, \ell\}$.

Conclusione

La simmetria del gruppo $SO(3)$ permette di caratterizzare le proprietà dell'atomo di idrogeno e degli operatori associati.

Definizione 1.1.5. Un operatore Hermitiano V è detto H_0-limitato se $\mathcal{D}(V) \supset \mathcal{D}(H_0)$ e esistono $C, D > 0$ tali che $\|V\psi\| \leq C\|H_0\psi\| + D\|\psi\|$ per ogni $\psi \in \mathcal{D}(H_0)$.

È possibile dimostrare che V è H_0-limitato se e solo se $\mathcal{D}(V) \subset \mathcal{D}(H_0)$ e $V(H_0 - z\,\mathbb{1})^{-1} \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ per ogni $z \in \rho(H_0)$. Definiamo inoltre il limite di V rispetto a H_0 come $H_0 \lim(V) = \sup_{z \in \rho(H_0)} \|V(H_0 - z\,\mathbb{1})^{-1}\|$.

Teorema 1.1.6 (Katô-Rellich). *Sia V un operatore hermitiano H_0-limitato con $H_0 \lim(V) < 1$ allora $H = H_0 + V$ è autoaggiunto su $\mathcal{D}(H_0)$.*

Definizione 1.1.7. Un operatore Hermitiano V è detto H_0-compatto se $\mathcal{D}(V) \supset \mathcal{D}(H_0)$ e $V(H_0 - z\,\mathbb{1})^{-1} \in \mathfrak{B}_\infty(\mathcal{H})$.

Se V è H_0-compatto allora V è H_0-limitato e $H_0 \lim(V) = 0$, inoltre $H_0 + V$ è essenzialmente autoaggiunto.

Teorema 1.1.8 (Weyl). *Perturbazioni V H_0-compatte di un operatore autoaggiunto H_0 sono tali che $\sigma_{ess}(H_0 + V) = \sigma_{ess}(H_0)$.*

1.2 Stati puri e stati misti

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

Definizione 1.2.1. Sia $\mathcal{H}$ con la norma indotta $\|\dot{}\|$ 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 $\mathfrak{B}_2(\mathcal{H}) \subset \mathfrak{B}_\infty(\mathcal{H})$ è uno *-ideale bilatero.

Proposizione 1.2.2. *Sia $\mathcal{H}$ spazio di Hilbert, $T \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$. I seguenti tre fatti sono equivalenti:*

1. *Esiste N base hilbertiana tale che $\{\langle u, |T|u\rangle\}$ ha somma finita.*
2. *$\sqrt{T^*T}$ è di Hilbert-Schmidt.*
3. *T è compatto e la successione degli autovalori $\{m_n\}$ di $\sqrt{T^*T}$ contati con molteplicità ha somma finita.*

Definizione 1.2.3. Sia $\mathcal{H}$ spazio di Hilbert, $T \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ è detto operatore classe traccia se vale una delle tre condizioni equivalenti della proposizione precedente. L'insieme degli operatori classe traccia su $\mathcal{H}$ sarà indicato con $\mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$, infine se $T \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ allora definiamo $\|T\|_1 = \|\sqrt{T^*T}\|_2^2 = \sum m_n$.

Come per gli operatori di Hilbert-Schmidt $\mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ è uno *-ideale bilatero di $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$. Inoltre $\mathfrak{B}_1(\mathcal{H}) \subset \mathfrak{B}_2(\mathcal{H}) \subset \mathfrak{B}_\infty(\mathcal{H}) \subset \mathfrak{B}(\mathcal{H})$. Infine dato $A \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ esistono $B, C \in \mathfrak{B}_2(\mathcal{H})$ tali che $A = BC$, viceversa se $B, C \in Hs$ allora $BC \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$.

Definizione 1.2.4. Sia $\mathcal{H}$ spazio di Hilbert, $T \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$, il numero $\mathbb{C} \ni \operatorname{Tr} T = \sum \langle u, Tu \rangle$ è detto traccia di T.

Ora enunceremo un teorma con una serie di proprietà delle tracce, che non dimostreremo per brevità ma che si possono trovare in [1].

Teorema 1.2.5. *Sia $\mathcal{H}$ spazio di Hilbert, $T \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ allora valgono le seguenti:*

- $|T| \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ *e* $\operatorname{Tr}|T| = \sum |m_n| = \|T\|_1$.
- *Se* $S \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ *allora* $\operatorname{Tr}(ST) = \operatorname{Tr}(TS)$.
- *Se* $\mathcal{H}$ *è complesso allora* $\operatorname{Tr}(T^*) = \overline{\operatorname{Tr}(T)}$.
- *Se* $T \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ *e* $T = \sum T_i$ *con* $T_i \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ *allora* $\operatorname{Tr}(T) = \sum \operatorname{Tr}(T_i)$.
- *Se* $\mathcal{H}$ *è complesso allora* $\operatorname{Tr}(T) = \sum_{\lambda \in \sigma_p(T)} \lambda$*, dove i* λ *sono contati con molteplicità geometrica.*

La dimostrazione dell'ultimo punto è interessante ma piuttosto articolata e puó essere trovata in [3].

Definizione 1.2.6. Una mappa lineare $\mathbb{E} : \mathfrak{B}(\mathcal{H}) \to \mathbb{C}$ è detta *una famiglia di valori attesi* se valgono le seguenti:

- $\mathbb{E}(\mathbb{1}) = 1$.
- $\mathbb{E}(A)$ è reale quando A è autoaggiunto.
- $\mathbb{E}(A)$ 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 1.2.7. Un operatore $\rho \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ è una matrice densità se ρ è autoaggiunto, non negativo e vale $\operatorname{Tr}\rho = 1$.

Definizione 1.2.8. 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: $(u_1 \otimes v_1, u_2 \otimes v_2) = (u_1, u_2)_1 (v_1, v_2)_2$.

È naturale definire il prodotto tensore tra operatori, siano $A_1 \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_1)$ e $A_2 \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_2)$ definiremo $A_1 \otimes A_2 \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})(\mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \mathcal{H}_2)$ come $A_1 \otimes A_2(u_1 \otimes u_2) = A_1 u_1 \otimes A_2 u_2$. A questo punto sia ρ matrice dentià su $\mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \mathcal{H}_2$ allora $\rho^{(1)}$ e $\rho^{(2)}$ sono le matrici densità ridotte su $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$ rispettivamente definite come le uniche tali che $\operatorname{tr}(\rho(A \otimes \mathbb{1})) = \operatorname{tr}\big(\rho^{(1)} A\big)$ e $\operatorname{tr}(\rho(\mathbb{1} \otimes B)) = \operatorname{tr}\big(\rho^{(2)} B\big)$ per ogni $A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_1)$ e $B \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_2)$. Esistenza e unicità di tali matrici densità è dimostrata ad esempio in [2] Theorem 19.13.

Proposizione 1.2.9. *L'applicazione* $L^2(X_1, \mu_1) \hat{\otimes} L^2(X_2, \mu_2) \to L^2(X_1 \times X_2, \mu_1 \times \mu_2)$ *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 $L^2(\mathbb{R}^{nd}) = \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^\mathrm{n}) \hat{\otimes} \ldots \hat{\otimes} \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^\mathrm{n})$. 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 $I = \{i_1, \ldots, i_k\} \subset \{1, \ldots, n\}$ e $A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_{i_1} \hat{\otimes} \ldots \hat{\otimes} \mathcal{H}_{i_k})$ allora $A^{(I)} \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ agisce sui sottosistemi associati.

Teorema 1.2.10. *Se $\rho^* = \rho \geq 0$ $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$ matrice densità su $\mathcal{H}$ allora siste una matrice densità $\rho^{(I)}$ su $\mathfrak{B}(\mathcal{H}_{i_1} \hat{\otimes} \ldots \hat{\otimes} \mathcal{H}_{i_k})$ tale che $\mathbb{E}_\rho(A^{(I)}) = \mathbb{E}_{\rho^{(I)}}(A)$, con $\rho^{(I)}$ lo stato indotto da ρ sul sottosistema I chiamato matrice dentià ridotta e $\mathbb{E}_\rho^{(I)}$ è detta traccia parziale della famiglia $\mathbb{E}_\rho$.*

Dimostrazione. □

Bibliografia

[1] V. Moretti (2012) *Teoria spettrale e meccanica quantistica*, Springer.

[2] Brian C. Hall (2013) *Quantum Theory for Mathematicians*, Springer New York.

[3] Birman, M.S., Solomjak, M.Z. (1987) *Spectral Theory of Self-Adjoint Operators in Hilbert Space*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht.

[4] James E. Humphreys (1972) *Introduction to Lie Algebras and Representation Theory*, Springer.