Capitolo 3

Spazi di Hilbert e operatori

Figura 3.1: *David Hilbert (1862-1943)*

Gli spazi vettoriali dotati di prodotto scalare definito positivo e completi, introdotti dal celebre matematico tedesco David Hilbert, rivestono una importanza cruciale nella formulazione della Meccanica quantistica, ma sono altrettanto importanti per applicazioni nei campi più disparati delle scienze matematiche. Su di essi si basano inoltre i costrutti degli spazi di funzioni a quadrato sommabile, che a loro volta sono alla base dell'analisi spettrale di Fourier, fondamentale nello studio di tutti i fenomeni ondulatori, dalle onde sonore, alla radiazione elettromagnetica fino alle funzioni d'onda quantistiche.

Qui daremo una rapidissima introduzione a questi spazi, tralasciando le dimostrazioni dei teoremi più complicati ed elencando i fatti fondamentali utili per gli sviluppi in Meccanica quantistica.

3.1 Spazio vettoriale su $\mathbb{C}$

Definizione. Un insieme $\mathcal{H}$ di elementi, detti vettori, che denoteremo con i simboli $|f\rangle, |g\rangle, |h\rangle, ...$ è detto **spazio vettoriale** sui numeri complessi $\mathbb{C}$, che denoteremo invece con lettere greche $\lambda, \mu, ...$ se in esso sono definite

1. una operazione di **somma** $+ : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ che goda delle proprietà *commutativa*, *associativa*, dell'esistenza di un elemento neutro 0, detto *vettore nullo*, e dell'esistenza, per ogni vettore $|f\rangle$, di un suo *opposto* $|-f\rangle$ *tale che* $|f\rangle + |-f\rangle \equiv |f\rangle - |f\rangle = 0$.

2. un **prodotto per complessi** $\mathbb{C} \times \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ che goda delle proprietà *distributiva*, sia sui vettori $\lambda(|f\rangle + |g\rangle) = \lambda|f\rangle + \lambda|g\rangle$ che sui numeri complessi $(\lambda + \mu)|f\rangle = \lambda|f\rangle + \mu|g\rangle$, associativa $(\lambda\mu)|f\rangle = \lambda(\mu|f\rangle)$ e sia tale che $1|f\rangle = |f\rangle$.

Definizione. Un insieme $\mathcal{S} = \{|f_1\rangle, |f_2\rangle, ..., |f_n\rangle\}$ di vettori in $\mathcal{V}$ si dice linearmente indipendente se

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i |f_i\rangle = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \lambda_i = 0 \quad \forall i$$

Il numero massimo N di vettori linearmente indipendenti si dice dimensione di $\mathcal{H}$ e si scrive $\dim \mathcal{H} = N$. Nel seguito studieremo sia casi in cui N è finito, sia casi di spazi di dimensione infinita.

In uno spazio vettoriale di dimensione finita vale il seguente fondamentale

Teorema. *Esiste un insieme* $\mathcal{S} = \{|f_1\rangle, |f_2\rangle, ..., |f_N\rangle\}$ *di* $N = \dim \mathcal{H}$ *vettori linearmente indipendenti tale che ogni vettore* $|f\rangle \in \mathcal{H}$ *si possa scrivere come una combinazione lineare*

$$|f\rangle = \sum_{n=1}^{N} \lambda_n |f_n\rangle$$

con coefficienti $\lambda_1, ..., \lambda_N$ *univocamente determinati dalla scelta di* $|f\rangle$.

Questo insieme $\mathcal{S}$ è detto costituire una **base** in $\mathcal{H}$.

Se invece $\dim \mathcal{H} = \infty$, lo spazio $\mathcal{H}$ si dice di dimensione infinita e la scrittura

$$\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n |f_n\rangle$$

potrebbe non avere un preciso significato (non convergere a un elemento in $\mathcal{H}$). È necessaro, per trattare spazi infinito-dimensionali, introdurre un preciso concetto di convergenza in $\mathcal{H}$. Ciò può essere realizzato mediante l'introduzione di un prodotto scalare in $\mathcal{H}$, come vedremo nelle prossime sezioni.

Esempio. L'insieme $\mathbb{C}^N$ delle N-ple di numeri complessi, pensate come matrici unicolonnari di lunghezza N a elementi in $\mathbb{C}$, è uno spazio vettoriale di dimensione N, come è facile verificare una volta definita la somma e il prodotto per complessi nella maniera usuale tra matrici

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \vdots \\ a_N + b_N \end{pmatrix} \qquad , \qquad \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda a_1 \\ \lambda a_2 \\ \vdots \\ \lambda a_N \end{pmatrix}$$

Osservazione. Poiché ogni spazio vettoriale finito dimensionale ammette almeno una base, e in questa ogni suo vettore può essere univocamente identificato dai suoi coefficenti, questi ultimi costituiscono un vettore colonna. Si può stabilire così una corrispondenza biunivoca tra i vettori di uno spazio vettoriale finito dimensionale generico e i vettori colonna, che rispetta le proprietà di linearità di somma e prodotto per complessi, cioè è un isomorfismo. Poiché lo spazio dei vettori colonna è costituito in pratica dalle N-ple di numeri complessi, vediamo che qualunque spazio vettoriale complesso finito dimensionale è isomorfo a $\mathbb{C}^N$.

3.2 Spazio a prodotto interno

Definizione. Uno spazio vettoriale $\mathcal{H}$ è uno **spazio a prodotto interno**[1] se in esso è definito un *isomorfismo di aggiunzione* $|\cdot\rangle^\dagger$ che manda ogni vettore *ket*[2] $|f\rangle$ di $\mathcal{H}$ in un corrispondente vettore *bra* $\langle f| \equiv |f\rangle^\dagger$ di uno spazio *duale* denotato con $\mathcal{H}^*$ tale che sia possibile definire una funzione $\mathcal{H}^* \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$, che denoteremo con $\langle f|g\rangle$, detta **prodotto interno** o **prodotto scalare** tale che

1. sia *sesquilineare*, cioè lineare nel secondo argomento e antilineare nel primo

$$\begin{aligned} \langle h|\left(\lambda|f\rangle + \mu|g\rangle\right) &= \lambda\langle h|f\rangle + \mu\langle h|g\rangle \\ \left(\lambda\langle f| + \mu\langle g|\right)|h\rangle &= \lambda^*\langle f|h\rangle + \mu^*\langle g|h\rangle \end{aligned}$$

[1] *Inner product space*, in inglese. Talvolta viene detto anche spazio *hermitiano, unitario* o *prehilbertiano* (e nel caso sia definito su $\mathbb{R}$ anziché su $\mathbb{C}$ *spazio euclideo*).

[2] La notazione $|f\rangle$ qui usata per denotare i vettori è detta "di Dirac". Questo simbolo viene denominato *ket*, mentre il suo corrispondente duale $\langle f|$ viene denominato *bra*. Il prodotto scalare $\langle f|g\rangle$ è dunque un *bra* per un *ket*, cioè una *bracket*, che in inglese significa parentesi. Questa la nomenclatura introdotta da Dirac nel 1928 nella sua riformulazione mediante spazi di Hilbert astratti della meccanica quantistica.

2. sia *hermitiana* $\langle g|f\rangle = \langle f|g\rangle^*$ (da cui segue che $\langle f|f\rangle \in \mathbb{R}$)
3. sia definita positiva, cioè $\forall |f\rangle,\ \langle f|f\rangle \geq 0$ e inoltre $\langle f|f\rangle = 0$ se e solo se $|f\rangle = 0$.

Teorema. *Con questa definizione di prodotto scalare è possibile dedurre la* diseguaglianza di Schwarz *(o diseguaglianza triangolare)*

$$|\langle f|g\rangle|^2 \leq \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle$$

Definizione. Uno spazio vettoriale $\mathcal{N}$ di elementi $a, b, c, ...$ si dice **spazio normato** se in esso è definita una funzione $\|\cdot\|$; $\mathcal{N} \to \mathbb{R}_+$ detta *norma* tale che

1. sia definita positiva $\forall a \in \mathcal{N},\ \|a\| \geq 0$ e $\|a\| = 0 \ \Leftrightarrow\ a = 0$
2. omogenea $\|\lambda a\| = |\lambda|\,\|a\|$ (da cui discende in particolare che $\|-a\| = \|a\|$)
3. rispetti la diseguaglianza triangolare $\forall a, b \in \mathcal{N},\ \|a+b\| \leq \|a\| + \|b\|$

Ogni spazio a prodotto interno è automaticamente uno spazio normato, una volta definita in esso la norma di un vettore come

$$\|f\| = \sqrt{\langle f|f\rangle} \geq 0$$

Esempio. Nel caso di spazio vettoriale finito dimensionale, perciò isomorfo a $\mathbb{C}^N$, possiamo introdurre l'isomorfismo di aggiunzione come l'operazione che manda i vettori colonna nel complesso coniugato dei vettori riga

$$\text{Se } \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad \text{allora} \quad \mathbf{a}^\dagger = (a_1^*, a_2^*, ..., a_N^*) = (\mathbf{a}^T)^*$$

Consegunentemente il prodotto scalare

$$\mathbf{a}^\dagger\mathbf{b} = \sum_{n=1}^{N} a_n^* b_n$$

soddisfa tutti i requisiti di linearità, hermiticità ed è definito positivo. Tutti gli spazi a prodotto interno finito dimensionali sono isomorfi a $\mathbb{C}^N$ e in essi è definibile una norma $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}}$ finita per ogni vettore. Perciò ogni spazio a prodotto interno finito-dimensionale è uno spazio normato.

3.3 Spazio metrico

Definizione. Uno spazio (non necessariamente vettoriale) $\mathcal{M}$ di elementi $a, b, c, ...$ si dice **spazio metrico** se in esso è definita una funzione $d : \mathcal{M} \times \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ che soddisfi le proprietà

1. $d(a, b) = d(b, a)$
2. $d(a, a) = 0$
3. $d(a, b) > 0$ per ogni $a \neq b$
4. $d(a, b) \leq d(a, c) + d(c, b)$ (diseguaglianza triangolare)

Osservazione. La definizione di norma permette di dotare uno spazio vettoriale normato $\mathcal{H}$ della struttura di spazio metrico, cioè definita la distanza tra due vettori $|a\rangle$ e $|b\rangle$ come $d(|a\rangle, |b\rangle) \equiv \||a\rangle - |b\rangle\|$, si vede subito che le proprietà richieste per uno spazio metrico sono soddisfatte. quindi in particolare, ogni spazio a prodotto interno è anche uno spazio metrico.

Definizione. Una successione infinita $a_1, a_2, a_3, ...$ in uno spazio metrico $\mathcal{M}$ è detta convergente a un elemento $b \in \mathcal{M}$ se

$$\lim_{n\to\infty} d(b, a_n) = 0$$

Scriveremo, esendendo la usuale notazione dei limit anche agli spazi metrici

$$b = \lim_{n\to\infty} a_n$$

Un noto criterio di convergenza in $\mathbb{R}$ e in $\mathbb{C}$ è il criterio di Cauchy. Analogamente introduciamo un simile concetto negli spazi metrici.

Definizione. Una successione infinita $a_1, a_2, a_3, ...$ in uno spazio metrico $\mathcal{M}$ è detta *di Cauchy* se

$$\lim_{m,n\to\infty} d(a_m, a_n) = 0$$

Teorema. *Se una successione infinita $a_1, a_2, a_3, ...$ converge in uno spazio metrico a un elemento b, allora b è unico e la successione è di Cauchy.*

In generale però potrebbe non essere vero il contrario, il che giustifica la seguente

Definizione. Uno spazio metrico $\mathcal{M}$ è **completo** se ogni successione $a_1, a_2, a_3, ...$ di elementi in $\mathcal{M}$ che sia di Cauchy ha un limite che è esso stesso un elemento di $\mathcal{M}$, cioè $\exists b \in \mathcal{M}$ tale che

$$\lim_{n\to\infty} a_n = b$$

Uno spazio normato che sia anche uno spazio metrico completo si dice *spazio di Banach.*

3.4 Spazi di Hilbert

Definizione. Un sottoinsieme $\mathcal{S}$ di uno spazio a prodotto interno $\mathcal{H}$ è detto *dappertutto denso* se per ogni $|g\rangle \in \mathcal{H}$ esiste una successione $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle, ...\} \subset \mathcal{H}$ tale che

$$\lim_{n\to\infty} f_n = g$$

Esempio. L'insieme dei razionali $\mathbb{Q}$ è dappertutto denso in $\mathbb{R}$ poiché ogni elemento di $\mathbb{R}$ può essere ottenuto come sezione di Dedekind da una opportuna successione di razionali.

Definizione. Uno spazio a prodotto interno $\mathcal{H}$ è **separabile**, se esiste un sottoinsieme $\mathcal{S}$ *numerabile* e dappertutto denso.

Esempio. Lo spazio $\mathbb{R}$ è separabile, in quanto $\mathbb{Q}$ è numerabile e dappertutto denso.

In uno spazio separabile è dunque garantito che ogni vettore può essere rappresentato come limite di una opportuna successione numerabile di vettori.

Definizione. Uno spazio a prodotto interno che sia anche uno *spazio metrico completo* rispetto alla norma indotta dal prodotto scalare e *separabile* si dice **spazio di Hilbert**.

Le proprietà di separabilità e completezza garantiscono che sia possibile, anche in uno spazio di Hilbert di dimensione infinita, estendere il concetto di *base* di vettori linearmente indipendenti a un insieme infinito di vettori. Vale infatti il seguente

Teorema. *Uno spazio a prodotto interno $\mathcal{H}$ è separabile se e solo se in esso esiste una base numerabile.*

Cioè ogni vettore $|f\rangle \in \mathcal{H}$ potrà essere scritto come combinazione lineare (eventualmente infinita, cioè con $\dim \mathcal{H} = \infty$) di vettori di una base

$$|f\rangle = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}} c_i |f_i\rangle$$

Osservazione. Tutti gli spazi a prodotto interno finito dimensionali sono automaticamente spazi di Hilbert, poiché in $\mathbb{C}$ tutte le serie convergenti sono di Cauchy e viceversa, e ciò può essere esteso banalmente a $\mathbb{C}^N$. Inoltre si può sempre trovare una base in $\mathbb{C}^N$ che perciò è separabile.

Esempio. Definiamo lo spazio $\ell^2(\mathbb{C})$ delle successioni infinite di numeri complessi $\mathbf{z} = \{z_1, z_2, z_3, ...\}$ a quadrato sommabili, cioè tali che

$$\sum_{n=1}^{\infty} |z_n|^2 < \infty$$

Chiamiamo gli elementi $\mathbf{z}$ *vettori* di $\ell^2(\mathbb{C})$ e li possiamo pensare come vettori colonna con infiniti elementi

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad , \qquad \mathbf{z}^\dagger = (z_1^*, z_2^*, z_3^*, ...)$$

Definita una somma $\mathbf{z}+\mathbf{w}$ e un prodotto per complessi $\alpha\mathbf{z}$ secondo le solite regole del calcolo matriciale, si verifica che $\ell^2(\mathbb{C})$ è uno spazio vettoriale. Infatti anche la somma è a quadrato sommabile

$$\sum_{n=1}^{\infty} |z_n + w_n|^2 \leq \sum_{n=1}^{\infty} \left(|z_n|^2 + |w_n|^2\right) < \infty$$

e il prodotto per complessi pure

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\alpha z_n|^2 = |\alpha|^2 \sum_{n=1}^{\infty} |z_n|^2 < \infty$$

Inoltre, definito il prodotto scalare

$$\langle \mathbf{z}|\mathbf{w}\rangle = \mathbf{z}^\dagger \mathbf{w} = \sum_{n=1}^{\infty} z_n^* w_n$$

si mostra che esso converge poiché in $\mathbb{C}$ vale che $|z^* w| \leq |z||w|$ e si vede subito che si tratta di una forma hermitiana definita positiva per la quale la norma

$$\|\mathbf{z}\| = \sqrt{\sum_{n=1}^{\infty} |z_n|^2}$$

è finita per ogni vettore (quindi $\ell^2(\mathbb{C})$ è uno spazio normato). Con tale norma possiamo costruire una funzione distanza

$$d(\mathbf{z}, \mathbf{w}) = \|\mathbf{z} - \mathbf{w}\| = \sqrt{\sum_{n=1}^{\infty} |z_n - w_n|^2}$$

che ha tutte le proprietà richieste per uno spazio metrico. Infine, una successione di Cauchy in $\mathbb{C}$ converge a un numero $\mathbb{C}$ e da ciò è possibile, con opportune maggiorazioni, dimostrare che una successione $\mathbf{z}^{(1)}, \mathbf{z}^{(2)}, ...$ di vettori in $\ell^2(\mathbb{C})$ che rispetti il criterio di Cauchy

$$\lim_{m,n\to\infty} \left\|\mathbf{z}^{(m)} - \mathbf{z}^{(n)}\right\| = 0$$

converge a un vettore $\mathbf{z} \in \ell^2(\mathbb{C})$. Perciò lo spazio $\ell^2(\mathbb{C})$ è completo. Inoltre esso è anche separabile, come si potrebbe far vedere utilizzando la densità di $\mathbb{Q}^2$ in $\mathbb{C}$ e la sua numerabilità. Se ne conclude che $\ell^2(\mathbb{C})$ è uno spazio di Hilbert.

3.5 Basi ortonormali

Definizione. In uno spazio di Hilbert due vettori sono **ortogonali** se il loro prodotto scalare è nullo

$$\langle f|g\rangle = 0$$

Se un vettore $|f\rangle$ è ortogonale a tutti i vettori di $\mathcal{H}$, esso è necessariamente nullo $|f\rangle = 0$.

Dato un vettore $|f\rangle$ possiamo sempre *normalizzarlo*, cioè definire un vettore $|\check{f}\rangle$di norma 1, ponendo

$$|\check{f}\rangle = \frac{1}{\|f\|}|f\rangle$$

Definizione. Una famiglia di vettori $\{|e_1\rangle, ..., |e_n\rangle\}$ che siano tra loro ortogonali e normalizzati si dicono **ortonormali**

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{i,j}$$

Teorema. *Vettori ortonormali sono certamente linearmente indipendenti.*

Infatti, supposto di avere una famiglia di vettori ortonormali $\mathcal{O} = \{|e_i\rangle\}$ finita o infinita, la relazione

$$\sum_i c_i|e_i\rangle = 0$$

implica che le c_i siano tutte nulle, poiché moltiplicando per un generico $\langle e_j| \in \mathcal{O}^*$

$$0 = \langle e_j| \sum_i c_i |e_i\rangle = \sum_i c_i \langle e_j|e_i\rangle = \sum_i c_i \delta_{i,j} = c_j$$

◆

Se qualunque vettore nello spazio $\mathcal{H}$ si può scrivere come combinazione lineare (finita o infinita) della famiglia di vettori $\mathcal{O}$, si dice che $\mathcal{O}$ è una *base* di $\mathcal{H}$. Nel caso infinito dimensionale, come abbiamo visto, ciò è possibile se sussiste la proprietà di completezza.

In generale una base di uno spazio di Hilbert non è ortonormale. Tuttavia, esiste sempre una trasformazione che porti da una base completa qualunque a una base di vettori tutti ortonormali, cioè a una **base ortonormale**, con una procedura pratica che viene detta metodo di **ortogonalizzazione di Schmidt**, che consiste nel porre

$$|e_1\rangle = \frac{|f_1\rangle}{\|f_1\|}$$

che è chiaramente normalizzato: $\langle e_1|e_1\rangle = 1$. Poi

$$|e_2\rangle = \frac{|\phi_2\rangle}{\|\phi_2\|}$$

dove $|\phi_2\rangle = |f_2\rangle + a_{21}|e_1\rangle$ sia ortogonale a $|e_1\rangle$, cioè

$$0 = \langle e_1|\phi_2\rangle = \langle e_1|f_2\rangle + a_{21}\langle e_1|e_1\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad a_{21} = -\langle e_1|f_2\rangle$$

Perciò $|\phi_2\rangle = |f_2\rangle - \langle e_1|f_2\rangle|e_1\rangle$ e quindi

$$|e_2\rangle = \frac{|f_2\rangle - \langle e_1|f_2\rangle|e_1\rangle}{\||f_2\rangle - \langle e_1|f_2\rangle|e_1\rangle\|}$$

In altre parole si sottrae al vettore $|f_2\rangle$ la sua proiezione lungo la direzione di $|e_1\rangle$ rendendolo così ortogonale a $|e_1\rangle$ e poi lo si normalizza. Procedendo analogamente col terzo vettore

$$|\phi_3\rangle = |f_3\rangle - \langle e_2|f_3\rangle|e_2\rangle - \langle e_1|f_3\rangle|e_1\rangle$$

cioè sottraendogli le proiezioni che esso può avere nelle direzioni di $|e_1\rangle$ ed $|e_2\rangle$ si può definire il terzo vettore ortonormale

$$|e_3\rangle = \frac{|\phi_3\rangle}{\|\phi_3\|} = \frac{|f_3\rangle - \langle e_2|f_3\rangle|e_2\rangle - \langle e_1|f_3\rangle}{\||f_3\rangle - \langle e_2|f_3\rangle|e_2\rangle - \langle e_1|f_3\rangle\|}$$

e così via si può dimostrare per induzione che l'n-simo vettore ortonormale sarà

$$|e_n\rangle = \frac{|f_n\rangle - \sum_{j=1}^{n-1} \langle e_j|f_n\rangle |e_j\rangle}{\left\| |f_n\rangle - \sum_{j=1}^{n-1} \langle e_j|f_n\rangle |e_j\rangle \right\|}$$

Questa procedura ricorsiva permette di ortonormalizzare sempre qualunque base di vettori, anche se infinita.

3.6 Operatori

Introduciamo il concetto di *operatore* come quello di un ente astratto che, applicato a un generico $|a\rangle \in \mathcal{H}$ produce come risultato un altro vettore $|d\rangle \in \mathcal{H}$. Scriveremo $\mathsf{A}|a\rangle = |d\rangle$.

Definizione. Una funzione $\mathsf{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ che sia un *endomorfismo* di $\mathcal{H}$ (si scrive $\mathsf{A} \in \mathrm{End}(\mathcal{H})$), cioè che goda di una proprietà di linearità

$$\mathsf{A}\left(\lambda|a\rangle + \mu|b\rangle\right) = \lambda\mathsf{A}|a\rangle + \mu\mathsf{A}|b\rangle$$

si dice **operatore lineare** su $\mathcal{H}$

Algebra degli operatori. Il più semplice operatore che possiamo immaginare è l'operatore *identità*, che indicheremo con I, che non fa nulla sul vettore su cui è applicato $\mathsf{I}|a\rangle = |a\rangle$, $\forall|a\rangle \in \mathcal{H}$. Due operatori sono uguali se danno lo stesso risultato agendo su tutti i vettori

$$\mathsf{A} = \mathsf{B} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathsf{A}|v\rangle = \mathsf{B}|v\rangle \quad \forall|v\rangle \in \mathcal{H}$$

Un operatore può essere moltiplicato per un numero complesso

$$\mathsf{B} = \alpha\mathsf{A} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathsf{B}|v\rangle = \alpha\mathsf{A}|v\rangle \quad \alpha \in \mathbb{C}\,, \quad \forall|v\rangle \in \mathcal{H}$$

La relazione $\mathsf{A}|v\rangle = \alpha|v\rangle$ per ogni $|v\rangle \in \mathcal{H}$ implica perciò che $\mathsf{A} = \alpha\mathsf{I}$.
La somma $\mathsf{S} = \mathsf{A} + \mathsf{B}$ di due operatori lineari è quell'operatore lineare tale che

$$\mathsf{S}|v\rangle = \mathsf{A}|v\rangle + \mathsf{B}|v\rangle \quad \forall|v\rangle \in \mathcal{H}$$

e la differenza $\mathsf{A} - \mathsf{B} = \mathsf{A} + (-1)\mathsf{B}$. Con queste definizioni si vede che $\mathrm{End}(\mathcal{H})$ è esso stesso uno spazio vettoriale su $\mathbb{C}$.

Commutatore. Analogamente si può definire l'operatore lineare prodotto di due operatori lineari

$$\mathsf{P} = \mathsf{AB} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathsf{P}|v\rangle = \mathsf{A}(\mathsf{B}|v\rangle) \quad \forall |v\rangle \in \mathcal{H}$$

che gode della ovvia proprietà $\mathsf{IA} = \mathsf{AI} = \mathsf{A}$. Il prodotto di operatori in generale non è commutativo

$$\mathsf{AB} \neq \mathsf{BA}$$

e si definisce perciò il *commutatore* di due operatori

$$[\mathsf{A}, \mathsf{B}] \equiv \mathsf{AB} - \mathsf{BA}$$

Ogni operatore commuta con l'identità: $[\mathsf{A}, \mathsf{I}] = 0$ e con se stesso: $[\mathsf{A}, \mathsf{A}] = 0$. Data la sua definizione il commutatore è un oggetto antisimmetrico

$$[\mathsf{A}, \mathsf{B}] = -[\mathsf{B}, \mathsf{A}]$$

e distributivo

$$[\mathsf{A}, \mathsf{BC}] = \mathsf{B}[\mathsf{A}, \mathsf{C}] + [\mathsf{A}, \mathsf{B}]\mathsf{C}$$

Inoltre soddisfa la *identità di Jacobi*

$$[\mathsf{A}, [\mathsf{B}, \mathsf{C}]] + [\mathsf{B}, [\mathsf{C}, \mathsf{A}]] + [\mathsf{C}, [\mathsf{A}, \mathsf{B}]] = 0$$

Nelle applicazioni spesso si usa anche l'*anticommutatore*

$$\{\mathsf{A}, \mathsf{B}\} \equiv \mathsf{AB} + \mathsf{BA} = \{\mathsf{B}, A\}$$

Funzioni di operatori. Possiamo anche definire l'elevamento a potenza di un operatore

$$\mathsf{A}^n = \begin{cases} \mathsf{AA...A} \quad (n \text{ volte}) & \text{per } n \geq 1 \\ \mathsf{I} & \text{per } n = 0 \end{cases}$$

e dare pertanto un significato formale a funzioni di operatori tramite sviluppi in serie

$$f(\mathsf{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \mathsf{A}^n$$

per esempio

$$e^{\mathsf{A}} = \mathsf{I} + \mathsf{A} + \frac{\mathsf{A}^2}{2} + \frac{\mathsf{A}^3}{3!} + ... = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathsf{A}^n}{n!}$$

oppure

$$\log(\mathsf{I}+\mathsf{A}) = \mathsf{A} + \frac{\mathsf{A}^2}{2} + ... = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mathsf{A}^n}{n}$$

Si noti che (formula di *Campbell - Baker - Hausdorff*)

$$e^{\mathsf{A}} e^{\mathsf{B}} = e^{\mathsf{A}+\mathsf{B}+\frac{1}{2}[\mathsf{A},\mathsf{B}]+\frac{1}{12}[\mathsf{A},[\mathsf{A},\mathsf{B}]]+...} \neq e^{\mathsf{A}+\mathsf{B}}$$

a meno che $[\mathsf{A},\mathsf{B}] = 0$.

Questo modo di definire le funzioni di operatori permette anche di dare una definizione formale di derivata di una funzione di operatore rispetto a un operatore

$$\frac{d}{d\mathsf{A}} f(\mathsf{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} n f_n \mathsf{A}^{n-1}$$

Si può controllare che essa gode della proprietà di Leibnitz per il prodotto di derivate e della regola di derivazione a catena.

Operatore inverso. Non tutti gli operatori ammettono un inverso. Se esiste, l'inverso di A è definito come l'operatore A^{-1} tale che

$$\mathsf{A}\mathsf{A}^{-1} = \mathsf{A}^{-1}\mathsf{A} = \mathsf{I}$$

Un operatore dotato di inverso viene detto *regolare*. Se non ammette inverso invece viene detto *singolare*. Se due operatori sono regolari anche il loro prodotto lo è e il suo inverso è

$$(\mathsf{A}\mathsf{B})^{-1} = \mathsf{B}^{-1}\mathsf{A}^{-1}$$

L'inverso dell'identità è l'identità stessa: $\mathsf{I}^{-1} = \mathsf{I}$.

Azione sui bra. L'azione di un operatore può essere considerata anche sui *bra* corrispondenti ai vettori duali $\langle a|\mathsf{A} = \langle d|$. Se consideriamo il prodotto scalare di questo risultato con un altro vettore, daremo significato alla notazione

$$\langle a|\mathsf{A}|b\rangle$$

nella quale l'operatore può essere visto indifferentemente come agente verso destra o verso sinistra.

Operatore aggiunto (o *hermitiano coniugato*). Se $\mathsf{A}|v\rangle = |x\rangle$, definiamo come operatore aggiunto l'operatore $\mathsf{A}^\dagger$ che agendo sul *bra* $\langle v|$ produce il risultato duale $\langle x|$

$$\langle x| = \langle v|\mathsf{A}^\dagger$$

Equivalentemente possiamo definire l'operatore aggiunto come l'operatore $\mathsf{A}^\dagger$ tale che

$$\langle a|\mathsf{A}|b\rangle^* = \langle b|\mathsf{A}^\dagger|a\rangle \qquad , \quad \forall |a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{H}$$

L'aggiunto dell'aggiunto è l'operatore stesso: $(\mathsf{A}^\dagger)^\dagger = \mathsf{A}$. L'aggiunto di una somma è la somma degli aggiunti, mentre per il prodotto vale la proprietà

$$(\mathsf{AB})^\dagger = \mathsf{B}^\dagger\mathsf{A}^\dagger$$

Inoltre, se $\mathsf{A} = \alpha\mathsf{B}$ allora $\mathsf{A}^\dagger = \alpha^*\mathsf{B}^\dagger$.

Operatore hermitiano (o *autoaggiunto*). È un operatore che sia uguale al suo aggiunto, cioè $\mathsf{H} = \mathsf{H}^\dagger$. Il prodotto di due operatori hermitiani A e B è hermitiano solo se essi commutano. Infatti

$$(\mathsf{AB})^\dagger = \mathsf{BA}$$

può essere scritto come AB solo se $[\mathsf{A}, \mathsf{B}] = 0$.

Si dice *antihermitiano* un operatore tale che $\mathsf{C}^\dagger = -\mathsf{C}$. Se C è antihermitiano, ovviamente $\mathsf{D} = i\mathsf{C}$ è hermitiano. Il commutatore di due operatori hermitiani A e B è antihermitano

$$[\mathsf{A}, \mathsf{B}]^\dagger = [\mathsf{B}^\dagger, \mathsf{A}^\dagger] = [\mathsf{B}, \mathsf{A}] = -[\mathsf{A}, \mathsf{B}]$$

Quindi l'operatore $\mathsf{K} = i[\mathsf{A}, \mathsf{B}]$ risulta essere hermitiano.
Un generico operatore lineare si può sempre scrivere come la somma di un operatore hermitiano e di uno antihermitiano, o equivalentemente

$$\mathsf{A} = \mathsf{H} + i\mathsf{K}$$

con H e K hermitiani.

Operatore unitario. Un operatore U regolare tale che

$$\mathsf{U}^{-1} = \mathsf{U}^\dagger \qquad \text{ovvero} \qquad \mathsf{U}\mathsf{U}^\dagger = \mathsf{U}^\dagger\mathsf{U} = \mathsf{I}$$

si dice *operatore unitario.* Il prodotto di due operatori unitari è unitario.
Un operatore unitario conserva la norma dei vettori su cui agisce

$$\|\mathsf{U}|x\rangle\| = \sqrt{\langle x|\mathsf{U}^\dagger\mathsf{U}|x\rangle} = \sqrt{\langle x|x\rangle} = \|x\|$$

Un generico operatore unitario U può sempre essere messo nella forma

$$\mathsf{U} = e^{i\mathsf{H}}$$

con H operatore hermitiano.

Prodotti ket-bra. Un simbolo del tipo $|a\rangle\langle b|$ soddisfa tutte le proprietà di un operatore lineare. Posto infatti

$$\mathsf{A} = |a\rangle\langle b|$$

si ha che A applicato a un *ket* produce un nuovo *ket.*

$$\mathsf{A}|x\rangle = |a\rangle\langle b|x\rangle = \alpha|a\rangle = |x'\rangle$$

ove si è posto $\alpha = \langle b|x\rangle$. Allo stesso modo si può verificare che anche l'azione su un *bra* è consistente con la definizione di operatore.
L'aggiunto di $\mathsf{A} = |a\rangle\langle b|$ è $\mathsf{A}^\dagger = |b\rangle\langle a|$.

Proiettore. Un operatore lineare hermitano e idempotente,cioè tale che $\mathsf{P}^2 = \mathsf{P}$ si dice *operatore di proiezione* o *proiettore.* Un operatore di proiezione non ammette inverso. La somma di due proiettori è un proiettore se e solo se essi sono *ortogonali*, cioè se $\mathsf{P}_1\mathsf{P}_2 = 0$.

3.7 Autovalori e autovettori

Se l'applicazione di un operatore A a un certo vettore $|u\rangle \neq 0$ da come risultato un vettore proporzionale a $|u\rangle$ stesso

$$\mathsf{A}|u\rangle = \lambda|u\rangle \tag{3.1}$$

si dice che λ è un **autovalore** dell'operatore A e che $|u\rangle$ è un **autovettore** dell'operatore A appartenente o corrispondente all'autovalore λ.

Per essere autovettore di A un vettore $|u\rangle$ deve soddisfare un'*equazione agli autovalori* come la (3.1). Riscrivendola come

$$(\mathsf{A} - \lambda\mathsf{I})|u\rangle = 0 \tag{3.2}$$

ci rendiamo conto che essa è equivalente alla richiesta che l'operatore $\mathsf{A} - \lambda\mathsf{I}$ debba essere singolare. Se infatti esso ammettesse un inverso, potrei moltiplicare a sinistra la (3.2) per quest'ultimo ottenendo $|u\rangle = 0$ in contraddizione con la definizione stessa di autovettore.

L'insieme di tutti i valori di λ che soddisfano la (3.2) si dice **spettro** dell'operatore A.

L'equazione agli autovalori è omogenea, cioè se $|u\rangle$ è un autovettore corrispondente all'autovalore λ anche $\alpha|u\rangle$ lo è. Se due vettori $|u\rangle$ e $|v\rangle$ sono entrambi soluzioni dell'equazione agli autovalori per lo stesso λ, anche ogni loro combinazione lineare $\alpha|u\rangle + \beta|v\rangle$ lo è. Perciò a ogni autovalore λ corrisponde in realtà un sottospazio di $\mathcal{H}$ di una certa dimensionalità, detto *autospazio* dell'autovalore λ.

Se la dimensione del sottospazio di autovettori di un certo autovalore λ è maggiore di 1, si dice che l'autovalore λ è *degenere*.

Definizione. Si dice *normale* un operatore i cui autovettori costituiscano un insieme completo ortonormale.

Teorema. *Un operatore* A *è normale se e solo se commuta con il suo aggiunto:* $[\mathsf{A}, \mathsf{A}^\dagger] = 0$

Ovviamente ogni operatore hermitiano è anche normale.

È possibile dimostrare il seguente fondamentale

Teorema. *Due operatori normali* A *e* B *ammettono il medesimo insieme completo ortonormale* $\{|u_i\rangle\}$ *di autovettori se e solo se essi commutano*

$$[\mathsf{A}, \mathsf{B}] = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \begin{cases} \mathsf{A}|u_i\rangle = a_i|u_i\rangle \\ \mathsf{B}|u_i\rangle = b_i|u_i\rangle \end{cases} , \ \forall i$$

Spettro di operatori hermitiani. Gli autovalori e autovettori di un operatore hermitiano godono di certe proprietà molto interessanti, soprattutto per le applicazioni in Meccanica quantistica.

Teorema. *Gli autovalori di un operatore hermitiano sono tutti reali.*

Infatti, se H è hermitiano e $|u\rangle$ è un suo autovettore appartenente all'autovalore λ, accanto alla sua equazione agli autovalori $\mathsf{H}|u\rangle = \lambda|u\rangle$ possiamo scrivere anche la sua hermitiana coniugata $\langle u|\mathsf{H} = \langle u|\lambda^*$. Moltiplicando la prima equazione per $\langle u|$ a sinistra e la seconda per $|u\rangle$ a destra

$$\langle u|\mathsf{H}|u\rangle = \lambda\langle u|u\rangle = \lambda^*\langle u|u\rangle$$

Perciò deve essere $\lambda \in \mathbb{R}$.

Inoltre si può dimostrare, ma qui tralasciamo la dimostrazione, che

Teorema. *Autovettori di un operatore hermitiano appartenenti ad autovalori distinti sono tra loro ortogonali.*

Poiché un operatore hermitiano è anche normale, avrà una base di autovettori completa e ortonormale nello spazio in cui è definito. Ciò può essere realizzato prendendo tutti gli autospazi e trovando una base otrtonormale in ognuno di essi. Il teorema precedente assicura che basi in autospazi diversi sono tra loro ortogonali (e se abbiamo normalizzato tutti gli autovettori, ortonormali). Perciò

Teorema. *Gli autovettori di un operatore hermitiano formano una base ortonormale completa in $\mathcal{H}$ e lo spettro è reale.*

Infine, considerando un operatore unitario U e scriviamo l'equazione agli autovalori sia per i ket che per i bra, ricordando la definizione di operatore aggiunto

$$\begin{aligned} \mathsf{U}|u\rangle &= \lambda|u\rangle \\ \langle u|\mathsf{U}^\dagger &= \langle u|\lambda \end{aligned}$$

da cui

$$\mathsf{U}^\dagger|u\rangle = \lambda^*|u\rangle$$

Moltiplicando per $\mathsf{U}^{-1} = \mathsf{U}^\dagger$ avremo, da un lato

$$\mathsf{U}^\dagger\mathsf{U}|u\rangle = \lambda\mathsf{U}^\dagger|u\rangle = \lambda\lambda^*|u\rangle = |\lambda|^2|u\rangle$$

e dall'altro $\mathsf{U}^\dagger\mathsf{U}|u\rangle = |u\rangle$. Perciò $|\lambda|^2 = 1$. Abbiamo così dimostrato che

Teorema. *Gli autovalori di un operatore unitario giacciono sul cerchio di raggio 1 del piano complesso.*

3.8 Matrici come rappresentazione di operatori

Prima di continuare, addentraimoci nel caso finito dimensionale, dove, come abbiamo visto, tutti gli spazi a prodotto interno sono spazi di Hilbert e sono tutti isomorfi a $\mathbb{C}^N$. Cerchiamo di rendere esplicito questo isomorfismo anche per gli operatori, mettendo la loro algebra in contatto con l'algebra delle matrici.

Sia quindi $\dim\mathcal{H} = N < \infty$, perciò $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$ e $|d\rangle = \mathsf{A}|a\rangle$. Il vettore $|d\rangle$ è esprimibile in una base ortonormale $\{|i\rangle\}$ come $|d\rangle = \sum_{i=1}^N d_i|i\rangle$. Lo stesso vettore $|d\rangle$ si può anche scrivere come

$$|d\rangle = \mathsf{A}|a\rangle = \mathsf{A}(\sum_{i=1}^N a_i|i\rangle) = \sum_{i=1}^N a_i\mathsf{A}|i\rangle = \sum_{j=1}^N a_iA_{ij}|j\rangle$$

cioè

$$d_i = \sum_{j=1}^{N} A_{ij} a_j$$

in cui A_{ij} indica la i-sima componente del vettore $\mathsf{A}|j\rangle$. I numeri A_{ij} possono essere organizzati in una matrice $N \times N$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \dots & A_{NN} \end{pmatrix}$$

Si può così dire che la matrice $\mathbf{A}$ costituisce una *rappresentazione matriciale* dell'operatore lineare A.

Gli elementi di matrice A_{ij} possono essere visti come i valori presi dall'operatore A agente sui vettori della base:

$$\langle j|\mathsf{A}|i\rangle = A_{ij}$$

Abbiamo visto che un vettore $|a\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i|i\rangle$ può essere rappresentato dalla matrice colonna

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

e ciò concorda con la definizione del prodotto righe per colonne

$$d_i = \sum_j A_{ij} a_j \qquad \text{cioè} \qquad \mathbf{d} = \mathbf{A}\mathbf{a}$$

I vettori della base ortonormale $|i\rangle$ sono rappresentati dai vettori colonna $\mathbf{e}^{(i)}$ di componenti $\mathbf{e}_j^{(i)} = \delta_{i,j}$

$$\mathbf{e}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{e}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, ..., \mathbf{e}^{(N)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

Tutte le definizioni e proprietà degli operatori trovano corrispettivo nelle matrici. Dando per scontate le manipolazioni algebriche elementari sulle matrici (definizioni di identità[3], somme, prodotti riga per colonna, traccia, determinante, trasposta, matrice inversa), notiamo che vale il seguente fondamentale

[3]La matrice identità $\mathbf{1}$ ha elementi $\mathbf{1}_{ij} = \delta_{ij}$.

Teorema. *Condizione necessaria e sufficiente perché una matrice ammetta inverso è che il suo determinante sia diverso da zero.*

Il determinante di un prodotto è pari al prodotto dei determinanti

$$\det(\mathbf{AB}) = \det\mathbf{A}\cdot\det\mathbf{B}$$

Poiché $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{1}$, il determinante della matrice inversa è l'inverso del determinate

$$\det(\mathbf{A}^{-1}) = (\det\mathbf{A})^{-1}$$

Un'altra operazione spesso utile sulle matrici quadrate è la traccia, ovvero la somma degli elementi diagonali

$$\mathrm{Tr}\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{N} A_{ii}$$

La traccia di un prodotto di più matrici gode di una proprietà ciclica

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_2...\mathbf{A}_n) = \mathrm{Tr}(\mathbf{A}_n\mathbf{A}_1\mathbf{A}_2...\mathbf{A}_{n-1})$$

L'inversa di un prodotto di matrici è data da

$$(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$$

Poiché un vettore *bra* si decompone nella *base duale* $\{\langle i|\}$ come

$$\langle a| = \sum_{i=1}^{N} a_i^*\langle i|$$

i vettori bra sono perciò identificabili con i vettori riga, quindi i trasposti dei vettori colonna, ma con tutte le componenti complesse coniugate. Si dice *matrice aggiunta* di una matrice $\mathbf{A}$ la matrice $\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^T)^*$ di elementi

$$(A^\dagger)_{ij} = (A_{ji})^*$$

oovero la matrice aggiunta è la trasposta e complessa coniugata. L'aggiunta di un prodotto di matrici è dato da

$$(\mathbf{AB})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger\mathbf{A}^\dagger$$

Una matrice che commuta con la sua aggiunta $[\mathbf{A},\mathbf{A}^\dagger]$ si dice *normale* e una matrice che ha se stessa per aggiunta $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ si dice *hermitiana.* Una matrice hermitana è sempre normale.

Con tale notazione risulta che se $\mathbf{a}$ è un vettore colonna rappresentante il *ket* $|a\rangle$, il corrispondente *bra* $\langle a|$ è rappresentato dal vettore riga $\mathbf{a}^\dagger$. Una relazione del tipo $\mathbf{d} = \mathbf{A}\mathbf{a}$ si traduce allora nello spazio duale come

$$\mathbf{d}^\dagger = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{A}^\dagger$$

Il prodotto scalare di due vettori si esprimerà, come già visto, come

$$\langle a|b\rangle = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{b} = \sum_i a_i^* b_i$$

L'equazione agli autovalori di un operatore si traduce facilmente a livello di matrici

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}$$

Vogliamo determinare per quali valori di λ questa equazione ammette soluzioni $\mathbf{u} \neq 0$. La richiesta che la matrice $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{1}$ sia singolare si traduce nella cosiddetta **equazione caratteristica**

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{1}) = 0$$

Quest'ultima, immaginando di svolgere il determinante, risulta essere una equazione polinomiale di grado N e perciò, per il teorema fondamentale dell'algebra, ammette, in $\mathbb{C}$, N soluzioni (contando separatamente eventuali zeri doppi o multipli). Supponiamo di aver trovato una soluzione λ_1. Ora, inserendo questa soluzione nella originale equazione agli autovalori otteniamo un sistema lineare di N equazioni in N incognite, che dunque ci permette di trovare una soluzione per le componenti u_i del vettore colonna $\mathbf{u}$, che indicheremo con $\mathbf{u}^{(1)}$ per ricordare che è autovettore appartenente all'autovalore λ_1. Ripetendo la procedura per ogni altra soluzione λ_n e supponendo in prima battuta che tutte le soluzioni siano distinte, troveremo un insieme di autovettori $\{\mathbf{u}^{(1)}, ..., \mathbf{u}^{(N)}\}$. Potremo così creare una matrice $\mathbf{S}$ le cui colonne siano le componenti degli autovettori trovati

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} u_1^{(1)} & ... & u_1^{(N)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_N^{(1)} & ... & u_N^{(N)} \end{pmatrix}$$

Si dimostra che se $\mathbf{A}$ è normale, questa matrice è regolare e unitaria, perciò può essere invertita. Possiamo considerare la trasformazione di *similarità*

$$\mathbf{A}^D = \mathbf{S}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{S}$$

che può essere vista come un cambiamento di base dalla base ortonormale generica $\{|i\rangle\}$ alla base degli autovettori ortonormalizzati $\{|\check{u}_i\rangle\}$. Questa trasformazione conserva sia il determinante che la traccia

$$\begin{aligned} \det \mathbf{A}^D &= \det \mathbf{S}^{-1} \det \mathbf{A} \det \mathbf{S} = \det \mathbf{A} \\ \mathrm{Tr}\mathbf{A}^D &= \mathrm{Tr}(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{S}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}) = \mathrm{Tr}\mathbf{A} \end{aligned}$$

ma la cosa interessante è che nella nuova base la matrice $\mathbf{A}^D$ risulta diagonale e formata dagli autovalori di $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A}^D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_N \end{pmatrix}$$

da cui segue subito che il determinante è il prodotto degli autovalori e la traccia ne è la somma

$$\det \mathbf{A} = \prod_{n=1}^{N} \lambda_n \quad , \quad \mathrm{Tr}\mathbf{A} = \sum_{n=1}^{N} \lambda_n$$

Se anche solo uno dei suoi autovalori e zero, una matrice è necessariamente singolare.

Se poi la matrice è hermitiana $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$, avremo la certezza che gli autovalori sono reali e che gli autovettori corrispondenti ad autovalori diversi sono tra loro ortogonali.

Se ci sono però autovalori degeneri, cioè soluzioni dell'equazione caratteristica doppie, triple, o di ordine $p > 1$, ci sono più autovettori corrispondenti allo stesso autovalore e si può trovare un insieme di p autovettori linearmente indipendenti. Tutte le loro combinazioni lineari sono ancora autovettori corrispondenti allo stesso autovalore degenere, identificando così un sottospazio di dimensione p. Tuttavia, possiamo usare i p vettori linearmente indipendenti trovati come una base di questo sottospazio e grazie al metodo di Schmidt la possiamo ortonormalizzare. Aggiunta questa sottobase agli autovettori normalizzati degli altri autovalori non degeneri, si può garantire che, nel caso di operatore hermitiano, si troverà sempre una base ortonormale di autovettori che sia completa nello spazio di Hilbert finito-dimensionale in esame.

3.9 Operatori in spazi infinito dimensionali

Nel caso infinito dimensionale lo spettro degli operatori è più delicato da trattare. Innanzitutto non esiste una equazione caratteristica che fornisca gli autovalori con una procedura standard. Inoltre, se si definisce lo spettro come l'insieme di valori λ per i quali l'operatore $(\mathsf{A} - \lambda\mathsf{I})$ è singolare, questo può in alcuni casi non coincidere con gli autovalori intesi come valori di λ per cui l'equazione $\mathsf{A}|u\rangle = \lambda|u\rangle$ ammette soluzione nell'incognita $|u\rangle$. La teoria spettrale in matematica si occupa di questi delicati problemi. Qui faremo una trattazione semplificata, ignorando i casi patologici e concentrandoci sul formalismo utile per la Meccanica quantistica.

Nel caso in cui $\mathcal{H}$ sia infinito-dimensionale la diagonalizzabilità viene garantita dalla separabilità, ma può aversi che gli autovettori sono vettori non appartenenti ad $\mathcal{H}$ stesso. In altre parole, essi costituiscono ancora un insieme completo di autovettori, su cui è possibile espandere ogni vettore di $\mathcal{H}$, ma non sono in $\mathcal{H}$. Un esempio di questo fenomeno è dato dall'espansione in onde piane di una funzione a quadrato sommabile. Essa è in $\mathbb{L}^2$, ma le onde piane non lo sono. A causa di ciò, dobbiamo trattare separatamente due tipi diversi di autovettori

Caso discreto

Se lo spettro è *discreto* cioè composto o da un numero finito di autovalori o da un numero infinito ma numerabile di autovalori separati da salti, possiamo etichettare gli autovalori e autovettori con interi $k = 1, 2, 3, ...$

$$\mathsf{F}|k\rangle = f_k|k\rangle \qquad \text{con} \quad \langle k|k'\rangle = \delta_{k,k'}$$

e per ogni $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$|\psi\rangle \;\; = \;\; \sum_k c_k|k\rangle$$

Il prodotto scalare di due vettori è dato da

$$\langle\psi^{(1)}|\psi^{(2)}\rangle = \sum_k c_k^{(1)*} c_k^{(2)}$$

e quindi $c_k = \langle k|\psi\rangle$ e $\|\psi\| = \sum_k |c_k|^2$. I vettori sono quindi normalizzabili

$$|\check{\psi}\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\|\psi\|} = \sum_k a_k|k\rangle \qquad \text{con} \qquad a_k = \frac{c_k}{\sqrt{\sum_l |c_l|^2}}$$

e l'espressione $\langle\check{\psi}|\check{\psi}\rangle = 1$ implica l'*equazione di Parseval*

$$\sum_k |a_k|^2 = 1$$

Poiché $a_k = \langle k|\check{\psi}\rangle$, quest'ultima può essere riscritta come

$$\sum_k \langle\check{\psi}|k\rangle\langle k|\check{\psi}\rangle = 1$$

e quindi implica la *relazione di completezza*

$$\sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{1}$$

Applicando ad essa l'operatore F stesso, si ottiene la cosiddetta *decomposizione spettrale* (si ricordi che un prodotto ket-bra è un operatore)

$$\mathsf{F} = \sum_k f_k |k\rangle\langle k|$$

Caso continuo

Se lo spettro è continuo, gli autovalori sono etichettati da una variabile continua $k \in [a,b] \subseteq \mathbb{R}$

$$\mathsf{F}|k\rangle = f(k)|k\rangle$$

e gli autovettori non sono normalizzabili e pertanto non rappresentano stati possibili in $\mathcal{H}$. Essi soddiafano ancora una relazione di *ortonormalità generalizzata*, nel senso che

$$\langle k|l\rangle = \delta(k-l)$$

e la completezza in questo caso si esprime come un integrale

$$|\psi\rangle = \int_a^b c(k)|k\rangle dk$$

con i coefficienti $c(k)$ che ora costituiscono una funzione, detta *funzione d'onda nello spazio delle k*

$$c(k) = \langle k|\psi\rangle$$

Il prodotto scalare di due vettori è un integrale

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_a^b c_1(k)^* c_2(k) dk$$

e la norma si esprime come

$$\|\psi\|^2 = \int_a^b |c(k)|^2 dk \geq 0$$

Gli stati $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ possono essere normalizzati

$$|\check{\psi}\rangle = \int_a^b a(k)|k\rangle dk \qquad \text{con} \qquad a(k) = \frac{c(k)}{\|\psi\|^2}$$

conducendo all'equazione di Parseval

$$\int_a^b |a(k)|^2 dk = 1$$

e alla relazione di completezza

$$\int_a^b |k\rangle\langle k| = \hat{1}$$

nonché alla decomposizione spettrale

$$\mathsf{F} = \int_a^b f(k)|k\rangle\langle k|dk$$

Nel seguito faremo uso convenzionalmente della notazione per spettri discreti, sottintendendo però di estenderla anche al caso continuo (con le dovute cautele), a patto di sostituire nelle formule

- alle somme gli integrali
$$\sum_k ... \to \int ...dk$$

- agli indici discreti (per es. a valori su $\mathbb{N}$ o su $\mathbb{Z}$) opportuni indici continui (per es. a valori su $\mathbb{R}$ o su $\mathbb{R}^N$) e conseguentemente a insiemi discreti di numeri delle funzioni

$$\begin{aligned} k \in \mathbb{N} \quad &\to \quad k \in \mathbb{R} \\ \phi_k \quad &\to \quad \phi(k) \end{aligned}$$

- alle delta di Krönecker le delta di Dirac

$$\delta_{k,k'} \to \delta(k - k')$$