Trattato sull'autoaggiunzione dell'operatore Hamiltoniano in presenza di un potenziale singolare

Marco Canteri

September 23, 2017

1 Introduzione e soluzione dell'equazione di Von-Neumann

Lo scopo di questo trattato è lo studio dell'autoaggiunzione dell'Hamiltoniana

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + g\delta(x) \tag{1}$$

utilizzando il teorema di Von-Neumann nello spazio di Hilber $L^2(\mathbb{R})$. Per determinare gli indici di difetto dell'operatore dobbiamo risolvere l'equazione di Von Neumann

$$\hat{H}U_\pm \pm iU_\pm = 0 \tag{2}$$

utilizzando l'equazione (1) abbiamo che:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U_\pm(x)}{dx^2} + g\delta(x)U_\pm(0) \pm iU_\pm(x) = 0 \tag{3}$$

che possiamo riscrivere tramite una semplice manipolazione algebriche come

$$\frac{d^2U_\pm(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}gU_\pm(0) \mp \frac{2m}{\hbar^2}iU_\pm(x) = 0 \tag{4}$$

per semplificare la scrittura introduciamo due nuove costanti $\gamma = \frac{2m}{\hbar^2}$, $U^0_\pm = U_\pm(0)$ e riscriviamo quindi l'equazione come

$$\frac{d^2U_\pm(x)}{dx^2} - \gamma g U^0_\pm \mp \gamma i U_\pm(x) = 0 \tag{5}$$

Per risolvere l'equazione differenziale del secondo ordine (5) è conveniente utilizzare la trasformata di Fourier. Per tale trasformata la convezione adottata in questo lavoro è la seguente:

$$\widetilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx}\psi(x)\,dx \qquad \psi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx}\widetilde{\psi}(p)\,dp \tag{6}$$

ricordiamo che $\mathcal{F}\left(\frac{d^2}{dx^2}\right) = -p^2$ e quindi trasformando l'equazione otteniamo:

$$-p^2\widetilde{U}_\pm(p) - \gamma g U^0_\pm \mp \gamma i \widetilde{U}_\pm(p) = 0 \tag{7}$$

si tratta di un equazione algebrica facilmente risolvibile

$$\widetilde{U}_\pm(p) = \frac{\gamma g U^0_\pm}{-p^2 \mp \gamma i} \tag{8}$$

per ricavare la vera soluzione adesso è sufficiente antitrasformare utilizzando la seconda della (6)

$$U_\pm(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx}\frac{\gamma g U^0_\pm}{-p^2 \mp \gamma i}\,dp \tag{9}$$

che possiamo riscrivere meglio come

$$U_\pm(x) = -\frac{\gamma g U^0_\pm}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2 \pm \gamma i}\,dp \tag{10}$$

il problema adesso è quello di risolvere l'integrale, si può svolgere utilizzando il teorema dei residui. Procediamo con calma uno alla volta

- caso U_+
  L'integrale da risolvere è il seguente

$$U_+(x) = -\frac{\gamma g U_+^0}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2 + \gamma i}\, dp \tag{11}$$

per semplicità concentriamoci solo sull'integrale e lasciamo fuori le costanti per il momento. Notiamo che la funzione soddisfa le ipotesi del lemma di Jordan, possiamo quindi sfruttarlo per risolvere l'integrale. Estendiamo la funzione al dominio complesso e prendiamo come curva la semicirconferenza positiva limitandoci quindi al caso $x > 0$. Dal lemma di Jordan sappiamo che il contributo della circonferenza quando il raggio va all'inifinito si annulla, quindi l'integrale sarà:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2 + \gamma i}\, dp = 2\pi i \sum_{\text{poli}} \text{Res}\left(f(z)\right) \tag{12}$$

la parte più critica ora è quello di valutare i poli. Per farlo fattorizziamo il denominatore come:

$$p^2 + \gamma i = p^2 - (-\gamma i) = (p + \sqrt{-\gamma i})(p - \sqrt{-\gamma i}) \tag{13}$$

riscriviamola meglio sfruttando il fatto che

$$\sqrt{-\gamma i} = -i\sqrt{\gamma i} \tag{14}$$

ottenendo quindi

$$(p - i\sqrt{\gamma i})(p + i\sqrt{\gamma i}) \tag{15}$$

risulta chiaro a questo punto che i poli si trovano in $z = i\sqrt{\gamma i}$ e $z = -i\sqrt{\gamma i}$.

Interludio sullo sottigliezza dei numeri complessi:
A prima vista può risultare strana l'identità (14), difatti sembrerebbe valido fare: $\sqrt{-\gamma i} = \sqrt{i^2\gamma i} = i\sqrt{\gamma i}$ Ma tale operazione è errata. Se consideriamo la radice $\sqrt{-i}$, essa ha due radice, quello che noi dobbiamo considerare come polo è la radice principale della funzione. La radice principale di $\sqrt{-i}$ è pari ad $z_1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}i$, si trova quindi nel quadrante in basso a destra ed ha come argomento principale $-\frac{\pi}{4}$, la seconda radice di $\sqrt{-i}$ è pari ad $z_2 = -z_1 = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}i$ si trova quindi nel quadrate in alto a sinistra ed ha come argomento principale $\frac{3}{4}\pi$. Proviamo quindi a confrontare con la fase di $i\sqrt{i}$, ricavarla è semplice:

$$i\sqrt{i} = e^{i\frac{\pi}{2}} \left(e^{i\frac{\pi}{2}}\right)^{\frac{1}{2}} = e^{i\frac{\pi}{2}} e^{i\frac{\pi}{4}} = e^{i\frac{3\pi}{4}} \tag{16}$$

come si vede vale $\frac{3}{4}\pi$, che corrisponde alla seconda radice di $\sqrt{-i}$. Il problema sta nel fatto che nel passaggio $\sqrt{i^2\gamma i} = i\sqrt{\gamma i}$ si trascura il fatto che $\sqrt{i^2} = \pm i$. Il segno giusto da prendere in questo caso si tratta del -.

Il polo da considerare dunque è quello in $z = i\sqrt{\gamma i}$. In questo caso allora abbiamo che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2 + \gamma i}\, dp = 2\pi i \frac{e^{i \cdot i\sqrt{\gamma i}x}}{2i\sqrt{\gamma i}} = \frac{\pi e^{-\sqrt{\gamma i}x}}{\sqrt{\gamma i}} \quad x > 0 \tag{17}$$

nel caso $x < 0$ il polo da considerare sarà l'altro invece, inoltre bisogna tenere conto del fatto che l'integrazione cambia verso, dovremo quindi tenere conto di un segno.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2+\gamma i}\, dp = -2\pi i \frac{e^{-i \cdot i\sqrt{\gamma i}x}}{-2i\sqrt{\gamma i}} = \frac{\pi e^{-\sqrt{\gamma i}|x|}}{\sqrt{\gamma i}} \quad x < 0 \tag{18}$$

notiamo che questa scrittura è identica a quella per $x > 0$, possiamo quindi scrivere che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2+\gamma i}\, dp = \frac{\pi e^{-\sqrt{\gamma i}|x|}}{\sqrt{\gamma i}} \quad \forall x \tag{19}$$

In conclusione la nostra funzione U_+ vale

$$U_+ = -\frac{\gamma g U_+^0}{2} \frac{e^{-\sqrt{\gamma i}|x|}}{\sqrt{\gamma i}} \quad \forall x \tag{20}$$

- caso U_-
  L'integrale da risolvere è il seguente

$$U_-(x) = -\frac{\gamma g U_-^0}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2-\gamma i}\, dp \tag{21}$$

si può procedere nello stesso modo di prima, in questo caso però la fattorizzazione è più facile

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2-\gamma i}\, dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{(p-\sqrt{\gamma i})(p+\sqrt{\gamma i})}\, dp \tag{22}$$

i poli sono quindi in $z_1 = \sqrt{\gamma i}$ e in $z_2 = -\sqrt{\gamma i}$, per stabilire in che quadrate si trovano è facile, in quanto $\sqrt{i}$ ha come radice principale $z_1 = \frac{1}{2}+\frac{1}{2}i$. Considerando quindi $x > 0$ e chiudendo quindi la circonferenza sopra il polo che dobbiamo considerare è z_1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2-\gamma i}\, dp = 2\pi i \frac{e^{i\sqrt{\gamma i}x}}{2\sqrt{\gamma i}} = \frac{\pi i e^{i\sqrt{\gamma i}x}}{\sqrt{\gamma i}} \quad x > 0 \tag{23}$$

l'esponente si può riscrivere usando la (14) $i\sqrt{\gamma i} = -\sqrt{-\gamma i}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2-\gamma i}\, dp = \frac{\pi i e^{-\sqrt{-\gamma i}x}}{\sqrt{\gamma i}} \tag{24}$$

facciamo la stessa cosa per $x < 0$, teniamo conto del verso cambiato di integrazione e otteniamo facilmente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ipx}}{p^2-\gamma i}\, dp = -2\pi i \frac{e^{-i\sqrt{\gamma i}x}}{-2\sqrt{\gamma i}} = \frac{\pi i e^{-\sqrt{-\gamma i}|x|}}{\sqrt{\gamma i}} \quad x < 0 \tag{25}$$

usando la solita identità (14). Le scritture sono equivalenti per $x > 0$ e $x < 0$, quindi in definitiva possiamo dire che

$$U_-(x) = -\frac{\gamma g U_-^0 i e^{-\sqrt{-\gamma i}|x|}}{2\sqrt{\gamma i}} \tag{26}$$

Notiamo ora che l'equazione differenziale (5) è omogenea, infatti può essere scritta come

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+g\delta(x)\pm i\right)U=0 \tag{27}$$

il che significa che se U è soluzione, allora è una soluzione anche $CU(x)$ con C costante. Possiamo quindi esprimere la soluzione dell'equazione differenziale come

$$U_\pm = C_\pm e^{-\sqrt{\pm\gamma i}|x|} \tag{28}$$

in quanto qualsiasi costante si mette davanti all'esponenziale, si otterrà comunque una soluzione dell'equazione differenziale. La scelta delle costanti $C_\pm$ viene fatta imponendo come condizione $\|U_+\| = \|U_-\|$, che è equivalente ad $\|U_+\|^2 = \|U_-\|^2$. Procediamo dunque a calcolare le norme quadrate

$$\|U_+\|^2 = |C_+|^2\int_{-\infty}^{+\infty} dx\left(e^{-\sqrt{\gamma i}|x|}\right)^*\left(e^{-\sqrt{\gamma i}|x|}\right) \tag{29}$$

sapendo che vale $\sqrt{i}=\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{1}{\sqrt{2}}i$ possiamo sviluppare gli esponenziali e dividerli in quelli reali e quelli immaginari

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\left(e^{-\frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2}}|x|}e^{-i\frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2}}|x|}\right)^*\left(e^{-\frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2}}|x|}e^{-i\frac{\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2}}|x|}\right)=\int_{-\infty}^{+\infty} dx\left(e^{-\frac{2\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2}}|x|}\right) \tag{30}$$

la parte immaginaria si semplifica in quanto un un numero immaginario per il suo coniugato complesso fa il modulo di tale numero, ma essendo un esponenziale complesso, ha modulo unitario. L'integrale adesso è pari, quindi possiamo intgrare da 0 e infinito togliendo il modulo, l'integrale diventa a questo punto immediato

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\left(e^{-\frac{2\sqrt{\gamma}}{\sqrt{2}}|x|}\right)=2\int_{0}^{+\infty} dx\left(e^{-\sqrt{2\gamma}x}\right)=2\left(\frac{e^{-\sqrt{2\gamma}x}}{-\sqrt{2\gamma}}\right|_0^{+\infty}=\frac{2}{\sqrt{2\gamma}} \tag{31}$$

in conclusione la norma vale

$$\|U_+\|^2=\frac{2|C_+|^2}{\sqrt{2\gamma}} \tag{32}$$

in maniera identità si può calcolare la norma di U_- che risulta essere identica, infatti l'unica differenza nel calcolo è che $\sqrt{-i}=\frac{1}{\sqrt{2}}-\frac{1}{\sqrt{2}}i$, ma il segno diverso influisce solo nell'esponenziale immaginario che si semplica nel calcolo. Abbiamo quindi

$$\|U_-\|^2=\frac{2|C_-|^2}{\sqrt{2\gamma}} \tag{33}$$

imponendo le norme uguali segue che $|C_+| = |C_-|$ ovvero C_+ e C_- sono diversi solo per un fattore di fase $C_- = C_+e^{i\alpha} \equiv Ce^{i\alpha}$ con $\alpha \in \mathbb{R}$. In conclusione abbiamo trovato che vale

$$U_+ = Ce^{-\sqrt{\gamma i}|x|} \qquad U_- = Ce^{i\alpha}e^{-\sqrt{-\gamma i}|x|} \quad \alpha\in\mathbb{R} \tag{34}$$

2 Calcolo degli indici di difetto e delle estensioni autoaggiunte

Siccome $U_\pm$ dipendono da una sola costante C significa che gli inidici di difetto sono $n_+ = n_- = 1$, il teorema di Von-Neumann quindi ci dice che esistono infinite estensione autoaggiunte parametrizzate nel seguente modo:

$$\varphi(x) = U_+(x) + U_-(x)e^{i\theta} \qquad \theta \in \mathbb{R} \tag{35}$$

usando le soluzioni che abbiamo trovato ricaviamo:

$$\varphi(x) = Ce^{-\sqrt{\gamma i}|x|} + Ce^{i\alpha}e^{-\sqrt{-\gamma i}|x|}e^{i\theta} = C[e^{-\sqrt{\gamma i}|x|} + e^{-\sqrt{-\gamma i}|x|}e^{i(\theta+\alpha)} \qquad \theta, \alpha \in \mathbb{R} \tag{36}$$

ma dato che θ è arbitrario, anche $\theta + \alpha$ è arbitrario, quindi α non gioca alcun ruolo e può essere rimossa. Vediamo meglio φ in $x = 0$ dove si trova il potenziale singolare:

$$\varphi(0) = C(1 + e^{i\theta}) \tag{37}$$

per quanto riguarda la derivata invece:

$$\varphi'(x) = h'(x) + C[-\sqrt{\gamma i} \cdot \operatorname{sign}(x)e^{-\sqrt{\gamma i}|x|} - \sqrt{-\gamma i} \cdot \operatorname{sign}(x)e^{-\sqrt{-\gamma i}|x|}e^{i\theta}] \tag{38}$$

dove $\operatorname{sign}(x)$ è la funzione segno di x. Notiamo che il limite da destra e da sinistra è diverso, possiamo quindi calcolare i due limiti

$$\varphi'(0^+) = -C[\sqrt{\gamma i} + \sqrt{-\gamma i}e^{i\theta}] \qquad \varphi'(0^-) = C[\sqrt{\gamma i} + \sqrt{-\gamma i}e^{i\theta}] \tag{39}$$

quindi avremo che

$$\varphi'(0^-) - \varphi'(0^+) = 2\sqrt{\gamma}C[\sqrt{i} + \sqrt{-i}e^{i\theta}] \tag{40}$$

ed anche che

$$\frac{\varphi'(0^-) - \varphi'(0^+)}{\varphi(0)} = 2\sqrt{\gamma}\left[\frac{\sqrt{i} + \sqrt{-i}e^{i\theta}}{1 + e^{i\theta}}\right] \tag{41}$$

poniamo un momento l'attenzione sul numero complesso $z = \left(\frac{\sqrt{i}+\sqrt{-i}e^{i\theta}}{1+e^{i\theta}}\right)$ usando l'identità (14) possiamo scriverla raccoglieno una radice di i e otteniamo:

$$z = \sqrt{i}\left(\frac{1 - ie^{i\theta}}{1 + e^{i\theta}}\right) \implies \overline{z} = \sqrt{-i}\left(\frac{1 + ie^{-i\theta}}{1 + e^{-i\theta}}\right) \tag{42}$$

facendo il rapporto di queste ultime due quantità otteniamo:

$$\frac{z}{\overline{z}} = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{-i}}\left(\frac{1 - ie^{i\theta}}{1 + e^{i\theta}}\right)\left(\frac{1 + e^{-i\theta}}{1 + ie^{-i\theta}}\right) \cdot \frac{e^{i\theta}}{e^{i\theta}} = \frac{\sqrt{i}}{\sqrt{-i}}\left(\frac{1 - ie^{i\theta}}{1 + e^{i\theta}}\right)\left(\frac{e^{i\theta} + 1}{e^{i\theta} + i}\right) = -\frac{1}{i}\left(\frac{1 - ie^{i\theta}}{e^{i\theta} + i}\right) \tag{43}$$

$$= i\left(\frac{1 - ie^{i\theta}}{e^{i\theta} + i}\right) = \left(\frac{i + e^{i\theta}}{e^{i\theta} + i}\right) = 1 \tag{44}$$

ovvero $z = \overline{z}$, quindi z è un numero reale che possiamo chiamare $\alpha \in \mathbb{R}$. La condizione al contorno diventa a questo punto:

$$\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = 2\sqrt{\gamma}\alpha\varphi(0) \qquad \alpha \in \mathbb{R} \tag{45}$$

dove è stato anche cambiato un segno, in quanto si può mettere dentro la costante α. Possiamo anche includere in α tutte le costanti, in quanto α è arbitrario, otteniamo quindi

$$\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = \alpha\varphi(0) \qquad \alpha \in \mathbb{R} \tag{46}$$

queste sono le infinite estensioni autoaggiunte dell'operatore parametrizzate da $\alpha \in \mathbb{R}$. Al fine di ricavare il valore di α corrispondente al caso fisico che ci interessa, dobbiamo imporre delle condizioni al contorno sulla funzione φ, un modo per farlo è quello di imporre che per l'operatore Hamiltoniano $\hat{H}$ valga l'equazione di Schröedinger

$$\hat{H}\varphi = E\varphi \implies -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + g\varphi(0)\delta(x) = E\varphi(x) \tag{47}$$

adesso possiamo integrare entrambi i membri dell'equazione da $x \in [-\varepsilon, \varepsilon]$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}dx + \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} g\varphi(0)\delta(x)dx = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} E\varphi(x)dx \tag{48}$$

il primo integrale si può risolvere, l'integrale della delta su un dominio simmetrico rispetto all'origine fa 1, otteniamo quindi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\varphi'(\varepsilon) - \varphi'(-\varepsilon)) + g\varphi(0) = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} E\varphi(x)dx \tag{49}$$

prendendo adesso il limite per $\varepsilon \to 0$, in tal caso l'integrale a destra si annulla per continuità della funzione d'onda in 0

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-)) + g\varphi(0) = 0 \implies \varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = \frac{2mg}{\hbar^2}\varphi(0) \tag{50}$$

arriviamo quindi subito alla forma dell'equazione (46).