

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

Indice

1	Teoria spettrale	3
1.1	Autoaggiuntezza	3
1.2	Teoria spettrale su $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$	5
1.3	La struttura teorica della meccanica quantistica	9
2	Monaco	24
2.1	Sistemi invarianti per rotazioni	24
2.2	Stati puri e stati misti	27

Capitolo 1

Teoria spettrale

1.1 Autoaggiuntezza

Partiamo con il toy model degli spazi di Hilbert finito dimensionali $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^n$ che ha, si una serie di utili applicazioni pratiche ad esempio si prenda la teoria dello spin, ma anche una teoria molto più semplificata come vedremo.

Teorema 1.1.1. *Sia $H \in \text{End}(\mathbb{C}^n)$ tale che $H^* = H$, valgono le seguenti proprietà*

1. *H genera un'evoluzione unitaria, ossia dato il sistema*

$$\begin{cases} i\psi = H\psi \\ \psi(0) = \psi_0 \end{cases}$$

la cui soluzione è data da $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^n$ che associa $t \mapsto \psi(t) := e^{-itH}\psi_0$ con:

$$e^{-itH} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^N \frac{1}{k!} (-itH)^k$$

2. *H è ortodiagonizzabile:*

- (a) *Esiste una base ortonormale e_1, \dots, e_n di autovettori di H .*
- (b) *Esiste $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}^n$ tale che UHU^{-1} è diagonale*
- (c) *H è spettralizzabile ossia esiste una famiglia $\{E_l\}$ di proiettori ortogonali mutualmente ortogonali tali che $\sum E_l = \mathbb{1}$ e $H = \sum \lambda_l E_l$.*

La dimostrazione è nota dall'algebra lineare. Il problema nel caso infinito dimensionale è che per operatori hermitiani il teorema sopra è falso, si prenda ad esempio l'operatore posizione su \mathbb{R} , è simmetrico e quindi possiede solo autovalori reali ma è facile vedere che fissato $x_0 \in \mathbb{R}$ non esiste $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ non nulla tale che $X\psi = x_0\psi$ quindi non sempre esistono autovettori per operatori simmetrici nel caso infinito dimensionale. Lo scopo di questa sezione sarà costruire le basi per generalizzarlo al caso infinito dimensionale e poi al caso di operatori non limitati.

Definizione 1.1.2. 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 Hilber infinito dimensionale allora non è detto che $\overline{\mathcal{G}(T)}$ sia il grafico di qualche operatore lineare.

Definizione 1.1.3. 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 1.1.4. 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 1.1.5. 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 $\mathcal{G}(\overline{T}) = \overline{\mathcal{G}(T)}$.

Esempio 1.1.6. Dato $T_1 = -i\frac{d}{dx}$ con $\mathcal{D}(T_1) = C_c^\infty(\mathbb{R})$ è possibile mostrare che T_1 non è chiuso ma è chiudibile con chiusura $T_2 = -i\frac{d}{dx}$ in cui la derivata è in senso distribuzionale su $\mathcal{D}(T_1) = H^1(\mathbb{R})$.

Proposizione 1.1.7. 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 1.1.8. 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 1.1.9. 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 $\{\psi \in \mathcal{H} | f_\psi \text{ è limitato}\} = \{\psi \in \mathcal{H} | \sup_{\phi \in \mathcal{D}(T)} \frac{|\langle \psi, T\phi \rangle|}{\|\phi\|} < \infty\} = \mathcal{D}(T^*)$. Posso quindi utilizzare il teorema di rappresentazione di Riesz su $\mathcal{D}(T^*)$ per definire l'aggiunto di T .

Definizione 1.1.10. 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 1.1.11. *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 1.1.12. Diremo che un operatore T è *autoaggiunto nel senso di Von Neumann* se $T = T^*$ e $\mathcal{D}(T) = \mathcal{D}(T^*)$.

Osservazione 1.1.13. 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 $\mathcal{D}(T_{opt}) = H^1(\mathbb{R})$.

Operatore posizione: Tornando all'esempio dell'operatore posizione $(X_m\psi)(x) = x_m\psi(x)$ su $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ con $\mathcal{D}(X_m) = \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ è simmetrico ma non autoaggiunto, il dominio infatti non è massimale, possiamo provare quindi ad estenderlo ad un dominio più grande $\mathcal{D}(X_m) := \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^d) \mid \int_{\mathbb{R}} |x|^2 |\psi(x)|^2 dx < \infty\}$, con questo dominio l'operatore è autoaggiunto. Vale la pena notare che questo procedimento non sempre è funzionale e non sempre si ottiene un operatore autoaggiunto, esistono però due criteri di esistenza di estensioni autoaggiunte: il criterio di Von Neumann e il criterio di Nelson, l'operatore posizione in questo caso soddisfa il primo. Più in generale sia $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ una funzione misurabile allora l'operatore moltiplicazione per f definito da $(M_f\psi)(x) = f(x)\psi(x)$ è autoaggiunto se pongo $\mathcal{D}(M_f) := \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^d) \mid \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|^2 |\psi(x)|^2 dx < \infty\}$.

1.2 Teoria spettrale su $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$

Il teorema spettrale per operatori finito dimensionali si generalizza al caso di operatori autoaggiunti in tre modi equivalenti:

Spettralizzazione:

Teorema 1.2.1. *Sia \mathcal{H} spazio di Hilbert complesso separabile $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow \mathcal{H}$ autoaggiunto (non necessariamente limitato). Allora esistono:*

1. Uno spazio misurabile (X, μ) .
2. Una funzione $\lambda : X \rightarrow \mathbb{C}$ μ -misurabile.
3. Una mappa unitaria $U : \mathcal{H} \rightarrow L^2(X, d\mu)$ tale che $(UAU^{-1}\psi)(x) = \lambda(x)\psi(x)$ per ogni $\psi \in \mathcal{D}(U) := \{\psi \in L^2(X, d\mu) \mid \lambda\psi \in L^2(X, d\mu)\}$ o equivalentemente che $UAU^{-1} = M_\lambda$.

Nota che in questo caso si è scelto $\lambda : X \rightarrow \mathbb{C}$ e non $\lambda : X \rightarrow \mathbb{R}$, questo perché in generale non è detto che λ sia reale, valendo il teorema anche per A unitari e antiautoaggiunti.

Esempio 1.2.2. 1.

Calcolo funzionale:

Teorema 1.2.3. *Sia A operatore autoaggiunto su \mathcal{H} . Esiste unica la mappa $\hat{\Phi}_A : M_b(\mathbb{R}) \rightarrow \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ tale che:*

1. $\hat{\Phi}_A$ è uno $*$ -omomorfismo di $*$ -algebra
2. $\hat{\Phi}_A$ è continuo rispetto alla norma $\|\hat{\Phi}_A(f)\|_{\mathfrak{B}(\mathcal{H})} \leq \|f\|_\infty$
3. A è $\hat{\Phi}_A$ -approssimabile in senso debole: Sia $h_n(x) \rightarrow x$ as $n \rightarrow \infty$ then for any $\psi \in \mathcal{D}(A)$ we have $\lim_{n \rightarrow \infty} \hat{\Phi}_A(h_n)\psi \rightarrow A\psi$
4. Se $h_n(x) \rightarrow h(x)$ puntualmente allora $\hat{\Phi}_A(h_n) \rightarrow \hat{\Phi}_A(h)$ in topologia forte.
5. Se ψ è autovettore di A e vale $A\psi = \lambda\psi$ allora $\hat{\Phi}_A(h)\psi = h(\lambda)\psi$
6. Se h è una funzione positiva allora $\hat{\Phi}_A(h)$ è positivo in senso operatoriale.

Corollario 1.2.4. *Sia A operatore autoaggiunto su \mathcal{H} e $f_t(s) = e^{-its}$ allora $\hat{\Phi}_A(f_t) = U(t) := e^{-itA}$ è unitario e vale $U(t)U(s) = U(t+s)$.*

Corollario 1.2.5. *Sia $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ misurabile $f(s) := \chi_\Omega(s)$ allora $\hat{\Phi}_A(f) = E_\Omega$ è un proiettore ortogonale.*

Le dimostrazioni dei corollari vengono dirette data la definizione di $*$ -omomorfismo.

Integrazione rispetto a PVM

Definizione 1.2.6. Sia \mathcal{H} uno spazio di Hilbert complesso separabile, X uno spazio topologico $\mathcal{B}(X)$ la σ -algebra di Borel su X . Un'applicazione $P : \mathcal{B}(X) \rightarrow \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ è detta *misura a valori di proiezione (PVM)* su X se per ogni $E, E' \in \mathcal{B}(X)$ valgono:

1. $P(E)$ è un proiettore ortogonale.
2. $P(\emptyset) = 0$ e $P(X) = \mathbb{1}$.
3. $P(E)P(E') = P(E \cap E')$.
4. Sia $\{E_n\}$ tale che $E_n \cap E_m = \emptyset$ quando $n \neq m$ e $\cup E_n = E$ allora vale $s - \sum P(E_n) = P(E)$

È possibile dimostrare che $P^A(E) := \hat{\Phi}_A(\chi_E)$ è una misura a valori di proiezione chiamata *misura proiettiva associata ad A* .

Ora con questa nozione di misura vogliamo provare ad integrare.

Teorema 1.2.7. *Sia $P^A : \mathcal{B}(X) \rightarrow \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ la PVM di cui sopra, X uno spazio topologico a base numerabile e \mathcal{H} uno spazio di Hilbert, fissati $\psi, \phi \in \mathcal{H}$ si consideri l'applicazione*

$$\mu_{\psi, \phi}^A : \mathcal{B}(X) \ni E \mapsto \langle \psi, \hat{\Phi}_A(\chi_E)\phi \rangle$$

è una misura complessa chiamata *misura spettrale complessa associata a ψ e ϕ* . Se $\psi = \phi$ allora $\mu_\psi^A := \mu_{\psi, \psi}^A$ è una misura positiva finita su X , inoltre per la definizione di PVM che abbiamo dato $\mu_{\psi, \phi}^A(X) = \langle \psi, \phi \rangle$ e in particolare $\mu_\psi^A(X) = \|\psi\|^2$ quindi preso $\|\psi\| = 1$ avremo che μ_ψ^A è una misura di probabilità.

Grazie al precedente teorema possiamo dare un senso concreto all'integrazione rispetto ad una PVM.

Proposizione 1.2.8. *Sia Q una forma quadratica limitata sullo spazio di Hilbert \mathcal{H} allora esiste unico $A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ tale che $Q(\psi) = \langle \psi, A\psi \rangle$ per ogni $\psi \in \mathcal{H}$, se inoltre $Q(\psi) \in \mathbb{R}$ per ogni $\psi \in \mathcal{H}$ A è un operatore autoaggiunto.*

Dimostrazione. * Poichè Q è limitata anche la forma sesquilineare L associata a Q è limitata, possiamo applicare il teorema di Riesz al funzionale $\phi \mapsto L(\psi, \phi)$ per cui esiste unico $\chi \in \mathcal{H}$ tale che $L(\psi, \phi) = \langle \chi, \phi \rangle$. Definendo ora $B\psi := \chi$ e prendendone l'aggiunto avremo l'operatore cercato. Se inoltre Q reale avremo che $\langle \psi | A\phi \rangle = L(\psi, \phi) = \overline{L(\psi, \phi)} = \overline{\langle \psi | A\phi \rangle} = \langle A\psi | \phi \rangle$ \square

Sia $f : X \rightarrow \mathbf{C}$ limitata e misurabile, consideriamo ora la mappa $Q_f : \mathcal{H} \rightarrow \mathbf{C}$ definita :

$$Q_f(\psi) = \int_X f(x) d\mu_\psi^A(x)$$

Per prima cosa notiamo che $Q_f(\psi) \leq \|f\|_\infty \|\psi\|^2$ per le osservazioni sopra, quindi per la precedente proposizione esiste B tale che $Q_f(\psi) = \langle \psi, B\psi \rangle$ è possibile dimostrare che B soddisfa le prime 4 ipotesi del teorema 1.2.3 per cui vale $B = \hat{\Phi}_A(f)$. Introduciamo ora la seguente notazione

$$f(A) = \int_X f(\lambda) dE(\lambda)$$

Ora con questa nuova notazione possiamo generalizzare le due versioni precedenti del teorema spettrale, abbiamo visto che se $f \in M_b(X)$ allora ha per dominio tutto \mathcal{H} per generalizzare al caso in cui $g \in M(X)$ dobbiamo per prima cosa definire un dominio per l'operatore $g(A)$ per avere un integrale ben definito

$$\mathcal{D}(g(A)) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid \bar{g}g \in L^1(X, d\mu_\psi^A)\}$$

a questo punto possiamo definire in maniera naturale

$$\langle \psi g(A) \phi \rangle = \int_X g(\lambda) d\mu_\psi(\lambda)$$

Possiamo ora enunciare il teorema spettrale per le PVM

Teorema 1.2.9. *Sia A operatore autoaggiunto sullo spazio di Hilbert \mathcal{H} (non necessariamente limitato) allora esiste unica PVM $P^A : \mathcal{B}(X) \rightarrow \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ tale che*

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP^A(\lambda)$$

Definizione 1.2.10. Un operatore lineare $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow \mathcal{H}$ in \mathcal{H} spazio di Hilbert è detto *hermitiano* se per ogni $\psi, \phi \in \mathcal{D}(A)$ vale $\langle \psi, A\phi \rangle = \langle A\psi, \phi \rangle$.

Come sappiamo dalla fisica sperimentale l'incertezza associata ad una misura è data dalla sua deviazione standard, la radice quadrata della varianza, che nel nostro linguaggio diventa $\sigma_\psi(A) := \|(A - \langle A \rangle_\psi \mathbf{1})\psi\|$. Come abbiamo visto a tutte le procedure di misurazione è associato un operatore Hermitiano in funzione della definizione di sopra e dello scorso lemma possiamo enunciare quello che in fisica viene conosciuto come principio di indeterminazione di Heisenberg e che in matematica prende un senso più generale e che nella nostra interpretazione diventa un teorema.

Teorema 1.2.11. *Siano A, B operatori hermitiani in \mathcal{H} (non per forza limitati) che ammettono un dominio comune invariante denso S in \mathcal{H} allora per ogni $\psi \in S$ vale*

$$\sigma_\psi(A)\sigma_\psi(B) \geq \frac{1}{2}|\langle \psi, [A, B]\psi \rangle|$$

Dimostrazione. Sia $\psi \in S$ fissato. Definiamo gli operatori centrati $\tilde{A} = A - \langle A \rangle_\psi \mathbf{1}$ e $\tilde{B} = B - \langle B \rangle_\psi \mathbf{1}$, per prima cosa notiamo che $[\tilde{A}, \tilde{B}] = [A, B]$ poichè ogni operatore commuta con l'identità e similmente che \tilde{A}, \tilde{B} sono ancora hermitiani in quanto differenza di operatori hermitiani e linearità del prodotto scalare. Ricordando che abbiamo definito $\sigma_\psi(A) = \|\tilde{A}\psi\|$ abbiamo:

$$\begin{aligned} \langle \psi | [A, B] \psi \rangle &= \langle \psi | [\tilde{A}, \tilde{B}] \psi \rangle = \langle \psi | \tilde{A}\tilde{B}\psi \rangle - \langle \psi | \tilde{B}\tilde{A}\psi \rangle = \\ &= \langle \tilde{A}\psi | \tilde{B}\psi \rangle - \langle \tilde{B}\psi | \tilde{A}\psi \rangle = \langle \tilde{A}\psi | \tilde{B}\psi \rangle - \overline{\langle \tilde{A}\psi | \tilde{B}\psi \rangle} = 2i \operatorname{Im} \langle \tilde{A}\psi | \tilde{B}\psi \rangle \end{aligned}$$

Ma allora vale:

$$\frac{1}{2}|\langle \psi | [A, B] \psi \rangle| = |\operatorname{Im} \langle \tilde{A}\psi | \tilde{B}\psi \rangle| \leq |\langle \tilde{A}\psi | \tilde{B}\psi \rangle| \leq \|\tilde{A}\psi\| \|\tilde{B}\psi\| = \sigma_\psi(A)\sigma_\psi(B)$$

□

Corollario 1.2.12. *Sia $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, presi come operatori X_i e P_j e come dominio comune invariante denso $S = \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dal teorema precedente segue che:*

$$\sigma_\psi(X_i)\sigma_\psi(P_j) \geq \frac{1}{2}|\langle \psi, [X_i, P_j]\psi \rangle| = \frac{\hbar}{2}\delta_{ij}\|\psi\|$$

Corollario 1.2.13. *Sia $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, presi come operatori H_0 e P_j e come dominio comune invariante denso $S = \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dal teorema precedente segue che:*

$$\sigma_\psi(H_0)\sigma_\psi(P_j) \geq \frac{1}{2}|\langle \psi, [H_0, P_j]\psi \rangle| = 0$$

Per Liebnitz.

Corollario 1.2.14. *Sia $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, presi come operatori H_0 e X_i e come dominio comune invariante denso $S = \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dal teorema precedente segue che:*

$$\sigma_\psi(H_0)\sigma_\psi(X_i) \geq \frac{1}{2}|\langle \psi, [H_0, X_i]\psi \rangle| = |\langle \psi, \frac{\hbar}{m}P_i\psi \rangle|$$

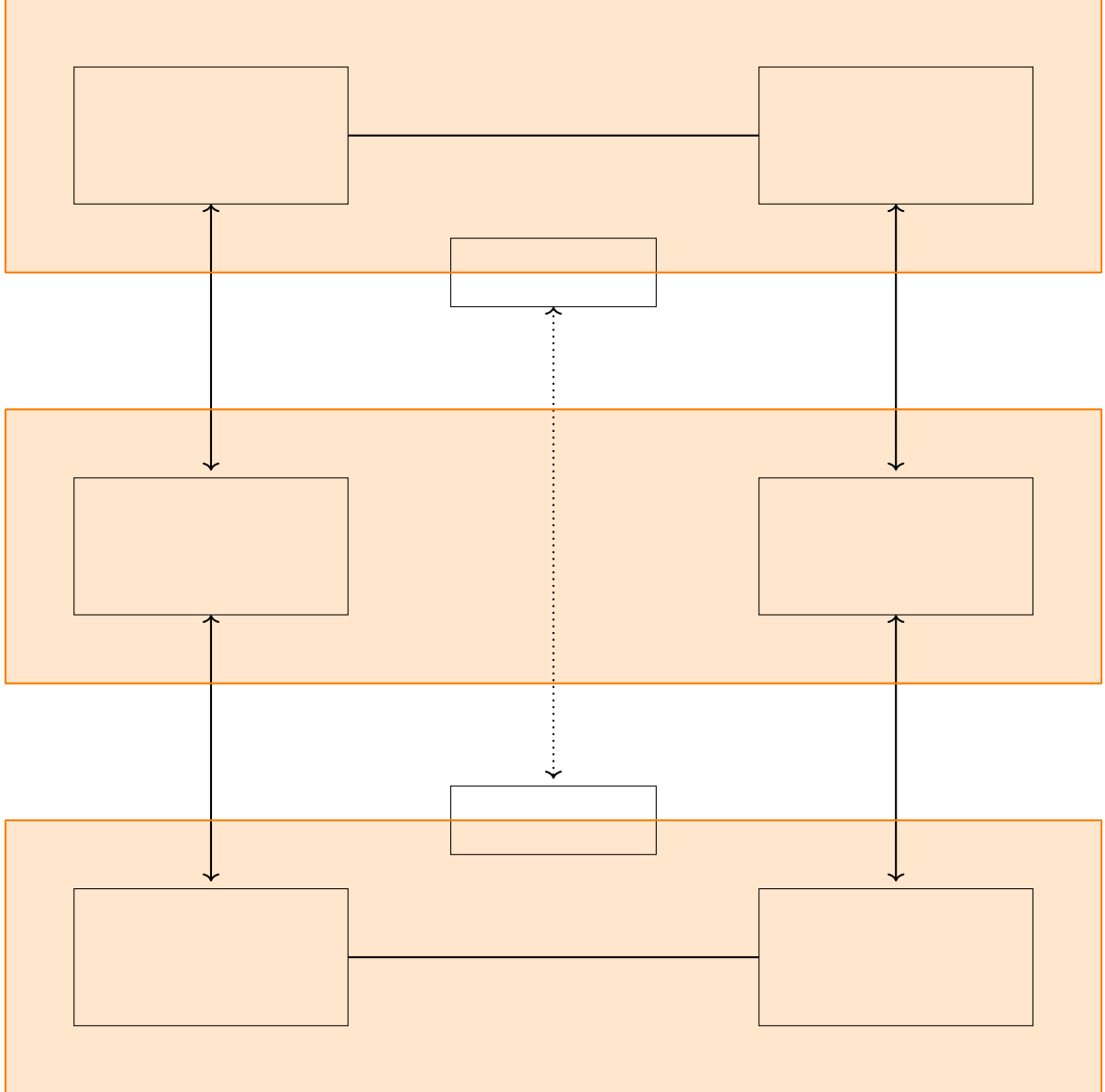
Dimostrazione. Poichè vale la relazione $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ possiamo scrivere

$$\begin{aligned} [H_0, X_i] &= \sum \frac{1}{2m}[P_j^2, X_i] = \sum \frac{1}{2m}[P_j, X_i]P_j + \sum \frac{1}{2m}P_j[P_j, X_i] = \\ &= \sum \frac{1}{2m}(-2i\hbar\delta_{ij})P_j = -i\frac{\hbar}{m}P_i \end{aligned}$$

□

1.3 La struttura teorica della meccanica quantistica

Per poter creare una teoria matematica della meccanica quantistica dobbiamo prima interpretare la cosa che in fisica è la più importante, la struttura sperimentale.



Di tutte le possibili misurazioni per prima cosa ci ridurremo a quelle che riguardano *proposizioni elementari* che definiranno come le proposizioni esprimibili nel sistema fisico che nella singola ripetizione possono essere o vere o false. Per esempio in meccanica classica data una particella in \mathbb{R}^3 una proposizione elementare può essere costruita per ogni $\Omega \in \mathbb{R}^3$ come $e_\Omega :=$ "la particella è vincolata in Ω ". Per semplicità inizieremo a studiare lo schema in figura prima dal punto di vista classico e poi proveremo a crearne una versione coerente con l'odierna interpretazione della meccanica quantistica.

In meccanica classica, nello specifico in meccanica hamiltoniana, un sistema classico con d gradi di libertà spaziali è definito su una varietà \mathbb{R}^{2d} , più nello specifico è descritto in una varietà simplettica $2d$ -dimensionale \mathcal{M} . Uno stato fisico è rappresentato in questa

interpretazione da un punto su \mathcal{M} $x = (q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n)$. Ogni osservabile classico può essere interpretato come una funzione liscia $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$, nell'esempio di prima e_Ω è associata alla funzione caratteristica dell'insieme. L'evoluzione di uno stato fisico è descritto da una curva $x(t) \in \mathcal{M}$ che soddisfa l'equazione

$$\dot{x}(t) = X_H(x(t))$$

dove X_H è il gradiente symplettico associato alla funzione $H \in C^\infty(\mathcal{M})$ energia meccanica. In questa generalizzazione l'equazione sopra in coordinate diventa il noto sistema di equazioni :

$$\begin{aligned} \frac{dq^i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q^i} \end{aligned}$$

È importante notare che l'esatta informazione iniziale di un sistema classico è un concetto di cui ha poco senso parlare a causa della finita precisione degli strumenti di misura, è possibile quindi generalizzare leggermente la teoria utilizzando al posto di un punto esatto una distribuzione di probabilità sulla varietà \mathcal{M} e descrivendo l'evoluzione temporale con quella che viene chiamata equazione di Liouville

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0$$

È importante notare come la meccanica classica la conoscenza di un sistema è informazione, ossia conoscendo un esatto punto nella varietà, e quindi gli esatti dati di uno stato ad un certo tempo t , possiamo descrivere l'evoluzione temporale (passata e futura) del sistema fisico, come vedremo dopo nel caso della meccanica quantistica questo approccio non è utilizzabile.

Ora proveremo a ricreare una struttura simile nell'ottica della meccanica quantistica, per prima cosa è necessario dare un senso al concetto di stato in meccanica quantistica, infatti non essendo possibile "conoscere" le informazioni necessarie a descrivere un sistema quantistico completamente viene introdotto in fisica sperimentale un nuovo approccio quello operativo. Non vengono più misurate le proprietà di un sistema fisico viene invece preparato un sistema fisico con tali proprietà. Sarebbe come se in meccanica classica al posto di misurare posizione e momento di una particella la si preparasse in una certa posizione con un certo momento e si studiasse dopo la sua evoluzione temporale. Possiamo dare una definizione naive di stato di questo tipo "uno stato è una classe di equivalenza tra procedure di preparazione che portano il sistema in una certa condizione e che differiscono tra loro per dettagli inessenziali" è importante notare che non è fatto ovvio cosa siano questi "dettagli inessenziali", spesso infatti vengono decisi a posteriori dell'esperimento.

1. **Spazio degli stati:** *In meccanica quantistica ad ogni sistema fisico corrisponde uno spazio di Hilbert complesso separabile \mathcal{H} , ad ogni stato del sistema fisico corrisponde un raggio proiettivo in \mathcal{H} . Negli esempi visti da noi in precedenza una particella in \mathbb{R}^d è descritta da $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, nel caso di due particelle lo spazio di Hilbert sarà $L^2(\mathbb{R}_x^d \times \mathbb{R}_y^d)$. E abbiamo definito gli stati come $[\psi] = \{\lambda\psi : \lambda \in \mathbb{C}, \lambda \neq 0\} \in \mathbb{P}\mathcal{H}$.*

2. **Proposizioni elementari:** *Ad ogni proposizione elementare e corrisponde un sottospazio lineare chiuso \mathcal{D}_e o equivalentemente un proiettore ortogonale autoaggiunto E_e su \mathcal{H}*
3. **Stato dopo una misurazione :** *Immediatamente dopo la misurazione di una proposizione elementare e lo stato del sistema è identificato dal raggio proiettivo*

$$\psi_e = \frac{\langle \psi | E_e | \psi \rangle}{\|\psi\|_2}$$
4. **Evoluzione temporale:** *Al sistema quantistico è associato un operatore lineare autoaggiunto H su \mathcal{H} chiamato Hamiltoniana, l'evoluzione temporale di uno stato ψ è descritta dall'equazione di Schrödinger:*

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi = H\psi$$

Vale la pena introdurre adesso un concetto che riprenderemo in futuro, abbiamo infatti dato le regole interpretative della meccanica quantistica in un caso molto specifico quello delle proposizioni elementari su stati puri, la generalizzazione delle regole sopra prende una forma del tipo (seguendo [1]):

1. **Spazio degli stati:** *Ad ogni sistema quantistico S è associato un sottoinsieme del reticolo ([1] Sez. 7.2.6) $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ di proiettori ortogonali su \mathcal{H}_S spazio di Hilbert complesso e separabile. Uno stato ρ di S è un operatore classe traccia positivo con traccia unitaria*
2. **Proposizioni:** *La probabilità che una proposizione $P \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ sia vera in uno stato ρ è data da $\text{tr}(\rho P)$*
3. **Stato dopo una misurazione:** *Se il sistema quantistico S è in uno stato ρ e una proposizione $P \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ è vera allora il sistema quantistico immediatamente dopo è:*

$$\rho_P = \frac{P\rho P}{\text{tr}(\rho P)}$$

4. **Evoluzione temporale:** *Al sistema quantistico S è associato un operatore autoaggiunto H su \mathcal{H}_S chiamato hamiltoniano del sistema, posto $U_t = e^{-iHt/\hbar}$ l'evoluzione temporale di uno stato ρ_{t_0} è descritta dall'equazione*

$$\rho_{t_0+t} = U_t \rho_{t_0} U_t^{-1}$$

Definizione 1.3.1. Sia X spazio normato su \mathbb{C} o \mathbb{R} diremo che $P \in \mathfrak{B}(X)$ è un *proiettore* se è idempotente, ossia $P^2 = P$.

Definizione 1.3.2. Se \mathcal{H} è spazio di Hilbert diremo che $P \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ è un *proiettore ortogonale* se è un proiettore e $P^* = P$.

Proposizione 1.3.3. Sia \mathcal{H} spazio di Hilbert e $P \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ proiettore ortogonale che proietta su M sottospazio di \mathcal{H} allora:

1. Il proiettore $Q := \mathbb{1} - P$ è ancora un proiettore ortogonale e proietta sul sottospazio M^\perp tale che $\mathcal{H} = M \oplus M^\perp$.

Fino a questo punto abbiamo sempre incontrato in meccanica quantistica operatori autoaggiunti che descrivono le proprietà fisiche del sistema vediamo ora come questi rientrano nelle regole interpretative che abbiamo dato, creeremo infatti a partire dai proiettori ortogonali degli operatori autoaggiunti.

Partiamo con il notare che noi abbiamo introdotto il concetto di proposizione elementare in maniera molto generica, includendo anche tutte le possibili proposizioni elementari associabili ad un osservabile, possiamo infatti includere tutte quelle proposizioni del tipo $e_\Omega^{(A)} :=$ "il valore dell'osservabile A cade nell'insieme Ω ". Sia ora A osservabile (in senso fisico), il valore di aspettazione di una misurazione di A è definito come $\langle A \rangle := \sum \alpha_j P_j$ con $\{\alpha_j\}$ il valore della misura e P_j la probabilità che la misura dia quel valore (o equivalentemente che $e_{\alpha_j}^{(A)}$ sia vera). Avremo per quindi per le regole sopra

$$\langle A \rangle = \sum \alpha_j \mathbb{P}(e_{\alpha_j}^{(A)} \text{ vera} | \psi) = \sum \alpha_j \langle \psi | E_j \psi \rangle = \langle \psi | (\sum \alpha_j E_j) \psi \rangle =: \langle \psi | A \psi \rangle.$$

È immediato verificare che A è autoaggiunto, infatti $A = A^* = (\sum \alpha_j E_j)^* = \sum \alpha_j E_j^* = \sum \alpha_j E_j = A$ e per il momento considerando il caso "reale" avremo che $A \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ poiché qualsiasi strumento di misura ha una accuratezza finita e quindi un fondoscala limitato. Abbiamo quindi associato un operatore autoaggiunto ad una generica procedura di misurazione, nota bene che non abbiamo ancora associato un osservabile ad un operatore. Sia ad esempio P l'osservabile quantità di moto, abbiamo creato un P_r reale in cui la misurazione ricade in un intervallo finito $[a, b]$, possiamo ovviamente creare una nuova procedura di misurazione $P_{r'}$ di fondoscala $[b, c]$ e avanti così ma non potremmo mai creare uno strumento con fondoscala infinito, cosa che però teoricamente è possibile osservare. Per ottenere osservabili universali sarà quindi necessario abbandonare gli operatori limitati e passare a quelli non limitati.

Esempio 1.3.4. Introduciamo ora qualche esempio di operatore illimitato che descrive quantità osservabili:

1. **Posizione:** Partiamo con il definire l'operatore posizione, per tutti gli altri operatori il procedimento è simile, ipotizziamo dei rivelatori di posizione che misurano la posizione su \mathbb{R} della particella in un intervallo Ω_j possiamo definire un operatore posizione come:

$$\langle x \rangle = \sum x_j P_j = \sum x_j \int_{\Omega_j} |\psi(x)|^2 dx = \sum x_j \langle \psi | E_{\Omega_j} \psi \rangle = \langle \psi | (\sum x_j E_{\Omega_j}) \psi \rangle$$

nel limite in cui Ω_j diventa un singoletto otteniamo l'operatore posizione definito quindi come (generalizzandolo in maniera ovvia a \mathbb{R}^d):

$$(X_j \psi)(x) = x_j \psi(x)$$

2. **Energia cinetica:** L'operatore energia cinetica nella notazione ereditata dalla teoria dell'onda di materia è:

$$\int_{\mathbb{R}^d} \hbar \omega(k) |\hat{\psi}(k)|^2 dk = \langle \psi | (-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2) \psi \rangle =: \langle \psi | H_0 \psi \rangle$$

3. **Energia potenziale:** L'operatore energia potenziale è:

$$\int_{\mathbb{R}^d} V(x) |\psi(x)|^2 dx = \langle \psi | M_V \psi \rangle$$

che già nell'esempio facile dell'atomo di idrogeno con il potenziale coulombiano $V(x) = -\alpha/|x|$ si ha che M_V non è limitato in $L^2(\mathbb{R}^d)$.

4. **Momento:** L'operatore momento come abbiamo visto è definito da:

$$\int_{\mathbb{R}^d} \hbar k_j |\hat{\psi}(k)|^2 dk = \langle \hat{\psi} | M_{\hbar k_j} \hat{\psi} \rangle = \langle \psi | \mathcal{F}^{-1} M_{\hbar k_j} \mathcal{F} \psi \rangle = \langle \psi | -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi \rangle =: \langle \psi | P_j \psi \rangle$$

Con un metodo simile a quello utilizzato prima possiamo anche calcolare la varianza empirica della procedura di misurazione, supponendo che gli E_j siano mutuamente ortogonali, o equivalentemente che le proposizioni sul sistema diano mutualmente esclusive possiamo scrivere

$$Var\langle A \rangle = \sum \alpha_j^2 P_j - \langle A \rangle^2 \simeq \sum \alpha_j^2 P_j - \langle \psi | A \psi \rangle$$

è possibile dare un senso anche al primo termine nell'ipotesi di ortogonalità abbiamo infatti

$$\begin{aligned} \sum \alpha_j^2 P_j &= \sum \alpha_j^2 \mathbb{P}(e_{\alpha_j}^{(A)} \text{ vera} | \psi) = \sum \alpha_j^2 \langle \psi | E_j \psi \rangle = \langle \psi | (\sum \alpha_j^2 E_j) \psi \rangle = \\ &= \langle \psi | (\sum \alpha_j \alpha_i \delta_{ij} E_j E_i) \psi \rangle = \langle \psi | (\sum \alpha_j E_j)^2 \psi \rangle = \langle \psi | A^2 \psi \rangle \end{aligned}$$

e quindi possiamo scrivere

$$Var\langle A \rangle = \langle \psi | A^2 \psi \rangle - \langle \psi | A \psi \rangle^2$$

Iniziamo ora a fare il lavoro di astrazione necessario per poter definire degli operatori associati a osservabili fisici.

Definizione 1.3.5. Sia X spazio di Banach. Un operatore su E è una coppia $\mathcal{D}(T), T$ dove $\mathcal{D}(T) \subseteq X$ è un sottoinsieme chiamato dominio di T e $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow X$ è una mappa lineare.

Definizione 1.3.6. Un operatore T su uno spazio di Banach E si dice *limitato* se $\mathcal{D}(T) = E$ e 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 1.3.7. Un operatore T su E si dice *illimitato* se non è limitato.

Tali operatori sono tipicamente definiti su un sottoinsieme denso $\mathcal{D}(T) \subset E$.

Fondamentale nella descrizione della meccanica quantistica la caratteristica degli operatori, limitati e non, di non commutare tra loro, per comodità notazionale definiremo il commutatore come $[A, B] := AB - BA$ è immediato vedere come, dati $A, B \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ allora $[A, B] \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ viceversa, non essendo gli operatori limitati un ideale bilatero avremo che se almeno uno non è in $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$ avremo che $[A, B] \notin \mathfrak{B}(\mathcal{H})$. Essendo $[A, B]$ ancora un operatore è importante studiarne il dominio, avremo infatti in maniera naturale $\mathcal{D}([A, B]) := \{\psi \in \mathcal{H} \mid B\psi \in \mathcal{D}(A) \wedge A\psi \in \mathcal{D}(B)\}$ il problema è che nel caso di tanti domini nidificati potrebbe essere che $\mathcal{D}([A_1, [A_2, [A_3, \dots]]]) = 0$ per questo si è soliti lavorare con quelli che vengono chiamati domini comuni ($S \subseteq \cap_j \{A_j\}$) e invarianti ($A_j(S) \subseteq S$) densi, capiterà quasi sempre che se $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$ il dominio comune invariante denso utilizzato sarà $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$. Possiamo, con queste osservazioni, enunciare un lemma sulla non commutatività degli operatori posizione e momento.

Lemma 1.3.8. *Sia $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, preso $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ come dominio comune invariante denso avremo che per ogni $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ vale:*

$$[X_j, P_i]\psi = i\hbar\delta_{ij} \mathbf{1} \psi$$

Dimostrazione. Abbiamo che:

$$\begin{aligned} (P_i(X_j\psi))(x) &= (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i})(x_j\psi(x)) = -i\hbar \frac{\partial x_j}{\partial x_i} \psi(x) + x_j(-i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_i}) = \\ &= -i\hbar\delta_{ij} \mathbf{1} \psi(x) + (X_j(P_i\psi))(x) \end{aligned}$$

Da cui la tesi. □

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.

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:** $\hat{\mathbb{R}}^d \simeq \hat{E}^d \ni k, \xi, \alpha, \beta$ con $[k] = [\xi] = [\alpha] = [\beta] = L^{-1}$ inverso della lunghezza.

Definizione 1.3.9. 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:

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

Definiremo le seguenti applicazioni, dati $a \in \mathbb{R}^d$, $\alpha \in \hat{\mathbb{R}}^d$ 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 1.3.10. 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 è 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 1.3.11 (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 $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ 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 $\mathcal{F}\mathcal{F}_- = \mathbb{1}_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)}$ e che l'estensione dell'identità è unica vale anche $\mathcal{F}\mathcal{F}_- = \mathbb{1}_{L^2}$. In maniera formale avremo che:

Teorema 1.3.12. *Lo spazio di Schwartz è invariante sotto l'azione della trasformata e l'antitrasformata di Fourier, le due trasformazioni ristrette a $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ sono una l'inversa dell'altra e sono isometrie per il prodotto scalare di $L^2(\mathbb{R}^d)$.*

La seguente dimostrazione è presa da [1]

Dimostrazione. * Dimostriamo ora per \mathcal{F} , il risultato per \mathcal{F}_- è analogo.

È immediato 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 $M_\alpha(x) = x^\alpha f(x)$ l'operatore moltiplicativo.

Poiché $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, 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:

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

Notando che f si annulla più rapidamente di ogni potenza inversa di $|x|$ per $|x| \rightarrow +\infty$, si trova che:

$$M_\beta(k) \hat{f}(k) = \int_{\mathbb{R}^n} (-i)^{|\beta|} \partial_x^\beta \left(\frac{e^{ik \cdot x}}{(2\pi)^{n/2}} \right) f(x) dx,$$

e quindi, usando l'integrazione per parti:

$$M_\beta(k) \hat{f}(k) = i^{|\beta|} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{e^{ik \cdot x}}{(2\pi)^{n/2}} \partial_x^\beta f(x) dx.$$

Quindi, inserendo $\partial_k^\alpha g$ al posto della funzione g in (3.64) e tenendo conto di (a), si ha:

$$|M_\beta(k) \partial_k^\alpha \hat{f}(k)| \leq |\partial^\beta (M_\alpha f)|_1,$$

per ogni $k \in \mathbb{R}^n$. Essendo finito il secondo membro, in quanto $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, ed essendo α e β arbitrari, concludiamo che $\hat{f} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$.

Possiamo riscrivere le equazioni sopra come:

$$\partial^\alpha \mathcal{F} = i^{|\alpha|} \mathcal{F} M_\alpha,$$

$$M_\beta \mathcal{F} = i^{|\beta|} \mathcal{F} \partial^\beta,$$

dove \mathcal{F} è in realtà la restrizione della trasformata di Fourier a $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Osservando che:

$$\mathcal{F}h = \mathcal{F}_-h \quad \text{per ogni } h \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n),$$

si ricava facilmente:

$$\begin{aligned}\partial^\alpha \mathcal{F}_- &= (-1)^{|\alpha|} i^{|\alpha|} \mathcal{F}_- M_\alpha, \\ M_\beta \mathcal{F}_- &= (-1)^{|\beta|} i^{|\beta|} \mathcal{F}_- \partial^\beta.\end{aligned}$$

Abbiamo dimostrato in particolare che valgono le seguenti:

$$\begin{aligned}\mathcal{F} \mathcal{F}_- M_\alpha &= M_\alpha \mathcal{F} \mathcal{F}_-, \\ \mathcal{F}_- \mathcal{F} M_\alpha &= M_\alpha \mathcal{F}_- \mathcal{F},\end{aligned}$$

e anche

$$\begin{aligned}\mathcal{F} \mathcal{F}_- \partial^\alpha &= \partial^\alpha \mathcal{F} \mathcal{F}_-, \\ \mathcal{F}_- \mathcal{F} \partial^\alpha &= \partial^\alpha \mathcal{F}_- \mathcal{F}.\end{aligned}$$

Mostreremo ora che, in virtù di tali relazioni di commutazione, gli operatori

$$J := \mathcal{F} \mathcal{F}_- \quad \text{e} \quad J_- := \mathcal{F}_- \mathcal{F}$$

devono essere l'operatore identità di $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Per prima cosa proviamo che, fissati $x_0 \in \mathbb{R}^n$ e $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, il valore di $(Jf)(x_0)$ dipende solo da $f(x_0)$. Se $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ possiamo sempre scrivere:

$$f(x) = f(x_0) + \int_0^1 \frac{df}{dt} dt = f(x_0) + \sum_{i=1}^n (x_i - x_{0i}) g_i(x),$$

dove le funzioni g_i (che sono $C^\infty(\mathbb{R}^n)$, come si verifica facilmente) sono definite da:

$$g_i(x) := \frac{\partial}{\partial x_i} \int_0^1 f(x_0 + t(x - x_0)) dt.$$

Applicando J ad ambo i membri di questa decomposizione e tenendo conto del fatto che J commuta con i polinomi in x per (3.69), otteniamo:

$$(Jf_1)(x) = (Jf_2)(x) + \sum_{i=1}^n (x_i - x_{0i}) (Jg_i)(x).$$

Prendendo $x = x_0$, si vede che $(Jf_1)(x_0) = (Jf_2)(x_0)$ sotto l'ipotesi iniziale $f_1(x_0) = f_2(x_0)$. Quindi, come detto, $(Jf)(x_0)$ è una funzione soltanto di $f(x_0)$. Tale funzione deve essere anche lineare, dato che J è lineare per costruzione. Ne consegue che sarà:

$$(Jf)(x_0) = j(x_0) f(x_0),$$

dove j è una funzione su \mathbb{R}^n a valori in \mathbb{C} . Poichè x_0 è arbitrario allora abbiamo provato che J agisce come la moltiplicazione per una funzione j . È poi immediato verificare che tutte le derivate di j sono nulle e calcolando la trasformata di Fourier della gaussiana si ottiene che tale costante è proprio 1. □

Teorema 1.3.13 (Estensione limitata). *Siano E_1, E_2 spazi di Banach, D un sottoinsieme denso di E_1 e $T : D \rightarrow E_2$ un operatore lineare prelimitato (ossia $\|T\psi\| \leq c\|\psi\|$ per ogni $\psi \in D$). Allora esiste un'unica estensione lineare e continua $\tilde{T} : E_1 \rightarrow E_2$ tale che $\|\tilde{T}\psi\| \leq c\|\psi\|$*

La dimostrazione di questo teorema è nota. Ma ci permette ora, sapendo che $\|\mathcal{F}_{\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)}\psi\|_{L^2} = \|\psi\|_{L^2}$ per ogni $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ di estendere la trasformata di Fourier a tutto $L^2(\mathbb{R}^d)$ e di estendere la sua inversa, l'antitrasformata, su $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ all'inversa su $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Teorema 1.3.14 (Fourier-Plancherel). *La trasformata di Fourier si estende per linearità e continuità ad una mappa lineare $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d)$ tale che:*

1. *Preserva il prodotto hermitiano.*
2. *È una isometria.*
3. *È suriettiva.*

Dimostrazione. * La dimostrazione è immediata dal Teorema 1.3.12 e dai commenti ad inizio sezione. \square

3. Ottica ondulatoria ed equazione delle onde

Definizione 1.3.15. Chiameremo equazione delle onde il sistema:

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

con condizioni iniziali $u(0, x) = u_0(x)$, $\frac{\partial u}{\partial t}(0, x) = v_0(x)$. Incognita: $u : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ tale che $(t, x) \mapsto u(t, x)$.

Una *soluzione* dell'equazione delle onde è una funzione $u : \mathbb{R} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d) = \mathcal{H}$ che a t associa $u(t, \cdot)$. Scegliamo $u(t, \cdot)$ a valori in $L^2(\mathbb{R}^d)$ perchè è uno spazio di Hilbert ed è dotato di una buona teoria di Fourier. Una buona soluzione deve essere tale che:

- Deve avere regolarità nel tempo:

$$\partial_t u(t, \cdot) = L^2 - \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u(t+h, \cdot) - u(t, \cdot)}{h}$$

se ipotizziamo una funzione g come derivata prima dobbiamo controllare che

$$\left\| \frac{u(t+h, \cdot) - u(t, \cdot)}{h} - g \right\|_{L^2} \rightarrow 0$$

, si parla quindi di derivabilità quasi ovunque.

- $\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \Delta u$ notiamo subito che non è sempre vero che $\Delta u \in L^2$ introduciamo quindi lo spazio $\mathcal{H}^s(\mathbb{R}^d) := \{f \in L^2(\mathbb{R}^d) : \int_{\mathbb{R}^d} (1 + |k|^2)^s |\hat{f}(k)|^2 dk < \infty\}$ con $s \in \mathbb{R}$ è possibile dimostrare che la s -esima derivata distribuzionale è integrabile se e solo se $f \in \mathcal{H}^s(\mathbb{R}^d)$. Questi spazi sono inscatolati tra loro e sono tutti densi in $L^2(\mathbb{R}^d)$, vale quindi $L^2(\mathbb{R}^d) \supseteq \mathcal{H}^0(\mathbb{R}^d) \supseteq \mathcal{H}^1(\mathbb{R}^d) \supseteq \mathcal{H}^2(\mathbb{R}^d) \supseteq \dots$

Capitolo 2

Monaco

Definizione 2.0.1. 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} .

2.1 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 2.1.1. *\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 2.1.2. *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 2.1.3. *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 2.1.4. *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 involuante 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 $m \in \{-\ell, \dots, \ell\}$.

Definizione 2.1.5. 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 2.1.6 (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 2.1.7. 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 2.1.8 (Weyl). *Perturbazioni V H_0 -compatte di un operatore autoaggiunto H_0 sono tali che $\sigma_{ess}(H_0 + V) = \sigma_{ess}(H_0)$.*

2.2 Stati puri e stati misti

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

Definizione 2.2.1. 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 2.2.2. *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 2.2.3. 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 2.2.4. 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 dimostreremo per brevità ma che si possono trovare in [1].

Teorema 2.2.5. *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 2.2.6. Una mappa lineare $\mathbb{E} : \mathfrak{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ è detta *una famiglia di valori attesi* se valgono le seguenti:

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

Definizione 2.2.7. 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 2.2.8. 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 $\text{tr}(\rho(A \otimes \mathbb{1})) = \text{tr}(\rho^{(1)}A)$ e $\text{tr}(\rho(\mathbb{1} \otimes B)) = \text{tr}(\rho^{(2)}B)$ 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 2.2.9. 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 $L^2(\mathbb{R}^{nd}) = L^2(\mathbb{R}^d) \hat{\otimes} \dots \hat{\otimes} L^2(\mathbb{R}^d)$. Ora vogliamo generalizzare gli operatori a questi spazi tensore, siano $A_i^* = A_i \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_i)$ 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 $\mathfrak{B}(\mathcal{H}) \ni A^{(i)} := \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes A_i \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}$.
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 2.2.10. 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.