

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]. $\mathfrak{B}(\mathcal{H}) \subset C_c^\infty(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$

Indice

1	Meccanica Quantistica	11
1.1	Crisi della Fisica Classica	11
1.1.1	Problema degli spettri atomici	11
1.1.2	Problema della stabilità atomica	11
1.1.3	Scoperte fondamentali	11
1.2	Il Modello Atomico di Bohr	12
1.2.1	Ipotesi del modello di Bohr	12
1.2.2	Fonti di ispirazione	12
1.2.3	Derivazione dei livelli energetici	12
1.3	Relazione di dispersione per una Meccanica Ondulatoria	12
1.3.1	Equazione di Klein-Gordon	13
1.3.2	Equazione di Schrödinger	13
1.4	L'Equazione di Schrödinger Libera	13
1.4.1	Soluzione generale	13
1.5	Teoria dell'Onda di Materia	13
1.5.1	Interpretazione fisica	13
1.5.2	Vantaggi della teoria	13
1.5.3	Criticità della teoria	14
2	Operatori autoaggiunti	15
2.1	Introduzione	15
3	Monaco	17
3.1	Sistemi invarianti per rotazioni	17
3.2	Stati puri e stati misti	20

D'ora in poi nel resto delle note seguiremo la seguente notazione:

- **Spazio delle posizioni:** $\mathbb{R}^d \simeq E^d \ni x, y, z$ con $[x] = [y] = [z] = L$ lunghezza.
- **Spazio dei vettori d'onda:** $\hat{\mathbb{R}}^n \simeq \hat{E}^d \ni k, \xi, \alpha, \beta$ con $[k] = [\xi] = [\alpha] = [\beta] = L^{-1}$ inverso della lunghezza.

Definizione 0.0.1. Sia $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, chiameremo trasformata di Fourier e antitrasformata di Fourier le mappe lineari da $L^1(\mathbb{R}^d)$ a $L^\infty(\mathbb{R}^d)$ definite rispettivamente da:

$$(\mathcal{F}f)(k) = \hat{f}(k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ik \cdot x} f(x) dx$$

$$(\mathcal{F}_-f)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ik \cdot x} f(k) dk$$

Definiremo le seguenti applicazioni, dati $a \in \mathbb{R}^d$, $\alpha \in \hat{\mathbb{R}}^n$ e $\lambda \in \mathbb{R}$:

- **Traslazioni:** $(\tau_a f)(x) = f(x - a)$.
- **Moltiplicazione per carattere:** $(c_\alpha f)(x) = e^{i\alpha \cdot x} f(x)$.
- **Dilatazioni/Contrazioni:** $(D_\lambda f)(x) = \lambda^{-d/2} f\left(\frac{x}{\lambda}\right)$.

Proposizione 0.0.2. La formula sopra definisce una mappa lineare continua $F : L^1(\mathbb{R}^d) \rightarrow C_b(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d)$ tale che:

- $\mathcal{F}(\tau_a f)(k) = e^{-ik \cdot a} \hat{f}(k)$.
- $\mathcal{F}(c_\alpha f)(k) = \hat{f}(k - \alpha)$.
- $\mathcal{F}(D_\lambda f)(k) = \lambda^{d/2} \hat{f}(ak) = D_{\frac{1}{\lambda}} \hat{f}(k)$.

Dimostrazione. * La dimostrazione è abbastanza semplice, per dimostrare che sta in C_b basta vedere che $\|\hat{f}\|_\infty \leq \|f\|_1$ e per dimostrare che è continua basta vedere che data $\xi_j \rightarrow \xi$ convergente allora $e^{-i\xi_j \cdot x} f(x) \rightarrow e^{-i\xi \cdot x} f(x)$ quasi ovunque e inoltre $|e^{-i\xi_j \cdot x} f(x)| \leq |f(x)| \in L^1(\mathbb{R}^d)$, il resto segue facendo i conti. \square

Proposizione 0.0.3 (Lemma di Riemann-Lebesgue). Sia $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, allora $\hat{f}(k)$ tende a 0 per $|k| \rightarrow \infty$.

2. Estensione della teoria su $L^2(\mathbb{R}^d)$

Il problema è che nella teoria in L^1 l'inversa della trasformata di Fourier non esiste, per ovviare a questo problema prima si studia la restrizione della trasformata allo spazio di Schwartz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ dove trasformata e antitrasformata di Fourier sono una l'inversa dell'altra si passa alle classi di equivalenza e infine si estende per linearità e continuità a $L^2(\mathbb{R}^d)$, il che fa sì, poichè $\mathcal{F}\mathcal{F}_- = \mathbb{1}_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)}$ e che l'estensione dell'identità è unica vale anche $\mathcal{F}\mathcal{F}_- = \mathbb{1}_{L^2}$. In maniera formale avremo che:

Teorema 0.0.4.

Dimostriamo ora per \mathcal{F} , il risultato per \mathcal{F}^{-1} è analogo.

Sia

$$g(k) := \int_{\mathbb{R}^n} e^{ik \cdot x} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} f(x) dx.$$

Passaggio della derivata sotto il segno dell'integrale: È facile verificare che:

$$|\partial_k^\alpha e^{ik \cdot x} f(x)| = |i^{|\alpha|} M_\alpha(x) f(x)| \leq |M_\alpha(x) f(x)|,$$

con $M_\alpha(x) = x^\alpha f(x)$.

Poiché $f \in S(\mathbb{R}^n)$, segue che $M_\alpha(x) f(x) \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Usando il teorema della convergenza dominata di Lebesgue, possiamo scambiare derivata e integrale:

$$\partial_k^\alpha g(k) = i^{|\alpha|} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ik \cdot x} \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} M_\alpha(x) f(x) dx.$$

3. Ottica ondulatoria ed equazione delle onde

- Incognita: $u(t, x)$ con $(t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$.
- Equazione delle onde:

$$\square u = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \Delta u = 0,$$

con condizioni iniziali $u(0, x) = u_0(x)$, $\frac{\partial u}{\partial t}(0, x) = v_0(x)$.

4. Teorema di Plancherel

La trasformata di Fourier:

$$\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d),$$

è un'isometria e un'operatore unitario:

- $\|f\|_{L^2} = \|\hat{f}\|_{L^2}$.
- È suriettiva.

5. Conclusione

L'analisi armonica è la branca dell'analisi matematica che studia la rappresentazione di funzioni e segnali come sovrapposizioni di onde fondamentali (armoniche).

I. Verso la meccanica ondulatoria

Nel 1912, in Austria, si assiste a uno sviluppo significativo negli studi matematici e fisici, con particolare interesse verso la natura ondulatoria della materia e della luce.

2. Meccanica classica

La meccanica classica pone le basi per la comprensione dei fenomeni fisici, ma presenta limiti nell'interpretare fenomeni atomici e subatomici.

Elettromagnetismo: grazie agli studi di Maxwell, Hertz e Lorentz, si stabilisce che la luce è un'onda elettromagnetica. Hertz dimostra sperimentalmente che una particella carica in moto accelerato emette radiazione elettromagnetica.

Problemi aperti

Nonostante i progressi, restano misteri irrisolti:

- Gli spettri atomici, che mostrano righe caratteristiche per ogni elemento.
- La struttura atomica, la cui stabilità e organizzazione non sono spiegate dalla meccanica classica.

Mistero degli spettri atomici

Il termine *spettro*, dal latino *imago* (immagine, fantasma), si riferisce alla distribuzione delle lunghezze d'onda della luce emessa o assorbita dagli atomi.

Newton (1666) osserva la scomposizione della luce bianca attraverso un prisma, descrivendo il fenomeno nella sua opera "Opticks" (1714).

Se al posto di luce bianca si utilizza un tubo contenente gas, come l'idrogeno, si osserva che lo spettro non è continuo ma presenta righe isolate. Questa scoperta porta Fraunhofer (1814) a inventare lo spettroscopio, uno strumento per analizzare gli spettri luminosi.

Ipotesi di Bunsen e Kirchhoff

Nel 1859, Robert Bunsen e Gustav Kirchhoff formularono ipotesi fondamentali per la comprensione delle righe spettrali. Essi scoprirono che ogni elemento chimico emette luce a lunghezze d'onda specifiche quando viene riscaldato, producendo uno spettro caratteristico di righe luminose. Questo fenomeno è alla base della spettroscopia, una tecnica analitica che permette di identificare gli elementi presenti in una sostanza.

Leggi di Kirchhoff Kirchhoff formulò tre leggi fondamentali della spettroscopia:

1. **Prima legge:** Un corpo solido, liquido o un gas denso riscaldato emette uno spettro continuo di radiazione.
2. **Seconda legge:** Un gas rarefatto riscaldato emette uno spettro di emissione costituito da righe luminose su uno sfondo scuro. Le posizioni delle righe sono caratteristiche dell'elemento chimico presente nel gas.

3. **Terza legge:** Un gas freddo posto davanti a una sorgente di luce che emette uno spettro continuo produce uno spettro di assorbimento. Questo spettro è costituito da righe scure che corrispondono esattamente alle posizioni delle righe di emissione del gas.

Spettroscopia di Emissione e Assorbimento La spettroscopia di emissione e assorbimento si basa sulle leggi di Kirchhoff. Quando un elemento viene riscaldato, gli elettroni nei suoi atomi assorbono energia e saltano a livelli energetici superiori. Quando gli elettroni ritornano ai livelli energetici inferiori, emettono energia sotto forma di luce a lunghezze d'onda specifiche, producendo uno spettro di emissione.

Al contrario, quando la luce bianca passa attraverso un gas freddo, gli elettroni negli atomi del gas assorbono energia a lunghezze d'onda specifiche, saltando a livelli energetici superiori. Questo produce uno spettro di assorbimento con righe scure nelle stesse posizioni delle righe luminose dello spettro di emissione.

Importanza delle Scoperte di Bunsen e Kirchhoff Le scoperte di Bunsen e Kirchhoff hanno avuto un impatto significativo sulla chimica e sull'astronomia. La spettroscopia è diventata uno strumento essenziale per l'analisi chimica, permettendo di identificare gli elementi presenti in campioni sconosciuti. In astronomia, la spettroscopia ha permesso di determinare la composizione chimica delle stelle e delle galassie, fornendo informazioni cruciali sulla loro formazione ed evoluzione.

Le ipotesi di Bunsen e Kirchhoff hanno gettato le basi per lo sviluppo della spettroscopia moderna e hanno contribuito in modo significativo alla comprensione della natura della luce e della materia.

Serie di Balmer

Johann Balmer, nel 1885, scopre una formula empirica che descrive le lunghezze d'onda delle righe spettrali visibili dell'idrogeno. La serie di Balmer è data da:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

dove λ è la lunghezza d'onda della luce emessa, R_H è la costante di Rydberg per l'idrogeno, e n è un numero intero maggiore di 2 ($n = 3, 4, 5, \dots$).

Le righe della serie di Balmer si trovano nella regione visibile dello spettro elettromagnetico e sono particolarmente importanti perché furono le prime a essere osservate e studiate. Le prime quattro righe della serie di Balmer sono note come H-alfa, H-beta, H-gamma e H-delta, corrispondenti a transizioni verso il secondo livello energetico ($n=2$) da livelli superiori ($n=3, 4, 5, 6$).

Formula di Rydberg

Johannes Rydberg generalizza la formula di Balmer per descrivere tutte le serie spettrali dell'idrogeno. La formula di Rydberg è:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

dove n_1 e n_2 sono numeri interi tali che $n_2 > n_1$. Questa formula permette di calcolare le lunghezze d'onda delle transizioni elettroniche tra diversi livelli energetici dell'atomo di idrogeno.

La formula di Rydberg può essere utilizzata per descrivere altre serie spettrali dell'idrogeno, come la serie di Lyman (ultravioletto), la serie di Paschen (infrarosso), la serie di Brackett e la serie di Pfund. Ogni serie è caratterizzata da un valore specifico di n_1 :

- Serie di Lyman: $n_1 = 1$
- Serie di Balmer: $n_1 = 2$
- Serie di Paschen: $n_1 = 3$
- Serie di Brackett: $n_1 = 4$
- Serie di Pfund: $n_1 = 5$

La scoperta delle serie spettrali e la formulazione della legge di Rydberg furono fondamentali per lo sviluppo della teoria quantistica e per la comprensione della struttura atomica. La serie di Balmer si verifica quando un elettrone in un atomo di idrogeno cade da un livello energetico superiore a $n = 2$. Questo avviene perché gli elettroni negli atomi possono occupare solo livelli energetici discreti. Quando un elettrone assorbe energia, può saltare a un livello energetico superiore. Successivamente, quando l'elettrone ritorna a un livello energetico inferiore, emette energia sotto forma di luce.

Nel caso della serie di Balmer, l'elettrone cade verso il secondo livello energetico ($n = 2$) da livelli superiori ($n > 2$). Le transizioni che coinvolgono il secondo livello energetico producono righe spettrali nella regione visibile dello spettro elettromagnetico. Questo è il motivo per cui la serie di Balmer è particolarmente importante e fu una delle prime ad essere osservata e studiata.

Le righe della serie di Balmer sono visibili perché la differenza di energia tra i livelli coinvolti corrisponde a lunghezze d'onda che rientrano nella gamma della luce visibile. Questo rende la serie di Balmer fondamentale per la spettroscopia e per la comprensione della struttura atomica.

Mistero della struttura atomica

Ludwig Boltzmann e Ernst Mach: sostengono l'ipotesi atomica e l'energetismo. La materia può essere descritta come composta da unità discrete (atomi o molecole).

La stechiometria introduce il concetto di mole come unità della materia. L'equazione di Boltzmann diventa la base per le teorie cinetiche dei gas.

Modelli atomici del 1900

Nel corso del 1900, la comprensione della struttura atomica ha subito una serie di evoluzioni significative grazie ai contributi di diversi scienziati. Tra i modelli più influenti vi sono quelli proposti da J.J. Thomson, Ernest Rutherford e Niels Bohr.

Modello di Thomson

Nel 1897, J.J. Thomson scoprì l'elettrone, una particella subatomica carica negativamente. Basandosi su questa scoperta, Thomson propose il cosiddetto "modello a panettone"

o "modello a cocomero" dell'atomo. In questo modello, gli elettroni erano dispersi all'interno di una sfera carica positivamente, simile ai semi di un cocomero nella polpa. Questo modello spiegava la neutralità elettrica dell'atomo, ma non riusciva a spiegare i dettagli degli spettri atomici.

Modello di Rutherford

Nel 1911, Ernest Rutherford, attraverso il famoso esperimento della lamina d'oro, propose un nuovo modello atomico. Rutherford scoprì che la maggior parte delle particelle alfa passava attraverso la lamina d'oro senza deviazioni significative, ma alcune venivano deviate con angoli elevati e alcune addirittura rimbalzavano indietro. Da queste osservazioni, Rutherford dedusse che la carica positiva dell'atomo e la maggior parte della sua massa erano concentrate in un piccolo nucleo centrale, mentre gli elettroni orbitavano attorno a questo nucleo. Questo modello, tuttavia, non spiegava la stabilità degli atomi né gli spettri di emissione. Il modello di Rutherford implica che gli elettroni dovrebbero spiraleggiare verso il nucleo in tempi brevissimi ($\sim 10^{-10}$ s) per via della legge di Hertz. Questo contrasta con la stabilità osservata della materia.

Modello di Bohr

Nel 1913, Niels Bohr propose un modello atomico che combinava le idee di Rutherford con i concetti della teoria quantistica. Bohr suggerì che gli elettroni orbitano attorno al nucleo in orbite stazionarie senza emettere energia. Gli elettroni possono saltare da un'orbita all'altra emettendo o assorbendo quanti di energia, con la frequenza della radiazione emessa data dalla differenza di energia tra le orbite divisa per la costante di Planck. Questo modello spiegava con successo gli spettri di emissione dell'idrogeno e introduceva il concetto di quantizzazione dell'energia negli atomi. Il modello di Bohr rappresenta un passo cruciale nella comprensione della struttura atomica, introducendo concetti che sarebbero stati fondamentali per la meccanica quantistica. Ecco alcuni dettagli chiave del modello di Bohr:

Postulati di Bohr

Bohr formulò tre postulati principali per descrivere il comportamento degli elettroni negli atomi:

1. **Orbite stazionarie:** Gli elettroni orbitano attorno al nucleo in orbite stazionarie senza emettere radiazione elettromagnetica. Queste orbite sono quantizzate, cioè solo certe orbite con specifiche energie sono permesse.
2. **Quantizzazione del momento angolare:** Il momento angolare dell'elettrone in un'orbita stazionaria è quantizzato ed è dato da $L = n\hbar$, dove n è un numero intero positivo (numero quantico principale) e \hbar è la costante di Planck ridotta.
3. **Transizioni quantiche:** Gli elettroni possono saltare da un'orbita stazionaria a un'altra solo assorbendo o emettendo un quanto di energia $E = h\nu$, dove h è la costante di Planck e ν è la frequenza della radiazione emessa o assorbita.

Energia degli Elettroni

L'energia totale di un elettrone in un'orbita stazionaria è data dalla somma dell'energia cinetica e dell'energia potenziale. Per l'atomo di idrogeno, l'energia dell'elettrone in un'orbita con numero quantico principale n è:

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

dove 13.6 eV è l'energia di ionizzazione dell'idrogeno. Questa formula mostra che l'energia degli elettroni negli atomi è quantizzata e diminuisce all'aumentare del numero quantico principale n . Il modello di Bohr spiega con successo gli spettri di emissione e assorbimento dell'idrogeno predetti dalla formula di Rydberg.

Limitazioni del Modello di Bohr

Nonostante il successo nel descrivere l'atomo di idrogeno, il modello di Bohr presenta alcune limitazioni:

- Non riesce a spiegare gli spettri di atomi più complessi dell'idrogeno.
- Non tiene conto delle interazioni tra elettroni in atomi con più di un elettrone.
- Non spiega la struttura fine degli spettri atomici, che richiede una descrizione relativistica degli elettroni.

Il modello di Bohr ha avuto un impatto duraturo sulla fisica, ponendo le basi per lo sviluppo della meccanica quantistica. I concetti di quantizzazione dell'energia e delle orbite stazionarie sono stati fondamentali per la successiva teoria quantistica degli atomi, sviluppata da Schrödinger, Heisenberg e altri.

Svilupperemo ora i calcoli di Bohr per l'atomo di idrogeno, che portano alla formula di Rydberg e alla spiegazione della serie di Balmer. Partiamo dalla quantizzazione dei raggi delle orbite stazionarie nell'idrogeno. La legge di Newton in sola presenza di forza elettrostatica diventa: (ponendo le costanti dielettriche ad 1)

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$$

e poichè

$$L = mvr = n\hbar$$

otteniamo

$$v = \frac{e^2}{n\hbar}$$

e sostituendo in

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$$

otteniamo

$$r = \frac{n^2 \hbar^2}{me^2}$$

che è la quantizzazione dei raggi delle orbite stazionarie. Sostituendo in ricordando che

$$E_{tot} = E_{pot} + E_{cin} = -\frac{e^2}{2r} + m \frac{v^2}{2} = -\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{2r} = -\frac{e^2}{2r}$$

otteniamo

$$E_n = -\frac{e^2}{2r} = -\frac{e^2}{2} \frac{me^2}{n^2 \hbar^2} = -\frac{me^4}{2n^2 \hbar^2}$$

che è l'energia delle orbite stazionarie. Infine, la differenza di energia tra due orbite stazionarie è data da

$$\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

che è la formula di Rydberg, infine ricordando semplicemente l'equazione di De Broglie $E = h \nu$ otteniamo le varie frequenze emesse nei salti energetici.

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:

$$E = h\nu \quad (1.2.1)$$

dove h è la costante di Planck e ν 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:

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

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

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \quad (1.2.3)$$

Le orbite consentite hanno raggi definiti, dati da:

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{ke^2 m_e} \quad (1.2.4)$$

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:

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

Questa equazione descrive particelle relativistiche di spin nullo.

1.3.2 Equazione di Schrödinger

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

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

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:

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

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:

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

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 particella-rivelatore.
- Incapacità di spiegare le righe spettrali dell'elio.

Chiameremo la seguente equazione l'equazione di Schrödinger libera di incognita $\psi : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (1.5.1)$$

con $\psi(0, \cdot) = \psi_0(\cdot) \in H^2(\mathbb{R}^d)$.

Capitolo 2

Operatori autoaggiunti

2.1 Introduzione

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

$$\|Tx\| \leq C\|x\| \quad \text{per ogni } x \in \mathcal{H}.$$

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

Definizione 2.1.2. 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 $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow \mathcal{H}$.

Definizione 2.1.3. È detto *grafico* di un operatore T in \mathcal{H} il sottospazio di $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \supseteq \mathcal{G}(T) := \{(x, Tx) | x \in \mathcal{D}(T)\}$. Diremo inoltre che T è un operatore chiuso se il suo grafico è chiuso in $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$.

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

Definizione 2.1.4. 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 2.1.5. 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 2.1.6. 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 $\mathcal{G}(\overline{T}) = \overline{\mathcal{G}(T)}$.

Proposizione 2.1.7. 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 2.1.8. 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 2.1.9. 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 $f_\psi : \mathcal{D}(T) \rightarrow \mathbb{C}$ definito da $f_\psi(\phi) = \langle \psi, T\phi \rangle$. Posso però considerare $\{\psi \in \mathcal{H} \mid f_\psi \text{ è limitato}\} = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \sup_{\phi \in \mathcal{D}(T)} \frac{|\langle \psi, T\phi \rangle|}{\|\phi\|} < \infty\} = \mathcal{D}(T^*)$. Posso quindi utilizzare il teorema di rappresentazione di Riesz su $\mathcal{D}(T^*)$ per definire l'aggiunto di T .

Definizione 2.1.10. 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 2.1.11. 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 2.1.12. Diremo che un operatore T è autoaggiunto nel senso di Von Neumann se $T = T^*$ e $\mathcal{D}(T) = \mathcal{D}(T^*)$.

Osservazione 2.1.13. L'aggiunzione ribalta le inclusioni: se $T \subseteq S$, allora $S^* \subseteq T^*$. Sia ad esempio $T_i = -i\frac{d}{dx}$ e $\mathcal{D}(T) = C_c^\infty(\mathbb{R}) \subseteq \mathcal{D}(T_2) = C_c^1(\mathbb{R}) \subseteq \dots$, allora $\dots \subseteq \mathcal{D}(T_2^*) \subseteq \mathcal{D}(T_1^*)$, può 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 3

Monaco

Definizione 3.0.1. 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.
 - $\text{Ran}(T - z \mathbb{1})$ 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, $\text{Ran}(T - \lambda \mathbb{1})$ è denso in \mathcal{H} ma $(T - \lambda \mathbb{1})^{-1}$ non è limitato.
 - Spettro residuale $\sigma_r(T)$ formato dai $\lambda \in \mathbb{C}$ tali che $T - \lambda \mathbb{1}$ è iniettivo e $\text{Ran}(T - \lambda \mathbb{1})$ non è denso in \mathcal{H} .

3.1 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 ridondante 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:

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

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

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

Proposizione 3.1.2. *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:

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= [x_2 p_3 - x_3 p_2, x_3 p_1 - x_1 p_3] = \\ &= [x_2 p_3, x_3 p_1] - [x_2 p_3, x_1 p_3] - [x_3 p_2, x_3 p_1] + [x_3 p_2, x_1 p_3] = \\ &= i\hbar(x_1 p_2 - x_2 p_1) = i\hbar L_3 \end{aligned}$$

\square

Definiamo l'operatore di Casimir:

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

Proposizione 3.1.3. *L'operatore di Casimir commuta con ogni componente di \mathbf{L} :*

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

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

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

□

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

Lemma 3.1.4. *Esiste un isomorfismo unitario:*

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

Dimostrazione.

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

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 così definito sia un elemento del centro dell'algebra involupante 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 trattazione del teorema di Harish-Chandra, che esula dagli argomenti 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 $m \in \{-\ell, \dots, \ell\}$.

Conclusione

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

Definizione 3.1.5. 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 3.1.6 (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 3.1.7. 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 3.1.8 (Weyl). *Perturbazioni V H_0 -compatte di un operatore autoaggiunto H_0 sono tali che $\sigma_{ess}(H_0 + V) = \sigma_{ess}(H_0)$.*

3.2 Stati puri e stati misti

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

Definizione 3.2.1. Sia \mathcal{H} con la norma indotta $\|\cdot\|$ 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 $\sum \|Au_k\|^2 < \infty$.

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 3.2.2. *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 3.2.3. 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 $B, C \in \mathfrak{H}s$ allora $BC \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$.

Definizione 3.2.4. Sia \mathcal{H} spazio di Hilbert, $T \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$, il numero $\mathbb{C} \ni \text{Tr } T = \sum \langle u, Tu \rangle$ è detto traccia di T .

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

Teorema 3.2.5. *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 $\text{Tr } |T| = \sum |m_n| = \|T\|_1$.
- Se $S \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ allora $\text{Tr}(ST) = \text{Tr}(TS)$.
- Se \mathcal{H} è complesso allora $\text{Tr}(T^*) = \overline{\text{Tr}(T)}$.
- Se $T \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ e $T = \sum T_i$ con $T_i \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ allora $\text{Tr}(T) = \sum \text{Tr}(T_i)$.
- Se \mathcal{H} è complesso allora $\text{Tr}(T) = \sum_{\lambda \in \sigma_p(T)} \lambda$, dove i λ sono contati con molteplicità geometrica.

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

Definizione 3.2.6. Una mappa lineare $\mathbb{E} : \mathfrak{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ è detta *una famiglia di valori attesi* se valgono le seguenti:

- $\mathbb{E}(1) = 1$.
- $\mathbb{E}(A)$ 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 $\|A_n\psi - A\psi\| \rightarrow 0$ per tutti $\psi \in \mathcal{H}$ allora $\mathbb{E}(A_n) \rightarrow \mathbb{E}(A)$.

Definizione 3.2.7. Un operatore $\rho \in \mathfrak{B}_1(\mathcal{H})$ è una matrice densità se ρ è autoaggiunto, non negativo e vale $\text{Tr } \rho = 1$.

Definizione 3.2.8. Siano $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ spazi di Hilbert 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 densità 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 $\text{tr}(\rho(A \otimes 1)) = \text{tr}(\rho^{(1)}A)$ e $\text{tr}(\rho(1 \otimes B)) = \text{tr}(\rho^{(2)}B)$ 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 3.2.9. *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 $\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_n$ allora il sistema composto è descritto dallo spazio di hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \dots \hat{\otimes} \mathcal{H}_n$. Per cui un sistema quantistico di n particelle può essere descritto da $L^2(\mathbb{R}^{nd}) = L^2(\mathbb{R}^n) \hat{\otimes} \dots \hat{\otimes} L^2(\mathbb{R}^n)$. 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 $A(\psi_1 \otimes \dots \otimes \psi_n) = A_1 \psi_1 \otimes \dots \otimes A_n \psi_n$. 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 3.2.10. *Se $\rho^* = \rho \geq 0$ $\text{Tr}(\rho) = 1$ matrice densità su \mathcal{H} allora esiste una matrice densità $\rho^{(I)}$ su $\mathfrak{B}(\mathcal{H}_{i_1} \hat{\otimes} \dots \hat{\otimes} \mathcal{H}_{i_k})$ 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 densità ridotta e $\mathbb{E}_\rho^{(I)}$ è detta traccia parziale della famiglia \mathbb{E}_ρ .*

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.