INTRODUZIONE AGLI OPERATORI DI SCHRÖDINGER

(MECCANICA SUPERIORE, II MODULO 2003)

Sandro Graffi

Indice

Premessa

Questo Quaderno costituisce una versione ampliata

In queste lezioni vorrei fare vedere come, in una classe particolare di sistemi meccanici[1], la costruzione della teoria canonica delle perturbazioni della meccanica unalitica[2] si può trasportare praticamente senza variazioni attraverso il processo di quantizzazione. Da ciò si trae un formalismo unificato per generare entrambe le teorie delle perturbazioni, classica e quantistica, tramite il medesimo algoritmo. Ciò rende possibile, tra l'altro, il trasporto in meccanica quantistica di alcune tecniche per stimare i resti sviluppate, nel caso analitico, nell'ambito della teoria di Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM). Qui, in particolare, si trasporterà il metodo di Nekhoroshev[Ne] per troncare in modo ottimale la forma normale. L'applicazione principale di questo formalismo consiste nella costruzione di una formula di quantizzazione approssimata, con una stima esplicita e quantitativa del resto, valida per gli autovalori di una classe di operatori di Schrödinger corrispondenti ad Hamiltoniane classiche non integrabili.

Per mettere in prospettiva questi risultati, e per descriverne la motivazione principale, si ricordi anzitutto che un sistema Hamiltoniano con n gradi di libertà è integrabile se ammette n integrali primi globali indipendenti (le azioni) cosicché la sua energia può essere canonicamente espressa come funzione di questi (teorema di Liouville-Arnold). Una formula di quantizzazione è una funzione delle azioni classiche che riproduce lo spettro quantistico discreto [3] se queste variabili sono ristrette ad assumere solo valori semiinteri della costante di Planck $\hbar$. Un sistema integrabile ammette sempre una formula di quantizzazione approssimata: basta considerare la sua energia come funzione delle azioni. Prendendo i valori che questa funzione assume ai valori semiinteri di $\hbar$ si ottiene luna formula di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld nella sua formulazione odierna più generale.[4] Salvo casi particolari essa riproduce lo spettro quantistico discreto corrispondente solo a meno di un errore di

[1] Le perturbazioni nonlineari delle piccole oscillazioni attorno ad un minimo dell'energia globale, quadratico e nondegenere. Si tratta del cosiddetto caso di Birkhoff.

[2] Più Precisamente, il metodo di Poincaré-Lindstedt generato tramite la serie di Lie.

[3] Definito come la totalità degli autovalori isolati con molteplicità finita dell' equazione di Schrödinger del sistema.

[4] Molto più generale, e leggermente differente, dalla formulazione originale di Niels Bohr (1913) e Arnold Sommerfeld (1915). Si veda l'Appendice B per maggiori dettagli e un cenno storico.

ordine $\hbar$.[5].

In generale tuttavia un sistema Hamiltoniano non è integrabile: se ammette degli integrali primi essi saranno meno di n; quindi le azioni non esisteranno, per non parlare della possibilità di esprimere l'energia come loro funzione. La vecchia teoria dei quanti (cioè la teoria quantistica prima del 1925[6]) aveva ciò nonostante elaborato una prescrizione naturale per determinare i livelli di energia attraverso una formula di quantizzazione anche in questo caso (si veda il trattato di Max Born[Bo], Capitolo IV). Ci si restringa anzitutto a considerare la sottoclasse particolare (ma non così particolare) dei sistemi quasi-integrabili. Per definizione questi sono i sistemi per cui la funzione hamiltoniana si può scrivere come somma di un termine integrabile (che dipende quindi solo dalle azioni: la parte "libera") e di una perturbazione "piccola", di grandezza misurata da un parametro denotato, ad esempio, ϵ (la "costante di accoppiamento" dei fisici).[7] Si applichi anzitutto la teoria delle perturbazioni canonica per generare una trasformazione canonica che trasforma l'hamiltoniana data in forma normale; la forma normale è uno sviluppo in serie di potenze (formale) in ϵ con coefficienti che dipendono solo dalle azioni "libere". Si applichi poi la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld alla forma normale, cosa ora possibile perchè essa dipende solo dalle azioni (oltre che da ϵ). Questo procedimento riportò subito un successo assai notevole[8], ma fu abbandonato appena si chiarì che non poteva spiegare lo spettro dell'atomo di elio[9]. Resta tuttavia il problema, come nel caso integrabile, di trovare la relazione fra i livelli di energia calcolati in questo modo e quelli "esatti", cioè gli autovalori dell'equazione di Schrödinger: in quale senso i primi rappresentano un'approssimazione dei secondi? Questo è il problema la cui soluzione, almeno in casi particolari significativi, vogliamo descrivere nei termini appena richiamati.

La costruzione si basa in modo essenziale sulla rappresentazione degli osservabili

---

[5] Per alcuni sistemi (gli oscillatori armonici) la formula di Bohr-Sommerfeld dà esattamente lo spettro quantistico . La formula di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld è esatta tutte le volte che l'Hamiltoniana è una funzione quadratica delle variabili canoniche, come negli oscillatori armonici.

[6] Anno di comparsa della meccanica delle matrici di Heisenberg, Born e Jordan, la prima formulazione dell'odierna meccanica quantistica. L'equazione di Schrödinger della meccanica ondulatoria apparve l'anno successivo.

[7] Esempio: $\mathcal{H}(\epsilon) = \mathbf{p}^2 - Z/\|\mathbf{r}\| + \epsilon(x^2 + y^2)$, l'effetto Zeeman, in cui ϵ è l' intensit'a del campo magnetico esterno diretto lungo z, è una perturbazione del problema integrabile di Keplero $H(0)$.

[8] Per esempio nel calcolo delle righe spettrali dell'effetto Zeeman normale.

[9] Calcolo eseguito da Born e dal suo assistente Heisenberg nel 1923: si veda l'Appendice B.

quantistici attraverso il calcolo simbolico e gli operatori pseudodifferenziali. Pertanto comincierò col richiamare, nel Capitolo 1, le nozioni più elementari sul procedimento di quantizzazione canonico, e nel Capitolo 2 quelle sul calcolo simbolico e sugli operatori pseudodifferenziali semiclassici. Per il primo argomento la sorgente principale sarà il libro di Folland[Fo]; per gli altri due seguirò essenzialmente le presentazioni di Robert[Ro], Shubin[Sh] e Berezin-Shubin[BS]. Mi sono servito molto anche di lezioni ancora inedite di Martinez[Mar]. I capitoli 3-7 trattano l'applicazione di questo formalismo alle formule di quantizzazione; la presentazione di questi argomenti è essenzialmente una versione più estesa del lavoro [BGP] e in parte anche di [DGH]. In particolare, il capitolo 3 tratta l'algoritmo formale della teoria delle perturbazioni; il capitolo 4 le stime nel caso analitico, e e il capitolo 5 in quello di Gevrey. Nel Capitolo 6 si farà vedere come i livelli semieccitati (cioè una sottoclasse particolare di autovalori) di una classe abituale di operatori di Schrödinger con spettro discreto può essere ridotta alla formulazione precedente; ciò richiede la dimostrazione che se si modifica il potenziale fuori da un compatto gli autovalori di Schrödinger rimangono gli stessi a meno di termini esponenzialmente piccoli in $\hbar$, e tutto questo lo si espone nel Capitolo 7. L'appendice A tratta alcuni risultati classici sulla rappresentazione di Bargmann e sulla quantizzazione di Wick e di Weyl; nell' Appendice B si richiamerà la costruzione delle formule di quantizzazione per i livelli di energia dei sistemi non-integrabili nella vecchia teoria dei quanti, cioè prima della nascita dell'odierna meccanica quantistica.

Parte I

Nozioni fondamentali sugli operatori di Schrödinger

1 Richiami sugli operatori lineari continui negli spazi di Banach

1.1 Generalità ed esempi

Sia $\mathcal{X}$ uno spazio di Banach complesso.

Esempi di spazi di Banach.

1. $\mathbb{C}^n$; $\|u\| := (\sum_{k=1}^{n} |u_k|^2)^{1/2}$;
2. $C[a,b]$ $(-\infty < a < b < +\infty)$.

$$C[a,b] := \{f : [a,b] \to \mathbb{C},\ f \text{ continua }\}; \quad \|f\| := \max_{[a,b]} |f(x)|$$

3. $L^p(a,b)$, $1 \leq p \leq \infty$ = insieme delle (classi di equivalenza) di funzioni $f : (a,b) \to \mathbb{C}$ L-misurabili su (a,b) e tali che esistono finiti

$$\|f\|_p := \left(\int_a^b |f(x)|^p\, dx\right)^{1/p}, \ 1 \leq p < \infty; \quad \|f\|_\infty := \text{ess} \sup_{(a,b)} |f(x)|$$

4. Più in generale, si definiscono in modo analogo gli spazi di Banach $L^p(M,\mu)$, dove M è uno spazio di misura, μ una misura positiva su M. Se f è $\mu-$misurabile su M,

$$L^p(M,\mu) := \{f : \|f\|_p := \left(\int_M |f(x)|^p\, d\mu\right)^{1/p} < +\infty\}$$
$$L^\infty(M,\mu) := \{f : \|f\|_\infty := \text{ess} \sup_M |f(x)| < +\infty\}$$

5. $\mathcal{X} = \ell^p := L^p(\mathbb{N};\mu)$ dove μ è la misura che conta. Quindi

$$\|f\|_{\ell^p} = \left(\sum_{n=0}^{\infty} |f(n)|^p\right)^{1/p}$$

Equivalentemente, ℓ^p è l'insieme delle successioni $\{f_n\}_{n=0}^{\infty}$ da $\mathbb{N}$ a $\mathbb{C}$ tali che

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} |f_n|^p\right)^{1/p} < +\infty$$

6. C^n, L^2, ℓ^2 sono spazi di Hilbert rispetto al prodotto definito rispettivamente da

$$\langle u,v\rangle := \sum_{k=1}^{n} u_k \overline{v}_k; \ \langle u,v\rangle := \int_a^b u(x)\overline{v(x)}\, dx; \ \langle u,v\rangle := \sum_{k=1}^{\infty} u_k \overline{v}_k$$

Esercizio 1 Dimostrare che ciascuno degli esempi precedenti è uno spazio di Banach; e che gli esempi al punto 6 sono spazi di Hilbert.

Definizione 1.1 (Definizione di operatore lineare)
T dicesi operatore lineare in $\mathcal{X}$ se il suo dominio $D(T)$ è una sottovarietà lineare di $\mathcal{X}$ e l'azione di T è lineare da $D(T)$ in $\mathcal{X}$:

$$T(\alpha_1 u + \alpha_2 v) = \alpha_1 T u + \alpha_2 T v, \quad \forall\, (\alpha_1, \alpha_2) \in \mathbb{C},\ \forall\, (u, v) \in D(T)$$

Si denota: $D(T)$ il dominio di T; $R(T)$ il suo codominio, Tu la sua azione $T(u)$ sul vettore $u \in D(T)$.

Definizione 1.2 (Definizione di operatore lineare continuo)
L'operatore T è continuo a $u_0 \in D(T)$ se le proprietà: $u_n \in D(T)$, $u_n \to u_0$ (in $\mathcal{X}$) implicano $Tu_n \to Tu_0$ in $\mathcal{X}$.

Osservazioni

1. Se T è continuo a $u = 0$ lo è dappertutto in $D(T)$ per la proprietà di linearità;

2. T è un operatore continuo se e solo se è *limitato* su $D(T)$, cioè se esiste $M > 0$ tale che $\|Tu\| \leq M\|u\|\ \forall\, u \in D(T)$.

Esercizio 2 Dimostrare le due affermazioni precedenti.

Definizione 1.3 (Definizione di operatore limitato) *L'operatore T si dice limitato su $\mathcal{X}$ (o semplicemente limitato) se $D(T) = \mathcal{X}$ e se esiste $M > 0$ tale che $\|Tu\| \leq M\|u\|\ \forall\, u \in X$. Il numero M si dice limite superiore per T. L'inf fra i limiti superiori si dice* norma *di T, e la si denota $\|T\|$. Si ha*

$$\|T\| = \sup_{u \neq 0} \frac{\|Tu\|}{\|u\|} = \sup_{\|u\|=1} \|Tu\| \tag{1.1}$$

Teorema 1.1 (Principio di estensione). *Sia T limitato su $D(T)$, e $D(T)$ denso in $\mathcal{X}$. Si definisca:*

$$\|T\| := \sup_{u \in D(T), \|u\|=1} \|Tu\|$$

Allora T ammette un'estensione ed una sola a tutto $\mathcal{X}$ che preserva la norma.

In seguito consideremo esclusivamente operatori T, detti *densamente definiti*, il cui dominio è denso in X : $\overline{D(T)} = \mathcal{X}$. Pertanto ogni operatore continuo (equivalentemente, limitato) si intenderà definito su $\mathcal{X}$.

Esempio 1.1 (Alcuni operatori limitati*)*

1. L'operatore di moltiplicazione. Sia $\mathcal{X} = L^p(a,b)$, $1 \le p \le \infty$. Sia $x \mapsto q(x) \in L^\infty(a,b)$. Si denoti Q l'*operatore massimale di moltiplicazione* in $\mathcal{X}$ per la funzione $q(x)$:

$$(Qf)(x) = q(x)f(x); \quad D(Q) = \{f \in X;\, q(x)f(x) \in X\} \tag{1.2}$$

   Allora Q è continuo in $\mathcal{X}$, e $\|Q\| = \|q\|_\infty$.

2. Gli operatori integrali a nucleo limitato. Sia ancora $\mathcal{X} = L^p(a,b)$, $1 \le p \le \infty$. Sia data la funzione $(x,y) \mapsto K(x,y)$ misurabile su $(a,b) \times (a,b)$. L'operatore in $\mathcal{X}$ definito nel modo seguente:

$$(Tf)(x) = \int_a^b K(x,y)f(y)\,dy, \quad D(T) = \{f \in X;\, Tf(x) \in X\} \tag{1.3}$$

   si dice *operatore integrale massimale* di *nucleo* $K(x,y)$. Si ha

   Lemma 1.1 *Se esiste una costante $C > 0$ tale che valgano entrambe le disuguaglianze*

$$\int_a^b |K(x,y)|\,dy < C,\ \forall\, x \in (a,b); \quad \int_a^b |K(x,y)|\,dx < C,\ \forall\, y \in (a,b)$$

   allora l' T è continuo in $\mathcal{X}$, e $\|T\|_{L^p} \le C$.

   Dimostrazione Il caso $p = 1$ è banale. Lo è anche il caso $p = \infty$, nel qual caso la seconda disuguaglianza non è necessaria. Sia pertanto $1 < p < \infty$, e sia q l'esponente coniugato di p: $\dfrac{1}{p} + \dfrac{1}{q} = 1$. Per la disuguaglianza di Hölder si ha

$$\begin{aligned} |(Tf)(x)| &\le \left(\int_a^b |K(x,y)|\,dy\right)^{1/q} \cdot \left(\int_a^b |K(x,y)||f(y)|^p\,dy\right)^{1/p} \\ &\le C^{1/q}\left(\int_a^b |K(x,y)||f(y)|^p\,dy\right)^{1/p} \end{aligned}$$

Si elevano ora ambo i membri alla potenza p, si integra su x e si applica il teorema di Fubini. Si ottiene:

$$\int_a^b |(Tf)(x)|^p\,dx \le C^{p/q}\int_a^b\int_a^b |K(x,y)||f(y)|^p\,dy\,dx = \\ \int_a^b\int_a^b |K(x,y)||f(y)|^p\,dy\,dx \le C^{p/q+1}\int_a^b |f(y)|^p\,dy$$

Estraendo ora la radice $p-$esima:

$$\|Tf\|_p \le C^{1/q+1/p}\|f\|_p = C\|f\|_p$$

e ciò prova il Lemma.

Si denota $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ (o anche $\mathcal{L}(\mathcal{X})$) l'insieme degli i lineari continui su $\mathcal{X}$. $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ è chiaramente uno spazio normato rispetto alla norma $\|T\|$. Inoltre $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ è evidentemente un anello rispetto alla somma e al prodotto di operatori. Si ha:

Teorema 1.2 *$\mathcal{B}(\mathcal{X})$ è uno spazio di Banach.*

La convergenza in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ si dice *convergenza in norma*, o *uniforme* degli operatori continui:

$$T_n \to T \text{ in } \mathcal{B}(\mathcal{X}) \Longleftrightarrow \|T_n - T\| \to 0$$

Sono utili concetti di convergenza meno forti per le successioni di operatori in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$:

Definizione 1.4 *Data un successione $T_n \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$:*

1. *T_n converge a $T \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$* fortemente *(o in* senso forte*) se $T_n u \to Tu\ \forall\, u \in X$;*
2. *Sia $\mathcal{X}$ uno spazio di Hilbert. Allora T_n converge a $T \in\in \mathcal{B}(\mathcal{X})$* debolmente *(o in* senso debole*) se $\langle T_n u, v\rangle \to \langle Tu, v\rangle\ \forall\,(u,v) \in X \times X$.*

Osservazioni.

1. È immediato vedere che la convergenza in norma implica la convergenza forte, e che la convergenza forte implica quella debole, mentre le affermazioni reciproche non sono vere.
2. Siano $t \mapsto u(t) \in X$ una funzione a valori in $\mathcal{X}$, e $t \mapsto T(t) \in\in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ una funzione a valori in $\in \mathcal{B}(\mathcal{X})$. La definizione precedente comporta in modo naturale la definzione di cotinuità in senso debole, forte e uniforme di $u(t)$ e $T(t)$.

Un altro esempio importante di operatori continui: i proiettori

Sia $\mathcal{X}$ uno spazio di Hilbert, e $M \subset X$ un suo sottospazio chiuso.

Per il teorema della proiezione, $\forall\, f \in X$ vale la rappresentazione (unica) $f = g + h$, dove $g \in M$ e $h \in M^{\perp} := N$.

Sia P_M l'operatore in $\mathcal{X}$ definito nel modo seguente:

$$P_M f = g, \quad \forall\, f \in X$$

L'operatore P_M si chiama *proiettore ortogonale* o *e di proiezione ortogonale* da $\mathcal{X}$ su M. La linearità di P_M è ovvia. P_M è continuo, con $\|P_M\| = 1$. Infatti $\|P_M f\| = \|g\| \leq \|f\|\, \forall\, f \in X$. D'altra parte $P_M f = f$ se e solo se $f \in M$, e $P_M f = 0$ se e solo se $f \in N$, da cui l'ortogonalità. Riassumendo: $R(P_M) = M, \mathrm{Ker} P_M = N$. Possiamo quindi porre la seguente

Definizione 1.5 (Operatore di proiezione) *Un operatore P da uno spazio di Hilbert $\mathcal{X}$ in sè si dice un* proiettore *se esiste un sottospazio chiuso $M \subset X$ tale che $P = P_M$.*

Teorema 1.3 *Sia $P \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$. Allora le affermazioni seguenti si equivalgono:*

(1) P è un proiettore ortogonale;

(2) $Q := I - P$ è un proiettore ortogonale;

(3) P è idempotente, cioè $P^2 = P$, e $R(P) = \mathrm{Ker} P^{\perp}$;

(4) $P^2 = P$ e $\langle Pu, v\rangle = \langle u, Pv\rangle\ \forall\, (u, v) \in X \times X$.

Inoltre, $R(P) = \mathrm{Ker}(Q)$, $\mathrm{Ker}(P) = R(Q)$.

Dimostrazione. L'equivalenza (1) $\Longleftrightarrow$ (2) è banale. Inoltre $R(P) = M = M^{\perp\perp} = \mathrm{Ker}(Q)$, $\mathrm{Ker}(P) = M^{\perp} = R(Q)$.
(1) $\Rightarrow$ (3) è banale: infatti la proprietà $P^2 = P$ è evidente, e il resto segue come sopra. Dimostriamo il viceversa. $R(P)$ è chiuso perché $R(P) = \mathrm{Ker}(P)^{\perp}$. Se $g \in R(P)$, $Pg = g$ perché $P^2 = P$. Ora $f = g + h$, $g \in R(P)$, $h \in R(P)^{\perp} = \mathrm{Ker}(P)$. Pertanto $Pf = Pg + Ph = Pg = g$ e quindi P proietta su $R(P)$.
(1) $\Rightarrow$ (4). $P^2 = P$ banale; $\langle Pu, v\rangle = \langle Pg_1 + Ph_1, g_2 + h_2\rangle = \langle g_1, g_2 + h_2\rangle = \langle g_1, g_2\rangle = \langle g_1 + h_1, g_2\rangle = \langle u, Pv\rangle$. La dimostrazione è completa se si risolve l'esercizio seguente.
Esercizio Dimostrare l'implicazione: (4) $\Rightarrow$ (1).

Esempio Sia $e \in X$, $\|e\| = 1$. Si ponga: $Pf := \langle f, e \rangle e$, $f \in X$. P è un proiettore ortogonale, che proietta su $M = \{e\}$. La veifica è immediata.

Osservazione Un operatore T nello spazio di Banach $\mathcal{X}$ tale che $\dim R(T) < +\infty$ dicesi di *rango finito*. Il proiettore dell'esempio precedente ha chiaramente rango 1.

Somme e prodotti di proiettori ortogonali hanno proprietà importanti.

Teorema 1.4 *Siano M e N sottospazi chiusi di $\mathcal{X}$, e P_M, P_N i corrispondenti proiettori ortogonali. Allora*

(1) $P := P_M P_N$ è un proiettore ortogonale se e solo se $P_M P_N = P_N P_M$. In tal caso $P = P_{M \cap N}$. In particolare, $M \perp N$ se e solo se $P_M P_N = 0$.

(2) $P := P_M + P_N$ è un proiettore ortogonale se e solo se $M \perp N$. In tal caso $P = P_{M \oplus N}$.

Esercizio Dimostrare il teorema precedente.

Definizione 1.6 (Operatore unitario) *Siano $\mathcal{X}_1$ e $\mathcal{X}_2$ spazi Hilbertiani. Una biiezione U fra $\mathcal{X}_1$ e $\mathcal{X}_2$ che conserva le norme, $\|Uf\|_{\mathcal{X}_2} = \|f\|_{\mathcal{X}_1}$ $\forall f \in \mathcal{X}_1$ si dice operatore unitario da $\mathcal{X}_1$ a $\mathcal{X}_2$.*

Esempio 1.2 (Esempi di operatori unitari)

1. Lo sviluppo in serie di Fourier genera un operatore unitario da ogni spazio di Hilbert separabile a ℓ^2. Infatti $\mathcal{X}$ per definizione ammette una base ortonormale numerabile $\{e_k\} : k = 0, 1, \ldots$ se è separabile. Dato $f \in X$, consideriamo il suo sviluppo di Fourier sulla base ortornormale:

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} f_k e_k, \qquad f_k = \langle f, e_k \rangle$$

   Allora l'operatore $(Uf)_k := f_k$ è unitario da $\mathcal{X}$ a ℓ^2. Infatti per il teorema di Fischer-Riesz si ha:

$$\|Uf\|^2_{\ell^2} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{\infty} |f_k|^2 = \|f\|^2_X$$

2. La trasformata di Fourier $\mathcal{F}$. Data $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, si ponga:

$$\hat{f}(\xi) = (\mathcal{F}f)(\xi) := \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\langle x, \xi \rangle} f(x)\, dx \tag{1.4}$$

Il teorema di Fourier-Plancherel afferma che

$$\|\hat{f}(\xi)\|_{L^2}^2 = \|(\mathcal{F}f)(\xi)\|_{L^2}^2 = \|f(x)\|_{L^2}^2$$

Poiché $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ è denso in $L^2(\mathbb{R}^n)$, per il Teorema 1.1 l'operatore $\mathcal{F}$ ammette una ed una sola estensione unitaria a $L^2(\mathbb{R}^n)$.

3. Le dilatazioni in $L^2(\mathbb{R}^n)$. Data $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$, e dato $\lambda > 0$, si ponga $(U_\lambda f)(x) = \lambda^{n/2} f(\lambda x)$ (dilatazione di scala λ della variabile indipendente).
   Allora l'operatore U_λ è unitario in $L^2(\mathbb{R}^n)$. Infatti:

$$\|(U_\lambda f)\|^2 = \lambda^n \int_{\mathbb{R}^n} |f(\lambda x)|^2 \, dx = \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^2 \, dx = \|f\|^2$$

   $\forall \, f \in L^2(\mathbb{R}^n)$.

Esercizio Si consideri in $L^2(\mathbb{R})$ il sistema di vettori $\mathcal{N} := \{\psi_n(x)\}, n = 0, 1, \ldots$ dove:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n} n!} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2} \tag{1.5}$$

Si dimostri:
1. $\mathcal{N}$ è un insieme denso in $L^2(\mathbb{R})$;
2.

$$\mathcal{F}\psi_n = \hat{\psi}_n(\xi) = i^n \psi_n(\xi) \tag{1.6}$$

3. Si deduca da queste due affermazioni il teorema di Fourier-Plancherel in $L^2(R)$.
4. Generalizzando le considerazioni precedenti al sistema di vettori $\otimes_{k=1}^n \psi_{i_k}(x_k)$ dimostrare il teorema di Fourier-Plancherel in $L^2(\mathbb{R}^n)$.

1.2 Operatori compatti

Definizione 1.7 $T \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ *dicesi* compatto (o completamente continuo) *se trasforma sottoinsiemi limitati in* $\mathcal{X}$ *in sottoinsiemi compatti.*

Equivalentemente:

1. T è compatto se per ogni successione limitata u_n in $\mathcal{X}$ la successione Tu_n contiene una sottosuccessione convergente.

2. T è compatto se l'immagine Tu_n di ogni successione debolmente convergente u_n è fortemente convergente.

Esempio 1.3 (Compattezza degli operatori integrali)

Consideriamo ancora l'operatore integrale T di nucleo $K(x,y)$ in $\mathcal{X} = L^p(a,b)$ o in $\mathcal{X} = C[a,b]$. Si ha: *Se K è continua in $[a,b] \times [a,b]$ allora T ècompatto.*
Per vedere questa affermazione, sia u_n una successione limitata in $\mathcal{X}$: $\|u_n\| \leq M$, $\forall\, n$. Allora:

$$|(Tu_n)(x)|^2 \leq \left(\int_a^b |K(x,y)||u_n(y)|\, dy \right)^2 \leq \int_a^b |K(x,y)|^2 \cdot \int_a^b |u_n(y)|^2\, dy$$
$$\Longrightarrow \|Tu_n\|^2 \leq M \int_a^b \int_a^b |K(x,y)|^2\, dxdy$$

Inoltre:

$$|(Tu_n)(x) - (Tu_n)(x_0)| \leq \int_a^b |K(x,y) - K(x_0,y)||u_n(y)|\, dy$$
$$\leq M^2 \int_a^b |K(x,y) - K(x_0,y)|^2\, dy \to 0, \quad x \to x_0$$

Dunque la successione $(Tu_n)(x)$ è equicontinua ed equilimitata su $[a,b]$. Per il teorema di Ascoli-Arzelà esiste allora una sottosuccessione $(Tu_{n_k})(x)$ che converge uniformemente su $[a,b]$ per $k \to \infty$. Poiché' la convergenza uniforme implica la convergenza in L^p per ogni p, l'affernazione è dimostrata.

Alcune delle proprietà più importanti degli operatori compatti sono condensate nel seguente

Teorema 1.5

1. *Ogni operatore T in $\mathcal{X}$ a rango finito è compatto;*
2. *Se T è compatto, $T \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$;*
3. *Se T_n è una successione di operatori compatti in $\mathcal{X}$ ed esiste T tale che $\lim_{n\to\infty} \|T_n - T\| = 0$ allora T è compatto;*
4. *Se T è compatto, e $B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, allora TB e BT sono compatti.*

Dimostrazione
L'affermazione 1 segue dal teorema di Bolzano-Weierstrass perché se T ha rango finito per definizione il suo codominio ha dimensione finita ed èquindi isomorfo ad $\mathbb{R}^n$. Per vedere l'affermazione 2, ragioniamo per assurdo. Se $T \notin \mathcal{B}(\mathcal{X})$, esisterà una

successione $u_n \in X$, $\|u_n\| = 1$, tale che $\|Tu_n\| \to \infty$ per $n \to \infty$. Dunque Tu_n non può contenere alcuna sottosuccessione convergente, il che contraddice l'ipotesi. Se poi vale $\lim_{n\to\infty} \|T_n - T\| = 0$, data una successione $u_k \in X$, $\|u_k\| = 1$, si ha $Tu_k = T_n u_k + \delta_n u_k$, dove $\forall\, \epsilon > 0$ esiste $N(\epsilon)$ tale che $|\delta_n| < \epsilon$ per $N > N(\epsilon)$. Poiché T_n è compatto, ed ϵ arbitrario, Tu_n contiene una sottosuccessione convergente e ciò dimostra l'asserzione 3. infine l'asserzione 4 è evidente.

2 Generalità sugli operatori non limitati

In generale gli operatori in $\mathcal{X}$ non sono limitati.

Definizione 2.1 *Sia dato un operatore $T : D(T) \to \mathcal{X}$.*

1. *Se $D(T)$ è denso in $\mathcal{X}$, T si dice* densamente definito. *(D'ora in poi ogni operatore $\mathcal{X}$ sarà sempre assunto densamente definito).*

2. *T si dice* invertibile *se è iniettivo, cioè se $Tu = 0$ implica $u = 0$ o, equivalentemente, $T : D(T) \leftrightarrow R(T)$ 1 a 1.*

3. *Nel caso precedente, l'operatore che manda $R(T)$ in $D(T)$ esiste ed è l'*e inverso *di T, denotato T^{-1};*

4. *Se $D(T) \subset D(S)$, e $Su = Tu$ su $D(T)$, S dicesi* estensione *di T (e T* restrizione *di S). S si dice estensione di ordine finito m se $D(S)$ $D(T) = m$. In particolare:*

5. *$S = T$ se e solo se $D(S) = D(T)$ e $Tu = Su$.*

Esempio 2.1 (Un operatore di derivazione)

Sia $\mathcal{X} = L^p(a, b)$, $1 < p < \infty$, $-\infty \leq a < b \leq +\infty$. Sia D_x l'operatore massimale di derivazione in L^p, definito nel modo seguente:

$$(D_x u)(x) = -iu'(x), \quad D(D_x) = \{u \in L^p; D_x u \in L^p\} \tag{2.1}$$

Esplicitamente: $D(D_x) = \{u \in L^p; u \text{ assolutamente continua in } (a, b); u' \in L^p\}$.

Se $-\infty < a < b < +\infty$ D_x *non è invertibile.* Infatti $D_x u = 0$ se u è una costante. Se invece $a = -\infty$, $b = +\infty$, tale costante deve necessariamente annullarsi e D_x è invertibile.

D_x *è densamente definito*, perché $D(D_x)$ contiene $C_0^\infty(a,b)$.

D_x *non è limitato.* Limitiamoci a fare vedere questa affermazione per $p = 2$. Sia per cominciare $-\infty < a < b < +\infty$; senza ridurre la generalità prendiamo $a = -\pi$, $b = \pi$. Sia $u_n(x) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \sin nx$. Allora $u_n \in D(D_x)$, e $\|u_n\| = 1$. Si ha:

$$\|D_x u_n\| = \|n \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos nx\| = n \to \infty, \quad n \to \infty$$

Se $a = -\infty$, $b = +\infty$, basta prendere $u_n(x) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \sin nx$, $|x| \leq \pi$, $u_n(x) = 0$, $|x| > \pi$, e allo stesso modo si trattano i rimanenti casi.

Si definisce anche l'operatore differenziale *minimale* $\dot{D}_x$ nel modo seguente:

$$(\dot{D}_x u)(x) = -iu'(x), \quad D(\dot{D}_x) = C_0^\infty(a,b) \tag{2.2}$$

$\dot{D}_x$ ha le medesime proprietà verificate sopra per D_x. Tuttavia $\dot{D}_x \subset D_x$, $\dot{D}_x \neq D$!

A partire dall'operazione di derivata, si possono definire ulteriori operatori differenziali imponendo delle *condizioni al contorno.* Si consideri ad esempio l'intervallo semiinfinito $-\infty < a < b = +\infty$, e si definisca su $L^p(a, +\infty)$ l'operatore D_a nel modo seguente

$$(D_a u)(x) = -iu'(x), \quad D(D_a) = \{u \in D(D_x); u(a) = 0\}$$

Allora $D_a \subset D_x$; D_a è invertibile; $R(D_a) = D(D_a^{-1}) = L^p$; esplicitamente

$$(D_a^{-1} u)(x) = i \int_a^x u(t)\, dt, \quad \forall\, u \in L^p$$

Esempio 2.2 (L'operatore massimale di moltiplicazione)

Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ misurabile, e sia $x \mapsto q(x)$ misurabile su Ω. Sia Q l'operatore massimale di moltiplicazione per q in $X := L^2(\Omega)$:

$$(Qf)(x) = q(x)f(x); \quad D(Q) = \{f \in L^2(\Omega); qf \in L^2(\Omega)\}$$

Proposizione 2.1

1. *$Q \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ se e solo se $q \in L^\infty(\Omega)$, e $\|Q\| = \operatorname{ess\,sup}_\omega |q(x)|$;*

2. *Q è invertibile (con inverso Q^{-1} densamente definito) se e solo se $q(x) \neq 0$ q.d. in Ω; in tal caso:*

$$Q^{-1} = \begin{cases} \dfrac{1}{q(x)}, & \forall\, x \in \Omega \ t.c.\ q(x) \neq 0 \\ 0, & \forall\, x \in \Omega \ t.c.\ q(x) = 0 \end{cases}$$

Dimostrazione L'affermazione 2 è evidente, così come il fatto che $q \in L^\infty(\Omega)$ implica $Q \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ e $\|Q\| \leq \operatorname{ess\,sup}_\omega |q(x)| := K$. Facciamo vedere che $\|Q\| \geq K$. L'insieme $\Omega_\epsilon := \{x \in \Omega; |q(x)| \geq K - \epsilon\}$ ha misura positiva; prendiamo $f \in L^P(\Omega)$ con $\operatorname{supp} f \subset \Omega_\epsilon$. Allora

$$\|Qf\|^p = \int_\Omega |q(x)|^p |f(x)|^p \, dx \geq (K-\epsilon)^p \int_{\Omega_\epsilon} |f(x)|^p \, dx = (K-\epsilon)^p \|f\|^p$$

e dunque $\|Q\| \geq K - \epsilon \ \forall \epsilon > 0$. Inoltre, se $K = +\infty$, per $n \in \mathbb{N}$ consideriamo $\Omega_n := \{x \in \Omega : |q(x)| \geq n\}$. Ω_n ha misura positiva. Se $f \in D(Q)$, $\operatorname{supp} f \subset \Omega_n$, si ha come sopra $\|Qf\|^p \geq n^p \|f\|^p$ e quindi Q non è limitato. Ciò conclude la dimostrazione.

Le operazioni di somma e prodotto fra operatori non limitati richiedono particolare cautela.

La *somma* $T_1 + T_2$ di due operatori non limitati T_1 e T_2 è a priori definita *solo* su $D(T_1 + T_2) = D(T_1) \cap D(T_2)$. Poiché può succedere che $D(T_1) \cap D(T_2) = \emptyset$, oppure che $D(T_1) \cap D(T_2)$ non sia denso, la somma di due operatori non limitati a priori non è definita se non si controlla che $D(T_1) \cap D(T_2)$ non sia almeno denso.

Il *prodotto* $S = T_1 T_2$ è definito su $D(S) := \{f \in D(T_2) : T_2 f \in D(T_1)\}$.

Un criterio utile per constatare che somme e prodotti di operatori non limitati siano almeno densamente definiti è:

1. Per la somma: trovare un sottoinsieme denso comune a $D(T_1)$ e $D(T_2)$;
2. Per il prodotto: trovare un sottoinsieme denso nel dominio di T_2 che sia lasciato invariante dall'azione di T_2 medesimo.

Esempio 2.3 (Il commutatore)

Dati due operatori T_1 e T_2, il loro *commutatore* $[T_1, T_2]$ è formalmente definito nel modo seguente:

$$[T_1, T_2] = T_1 T_2 - T_2 T_1$$

Il calcolo del commutatore richiede il calcolo di somme e prodotti di operatori non limitati. Un esempio elementare ma particolarmente importante è il seguente:

Proposizione 2.2 *Consideriamo ancora gli operatori Q_x e $\dot{D}_x$, dove Q_x è l'operatore massimo di moltiplicazione ristretto a $C_0^\infty(\mathbb{R})$. Allora come, come uguaglianza di operatori in L^p sul dominio comune, si ha $\mathcal{S}(\mathbb{R})$:*

$$[\dot{D}_x, Q_x] = -iI_d$$

Dimostrazione. L'insieme $C_0^\infty(\mathbb{R})$ è invariante rispetto ad entrambi gli operatori Q_x e $\dot{D}_x$, e pertanto il loro commutatore è ivi definito. Per di più, $\forall\, u \in C_0^\infty(\mathbb{R})$:

$$[\dot{D}_x, Q_x]u = -id_x(xu) + ixd_xu = -iu$$

da cui l'asserto.

2.1 Operatori chiusi

Definizione 2.2 (Norma del grafico). *Sia T un operatore in $\mathcal{X}$. Dati $(u, v) \in D(T) \times D(T)$, si ponga:*

$$\langle u, v\rangle_T := \langle u, v\rangle + \langle Tu, Tv\rangle; \quad \|u\|_T^2 := \|u^2 + \|Tu\|^2 \tag{2.3}$$

La norma $\|u\|_T$ dicesi norma del grafico *di T.*

Esercizio Si verifichi che $\langle u, v\rangle_T$ è un prodotto scalare e che $\|u\|_T$ è una norma.

Definizione 2.3 (Operatore chiuso) *Un operatore T in $\mathcal{X}$ si dice* chiuso *se $\mathcal{X}_T := \{D(T); \langle\cdot\rangle\}$ è uno spazio di Hilbert. Equivalentemente:*
T è chiuso se il valere simultaneo delle condizioni:

$$u_n \in D(T), \quad u_n \to u \text{ in } X; Tu_n \to f \text{ in } X$$

implica le affermazioni seguenti

$$u \in D(T); \quad f = \lim_{n\to\infty} Tu_n = T(\lim_{n\to\infty} u_n) = Tu$$

(Si noti che $u_n \to u$ non *implica la convergenza di Tu_n).*

Consideriamo ora il prodotto cartesiano $X \times X$, identificato con la somma diretta $X \oplus X$. Ciò significa che poniamo su $X \times X$ la topologia della somma diretta: se $u = (u_1, u_2) \in X \times X$, $v = (v_1, v_2) \in X \times X$, poniamo

$$\langle u, v \rangle_{X \times X} := \langle u_1, v_1 \rangle + \langle u_2, v_2 \rangle.$$

Il *grafico* $G(T)$ di T è il sottoinsieme di $X \times X$ definito da

$$G(T) = \{(u, Tu); u \in D(T)\} \subset X \times X$$

Allora la definizione di operatore ammette un'ulteriore formulazione:
T è chiuso se e solo se $G(T) = \overline{G(T)}$ (dove la chiusura va intesa nella topologia di $X \oplus X$).

Teorema 2.1 *(*del grafico chiuso) *Se T è un operatore chiuso con dominio $\mathcal{X}$ allora T ècontinuo.*

Dimostrazione Si guardi un qualsiasi libro di analisi funzionale.
Osservazione. Il viceversa non è vero! La nozione di operatore chiuso è strettamente più generale della nozione di operatore limitato.

Dato il grafico $G(T)$ dell'operatore T, si definisce *grafico inverso* di T l'insieme $G'(T) = \{(Tu, u) : u \in D(T)\}$. Si ha

Teorema 2.2 *Sia T invertibile. Allora T è chiuso se e solo se T^{-1} lo è.*

Dimostrazione. Basta osservare che il grafico di T^{-1} è $G'(T)$, e che $G'(T)$ è chiuso in $X \oplus X$ se e solo se lo è $G(T)$.

Si hanno inoltre le seguenti ulteriori proprietà:

Teorema 2.3 *Sia T chiuso in $\mathcal{X}$. Allora*

1. *Se $T \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, T è chiuso;*

2. *Se T è chiuso, e U unitario, allora l'operatore UTU^{-1} è chiuso;*

3. *Se T è chiuso,* $\ker(T)$ *è chiuso.*

Esercizio Dimostrare questo teorema.

Definizione 2.4 (Operatore chiudibile) *L'operatore T è chiudibile se ammette almeno una estensione chiusa. L'estensione chiusa minimale si dice* chiusura $\overline{T}$ *di T.*

Teorema 2.4 $G(\overline{T}) = \overline{G(T)}$. *Se T è chiudibile:*

$$D(\overline{T}) = \{u \in X \,|\, \exists\, u_n \in D(T) \,|\, u_n \to u \text{ in } \|\cdot\|_T\}$$

In tal caso, $\overline{T}u = \lim_{n\to\infty} Tu_n$.

Esercizio Dimostrare il teorema precedente.

Il criterio fondamentale per la chiudibilità di un operatore in uno spazio di Hilbert fa uso della nozione di *codominio numerico* di un operatore.

Teorema 2.5 *Sia $\mathcal{X}$ uno spazio di Hilbert. Dato un operatore T in $\mathcal{X}$, si definisce* codominio numerico *l'insieme*

$$\Theta(T) := \{z \in \mathbb{C} \,|\, z = \langle Tu, u\rangle \,;\, u \in D(T) \,;\, \|u\| = 1\} \subset \mathbb{C} \tag{2.4}$$

Allora si ha:

1. $\Theta(T)$ *è convesso.*
2. T *è chiudibile se* $\Theta(T)$ *è contenuto in un semipiano;*
3. *Sia* $z \in \Delta := \mathbb{C} \setminus \overline{\Theta(T)}$*, e* $(T - zI)$ *una biiezione fra* $D(T)$ *e* $\mathcal{X}$*. Allora*

$$\|R(z,T)\| \leq \mathrm{dist}(z,\Gamma)^{-1}, \quad \Gamma := \overline{\Theta(T)} \tag{2.5}$$

Dimostrazione
Limitiamoci a dimostrare la terza affermazione. Si ha:

$$|\langle Tu, u\rangle - zI| = \mathrm{dist}(z, \Theta(T)) = |\langle (T - zI)u, u\rangle| \leq \|(T - zI)u\|, \quad \forall\, u \in D(T)\; \|u\| = 1$$

Sia ora $z \in \Delta$, cosicché $\mathrm{dist}(z,\Gamma) = \delta > 0$. Allora $\|(T - zI)u\| \geq \delta\|u\|$, $\forall\, u \in D(T)$, e quindi $\|R(z,T)\| \leq \delta^{-1}$. Ciò conclude la dimostrazione.
Un'altra nozione fondamentale è la seguente:

Definizione 2.5 (Core) *Sia T chiuso in $\mathcal{X}$. Un sottospazio di $D(T)$ si dice* core *di T se $\overline{(T|D)} = T$.*

Esempio 2.4 (Esempi di operatori chiusi)

1. Il Laplaciano in $L^2(\mathbb{R}^n)$.

$$T = -\Delta, \quad D(T) = H^2(\mathbb{R}^n).$$

Allora $\|u\|_T = \|u\|_{L^2} + \|\Delta u\|_{L^2} = \|u\|_{H^2}$ per definizione. Poiché H^2 è uno spazio di Hilbert, T è chiuso.

2. L'operatore massimale di moltiplicazione Q per $q(x)$ è chiuso in L^p (sia nel caso limitato che nel caso illimitato). Infatti si ha:

$$X_Q = \{u \in D(Q) \mid \|u\|^p + \|qu\|^2 = \|u\|_{L^p} + (\int |q(x)u(x)|^p \, dx)^{1/p}\}$$

e X_Q è uno spazio di Banach.

3. Se T è il laplaciano in $L^2(\mathbb{R}^3)$, $D(T) = H^2$, un calcolo diretto dà immediatamente

$$\mathcal{F}T\mathcal{F}^{-1} = -Q_{|\xi|}; \quad D(Q_{|\xi|}) = \{u(\xi) \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid |\xi|^2 u(x) \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$$

Pertanto $D(Q_{|\xi|})$ coincide con lo spazio di Hilbert pesato $L^2_2(\mathbb{R}^3)$ e

$Q_{|\xi|}$ è chiuso. Per equivalenza unitaria lo è anche T e si ottiene

così una nuova dimostrazione della chiusura di T.

2.2 L'operatore aggiunto

La nozione di aggiunzione di un operatore è strettamente legata a quella di chiusura.

Definizione 2.6 (Operatore aggiunto formale) *Sia $\mathcal{X}$ uno spazio di Hilbert, e siano S, T due operatori in $\mathcal{X}$. Essi si dicono* aggiunto formale *l'uno dell'alto se*

$$\langle v, Tu \rangle = \langle Sv, u \rangle, \quad \forall\, u \in D(T),\ \forall v \in D(S). \tag{2.6}$$

Poiché $D(T)$ è denso in $\mathcal{X}$, esiste ed è unico un operatore massimale, denotato T^*, che estende tutti gli aggiunti formali. Se S è un aggiunto formale di T, allora $S \subset T^*$. Pertanto

Definizione 2.7 (Operatore aggiunto) *L'operatore aggiunto T^* di T è definito costruttivamente nel modo che segue:*

$$D(T^*) := \{v \in X : \exists\, f \in X t.c. \langle v, Tu \rangle = \langle f, u \rangle,\ \forall u \in D(T)\} \tag{2.7}$$

e l'azione è $T^* v = f$.

Osservazioni

1. f è determinato univocamente da v. Infatti, dato che $D(T)$ è denso in $\mathcal{X}$, l'uguaglianza $\langle f', u \rangle = \langle f, u \rangle$ implica $f' = f$.

2. T^* è ovviamente lineare. Inoltre, $S \subset T^*$ er ogni aggiunto S di T.

L'operatore aggiunto, quando esiste, è chiuso. Si ha infatti:

Teorema 2.6 *Sia T^* l'aggiunto di T. Allora, nelle notazioni precedenti:*

1. $G'(-T^*) = G(T)^\perp$*;*

2. T^* *è chiuso;*

3. $\ker(T^*) = R(T)^\perp$

Dimostrazione Da $\langle T^* v, u \rangle = \langle v, Tu \rangle$ segue $\langle v, Tu \rangle + \langle -T^* v, u \rangle = 0$. Quest'ultima relazione può essere letta così: i vettori della forma $(-T^* v, u) \in X \oplus X$ sono il complemento ortogonale dei vettori (u, Tu). Pertanto, dato che $\{(-T^* v, u)\}$ è il grafico inverso di $-T^*$, si conclude che $G'(-T^*) = G(T)^\perp$. Da ciò segue che $G'(-T^*)$ è chiuso, in quanto un complemento ortogonale in uno spazio di Hilbert è sempre chiuso. Dunque anche il grafico di T^* è chiuso, e concludendo T^* è chiuso perché il suo grafico lo è. Per concludere la dimostrazione, osserviamo che $g \in \ker(T^*)$ se e solo se $T^* g = 0$. Poiché $D(T)$ è denso, ciò equivale a $0 = \langle T^* g, u \rangle = \langle g, Tu \rangle$ $\forall\, u \in D(T)$. Dunque $g \in R(T)^\perp$. Inversamente, se $g \in R(T)^\perp$, $T^* g = 0$. Ciò prova il teorema.

Esercizio Si dimostrino le seguenti proprietà:

1. T è chiudibile se e solo se $D(T)$ èdenso;

2. $T^{**} = \overline{T}$, $(\overline{T})^* = T^*$.

Esempio 2.5 (Esempi di operatori aggiunti)

1. Sia T_K l'operatore integrale dell'Esempio 1.2, con nucleo $K(x,y)$. Allora T_K^* èl'operatore integrale $T_{\overline{K}}$ di nucleo $\overline{K}(y,x)$. Anzitutto si verifica $T_{\overline{K}} \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ come per T_K. Inoltre:

$$\begin{aligned}\langle T_{\overline{K}}v, u\rangle &= \int_a^b \overline{K}(y,x)v(y)\overline{u}(x)\,dydx = \int_a^b v(x)\overline{K}(x,y)\overline{u}(y)\,dxdy = \\ &= \langle v, T_k u\rangle \Longrightarrow \langle T_K^* v, u\rangle = \langle v, T_k u\rangle\end{aligned}$$

2. Q, operatore massimo di moltiplicazione per $q(x)$ in L^2. Evidentemente Q^* è l'operatore massimo di moltiplicazione per $\overline{q}(x)$, e $D(Q^*) = D(Q)$.

3. Sia $-\infty < a < b < +\infty$, T_2 l'operatore differenziale su $L^2(a,b)$ con *condizioni al bordo di Dirichlet*:

$$T_2 = -iu'; \quad D(T_2) = \{u \in AC[a,b] \mid u' \in L^2 \mid u(a) = u(b) = 0\}$$

   Allora $T_2^* = T$, dove T è l'operatore di derivazione massimale definito in precedenza. Infatti, se $v \in D(T_2)$, $v \in D(T)$:

$$\langle u, Tv\rangle = i\int_a^b u\overline{v}'dx = i[u\overline{v}]_a^b - i\int_a^b u'\overline{v}dx = \langle Tu, v\rangle$$

Esercizio Sia U unitario in $\mathcal{X}$. Si dimostri allora che $U^* = U^{-1}$.

2.3 Stabilità della chiusura

Siano S e T operatori in $\mathcal{X}$.

Definizione 2.8 (Relativa limitatezza) *S dicesi $T-$limitato, o limitato rispetto a T, se*

1. $D(T) \subset D(S)$;

2. S è limitato da $\mathcal{X}_T$ a $\mathcal{X}$: $\exists C > 0$ tale che $\|Su\| \le C\|u\|_T = C[\|u\| + \|Tu\|$.

Il limite superiore relativo ($T-$sup) *b è definito nel modo seguente: se S è $T-$limitato*

$$b = \inf\{C : \exists\, a \text{ t.c. } \|Su\| \le C\|Tu\| + a\|u\|, \quad \forall u \in D(T)$$

Enunciamo ora un teorema importante, il cui metodo dimostrativo costituisce la base per ogni ragionemento perturbativo come si vedrà in seguito.

Teorema 2.7 *Sia S $T-$ limitato con sup relativo $b < 1$. Allora $S + T$ è chiuso (chiudibile) se e solo se lo è T.*

Dimostrazione Anzitutto $D(T+S) = D(T)$ dato che $D(T) \subset D(S)$. Inoltre, dato che $\|Su\| \leq b\|Tu\| + a\|u\| \, \forall \, u \in D(T)$, $b < 1$:

$$\|(T+S)u\| \geq \|Tu\| - \|Su\| \geq (1-b)\|Tu\| - a\|u\|$$
$$\|(T+S)u\| \leq \|Tu\| + \|Su\| \leq (1+b)\|Tu\| + a\|u\|$$

Pertanto esisteranno $0 < C_1, 0 < C_2$ tali che

$$\|Tu\| \leq C_1[\|u\| + \|(T+S)u\|]; \quad \|(T+S)u\| \leq C_2[\|u\| + \|Tu\|], \quad \forall \, u \in D(T)$$

Dunque, per un qualche $K > 0$, si avrà

$$\|u\|_T \leq K\|u\|_{T+S}, \qquad \|u\|_{T+S} \leq K\|u\|_T$$

Le norme del grafico di T e $T + S$ sono quindi equivalenti, e ciò prova il teorema.

Corollario 2.1

$$D(\overline{T+S}) = D(\overline{T}).$$

Osservazione Ogni $S \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ è relativamente limitato rispetto a T con $T-$ sup 0.

3 Definizioni fondamentali della teoria spettrale

3.1 L'operatore risolvente. Lo spettro

Se T è un operatore lineare in un spazio lineare di dimensione n, ad esempio $\mathbb{R}^n$, e quindi, senza ridurre la generalità, una matrice $n \times n$ a elementi complessi, sappiamo che λ è autovalore di T se esiste $u \in \mathbb{R}^n, u \neq 0$ tale che $Tu = \lambda u$; equivalentemente, se $\ker(T - \lambda I) \neq \{0\}$. Evidentemente l'inverso $[T - \lambda I]^{-1}$ non esiste. Per di più, il numero positivo $\dim\ker(T - \lambda I)$ si dice *molteplicità (geometrica)* dell'autovalore λ. L'insieme degli autovalori si dice *spettro* di T, e si denota $\sigma(T)$. $\sigma(T)$ coincide con l'insieme delle soluzioni dell'equazione caratteristica $\det(T-\lambda I)=0$. Poiché questa è un'equazione algebrica di grado n, T ammetterà sempre n autovalori (complessi) contati secondo la loro *molteplicità algebrica*, cioè la molteplicità di λ come soluzione dell'equazione caratteristica.

Se $\dim\mathcal{X}=+\infty$ le generalizzazioni sono sostanziali.

Sia T un operatore in $\mathcal{X}$ chiuso. In tal caso è chiuso anche l'operatore $T-zI$ lo è $\forall\, z\in\mathbb{C}$. Se z non èautovalore di T, allora l'operatore $T-zI$ è iniettivo e quindi rimane definito l'inverso

$$R(z,T):=[T-zI]^{-1} \tag{3.1}$$

come operatore da $R(T-zI$ a $D(T)$. L'operatore $R(z,T)$ si dice *risolvente* di T.

Definizione 3.1 *Sia T un operatore chiuso in $\mathcal{X}$.*

1. *Dicesi* insieme risolvente *di T, denotato $\rho(T)$, il sottoinsieme di $\mathbb{C}$ definito nel modo seguente*
$$\{z\in\mathbb{C}\,|\,[T-zI]^{-1}\in\mathcal{B}(\mathcal{X})\} \tag{3.2}$$

2. *L'insieme complementare $\sigma(T):=\mathbb{C}\setminus\rho(T)$ si dice* spettro *dell'operatore T.*

Osservazioni

1. Se $z\in\rho(T)$, per definizione $T-zI$ è una biiezione fra $D(T)$ e $\mathcal{X}$.Dunque se $z\in\rho(T)$ l'equazione lineare non omogenea in $\mathcal{X}$
$$(T-zI)u=f$$
è sempre risolubile: $\forall\, f\in X$ la soluzione unica è $u=[T-zI]^{-1}f$. Da qui la locuzione insieme risolvente.

2. La definizione corrisponde alla situazione nota per gli spazi vettoriali a dimensione finita: sappiamo che l'equazione $(T-\lambda I)u=f$ ha soluzione se e solo se $\ker(T-\lambda I)=\emptyset$, cioè se λ non è autovalore di T. La differenza importante è che, in dimensione infinita, lo spettro nonè più costituito, in generale, da punti isolati.

3. Se T è chiudibile, $\sigma(T)$ viene identificato con $\sigma(\overline{T})$. Se T non è chiudibile, $\rho(T)=\emptyset$ e $\sigma(T)=\mathbb{C}$.

4. Nelle definizioni del Teorema 2.5, sia $z \in \Delta$, e $(T - zI)$ una biiezione fra $D(T)$ e $\mathcal{X}$. Allora $z \in \rho(T)$.

5. Come in dimensione finita, operatori unitariamente equivalenti hanno il medesimo spettro. Se infatti $S = UTU^{-1}$, U unitario, allora

$$R(z,S) = [UTU^{-1} - zI]^{-1} = [UTU^{-1} - zUU^{-1}] = U^{-1}[T - zI]^{-1}U$$

Poiché tanto U quanto U^{-1} sono biiezioni continue di $\mathcal{X}$, $\rho(S) = \rho(UTU^{-1}) = \rho(T)$.

3.2 Esempi di risolventi

1. L'operatore massimale di derivazione in $L^2(\mathbb{R})$: $T = -iu'$, $D(T) = H^1(\mathbb{R})$. Calcoliamo l'espressione del risolvente. Per deinizione, data $f \in L^2$ occorre risolvere per $u \in H^1$ l'equazione

$$-iu' - zu = f$$

La soluzione di questa equazione differenziale del primo ordine è evidentemente:

$$u(x) = e^{izx} \int_x^{+\infty} e^{-izy} i f(y)\, dy; \quad u(x) = e^{-izx} \int_{-\infty}^{x} e^{izy} i f(y)\, dy$$

Data $f \in L^2$, la prima espressione definisce una funzione H^1 se $\Im z < 0$, mentre la seconda lo fa se $\Im z > 0$. Se $\Im z = 0$ chiaramente esiste $f \in L^2$ per cui $u \notin H^1$. Quindi $\sigma(T) = \mathbb{R}$, $\rho(T) = C \setminus \mathbb{R}$.

2. L'operatore massimale di moltiplcazione Q per la funzione $q(x)$. Si ha in tutta evidenza:

$$R(z,Q) = (Q - z)^{-1} = \frac{1}{q(x) - z}$$

cioè l'azione di $R(z,Q)$ è la moltiplicazione per $\dfrac{1}{q(x) - z}$. Si vede subito che

$$\|(Q - z)^{-1}\| = \|[q(x) - z]^{-1}\|_\infty \leq \frac{1}{C}, \quad C = \mathrm{dist}(z, \overline{codominio(q)})$$

Dunque $\rho(T) = \mathbb{C} \setminus \overline{codominio(q)}$, $\sigma(T) = \overline{codominio(q)}$.

3. Un modo più semplice di dimostrare l'asserzione precedente è usare l'equivalenza unitaria con l'operatore di moltiplicazione attraverso la trasformata di Fourier $\mathcal{F}$. Si ha infatti, come abbiamo già visto: $\mathcal{F}T\mathcal{F}^{-1} = Q_\xi$ dove Q_ξ è l'operatore massimo di moltiplicazione per ξ in $L^2(\mathbb{R}, d\xi)$. Ovviamente si ha

$$R(z, Q_\xi) = \frac{1}{Q_\xi - z} : \quad (R(z, Q_\xi)\hat{f}(\xi) = \frac{\hat{f}(\xi)}{\xi - z}\hat{f}$$

Se $\Im z \neq 0$, è chiaro che $\dfrac{\xi\hat{f}(\xi)}{\xi - z}\hat{f} \in L^2$ e quindi la sua trasformata di Fourier inversa $R(z, T)f$ è in H^1.

4. Il Laplaciano in L^2. Sia $T = -\Delta$, $D(T) = H^2(\mathbb{R}^3)$. Si dimostra subito:

$$\mathcal{F}T\mathcal{F}^{-1} = Q_{|\xi|^2}, \quad |\xi|^2 = \xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2$$

Pertanto, come sopra:

$$\mathcal{F}[T - zI]^{-1}\mathcal{F}^{-1} = \frac{1}{Q_{|\xi|^2} - z} = \frac{1}{|\xi|^2 - z}$$

Quindi: $\sigma(T) = [0, +\infty[$, $\rho(T) = \mathbb{C} \setminus [0, +\infty[$.
Ricaviamo ora l'azione di $[T - zI]^{-1}$. Sia $G(x, z)$ la trasformata di Fourier inversa di $\dfrac{1}{|\xi|^2 - z}$:

$$G(x, z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\langle x, \xi\rangle}}{|\xi|^2 - z}\, d\xi$$

Poiché $\mathcal{F}[T - zI]^{-1}\mathcal{F}^{-1}$ agisce come moltiplicazione di $\dfrac{1}{|\xi|^2 - z}$ su $\hat{f}(\xi)$, $[T - zI]^{-1}f$ agisce come la convoluzione $G(x, z) * f(x)$. Per calcolare $G(x, z)$, eseguiamo l'integrale triplo passando in coordinate polari ed applicando il teorema dei residui per l'integrale finale sulla variabile radiale:

$$\begin{aligned}\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{i\langle x, \xi\rangle}}{|\xi|^2 - z}\, d\xi &= -\frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 \frac{e^{i|\xi||x|\cos\theta}}{|\xi|^2 - z} |\xi|^2\, d(\cos\theta)\, d|\xi| \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}|x|} \int_0^\infty \frac{\sin|\xi||x|}{|\xi|^2 - z} |\xi|\, d|\xi| = \frac{\sqrt{\pi}}{|x|} e^{-\sqrt{-z}|x|}\end{aligned}$$

e pertanto

$$([T - zI]^{-1}f)(x) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{e^{-\sqrt{-z}|x-y|}}{|x - y|} f(y)\, dy \tag{3.3}$$

Ridimostriamo ora le proprietà spettrali di T a partire da questa rappresentazione esplicita del risolvente. Ricordiamo anzitutto la *disuguaglianza di Young*

$$\|f * g\|_s \leq \|f\|_p \|g\|_r, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{r} = 1 + \frac{1}{s}, 1 < s, p, r \leq \infty \tag{3.4}$$

che qui applichiamo con $s = 2$, $p = 1$, $r = 2$:

$$\|f * G\|_2 \leq \|G\|_1 \|f\|_2$$

Ora, con $z = \rho e^{i\theta}$:

$$\|G\|_1 \leq \frac{e^{-\Re\sqrt{-z}|x|}}{|x|} |x|^2 \, d|x| = \frac{1}{\operatorname{dist}(z, [0, +\infty[)} \frac{1}{|z| \sin\theta}$$

e quindi

$$\|R(z,T)\| \leq \frac{1}{\operatorname{dist}(z, [0, +\infty[)}$$

da cui, come sopra, $\sigma(T) = [0, +\infty[$, $\rho(T) = \mathbb{C} \setminus [0, +\infty[$.

5. La soluzione fondamentale. Nella teoria delle equazioni a derivate parziali, si definisce *operatore differenziale a coefficienti costanti* in $\mathbb{R}^n$

   Una distribuzione $G(x) \in \mathcal{D}'$ si dice *soluzione fondamentale* dell'equazione a derivate parziali $P(D)u = f$ se $P(D)G(x) = \delta(x)$. La conoscenza della soluzione fondamentale permette di rsiolvere (formalmente, finché non si specificano le proprietà di regolarità del dato f) l'equazione non omogenea l'equazione non omogenea $P(D)u = f$:

A conclusione di questo paragrafo, dimostriamo la relazione fra spettro e insieme risolvente di un operatore e del suo aggiunto.

Teorema 3.1 *Sia T chiudibile. Allora $\rho(T^*) = \overline{\rho(T)}$, $\sigma(T^*) = \overline{\sigma(T)}$.*

Dimostrazione

Se $z \in \rho(T)$, $\ker(T^* - \overline{z}) = T(T - z)^\perp = 0$. Pertanto:

$$(T^* - \overline{z}I)^{-1} = [(T - zI)^{-1}]^* \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$$

e quindi $\overline{z} \in \rho(T^*)$.

3.3 Proprietà fondamentali del risolvente. La serie di Neumann

Teorema 3.2 (Identità del risolvente). *Sia T un operatore chiuso in $\mathcal{X}$. Allora valgono le segienti identità:*

1. (Prima identità del risolvente)

$$R(z,T) - R(z',T) = (z-z')R(z,T)R(z',T) = \tag{3.5}$$
$$= (z'-z)R(z',T))R(z,T), \quad (z,z') \in \rho(T)$$

   In particolare, risolventi valutati in punti differenti di $\rho(T)$ commutano.

2. (Seconda identità del risolvente) *Siano S, T operatori chiusi in $\mathcal{X}$ con $D(S) \subset D(T)$, e sia $z \in \rho(T) \cap \rho(S)$. Allora si ha*

$$R(z,T) - R(z,S) = R(z,T)(S-T)R(z,S); \tag{3.6}$$
$$R(z,T) - R(z,S) = R(z,T)(S-T)R(z,S) =$$
$$R(z,S)(S-T)R(z,T) \text{ se } D(S) = D(T)$$

Conseguenza diretta di queste identità:

Corollario 3.1

1. *$\rho(T)$ è aperto, e di conseguenza $\sigma(T)$ è chiuso. Più precisamente, se $z_0 \in \rho(T)$, l'insieme $\{z \in \mathbb{C} \,|\, |z - z_0| < \|R(z_0,T)\|^{-1}\}$ è contenuto in $\rho(T)$.*

2. *Se $T \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, allora $\rho(T)\{z \in \mathbb{C} \,|\, |z| > \|T\|\}$, cioè lo spettro di T è un sottoinsieme compatto di $\mathbb{C}$;*

3. *Le funzioni*

$$z \mapsto R(z,T), \quad R(z,T) : \rho(T) \to \mathcal{B}(\mathcal{X})$$
$$z \mapsto R(z,T)f, \quad R(z,T)f : \rho(T) \to \mathcal{X}$$
$$z \mapsto \langle g, R(z,T)f \rangle : \rho(T) \to \mathbb{C}$$

   sono olomorfe.

Per la dimostrazione useremo due risultati preliminari. Il primo è

Lemma 3.1 *Siano S e T biiettivi da $D(S)$, $D(T)$ a $\mathcal{X}$, con $D(S) = D(T)$. Allora:*

$$S^{-1} - T^{-1} = S^{-1}(T - S)T^{-1} = T^{-1}(S - T)S^{-1}$$

Se poi $D(S) \subset D(T)$:

$$S^{-1} - T^{-1} = S^{-1}(T - S)T^{-1}$$

Dimostrazione

Si tratta di una verifica diretta. Si noti che l'operatore $(T - S)T^{-1}$ è definito se $D(S) \subset D(T)$, mentre a priori non lo è $(T - S)S^{-1}$. Ciò dimostra il Lemma.

Il secondo risultato preliminare è un lemma fondamentale per il ragionamento dimostrativo, che utilizzeremo molte alte volte.

Lemma 3.2 *Sia T chiuso e biiettivo da $D(T)$ a $\mathcal{X}$, e sia S tale che $D(T) \subset D(S)$, $\|ST^{-1}\| < 1$. Allora $T + S$ è chiuso e bieittivo da $D(T)$ a $\mathcal{X}$, e si ha*

$$(T + S)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} T^{-1}(ST^{-1})^n = \sum_{n=0}^{\infty}(T^{-1}S)^n T^{-1} \tag{3.7}$$

dove le serie ultime scritte convergono in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$.

Dimostrazione

Osserviamo che l'ipotesi implica la $T-$ limitatezza di S, con $T-$sup $b < 1$. Infatti:

$$\|Su\| \le \|ST^{-1}Tu\| \le \|ST^{-1}\| \cdot \|Tu\| < b\|u\|, \; b < 1$$

Dunque $T + S$ definito su $D(T)$ è chiuso. D'altra parte

$$\|(T + S)u\| \ge \|Tu\| - \|Su\| \ge (\|Tu\| - \|ST^{-1}Tu\|) \ge$$
$$(1 - \|ST^{-1}\|)\|Tu\| > 0 \; \forall, u \in D(T + S) = D(T)$$

e dunque $T + S$ è iniettivo. Dimostriamo ora la (3.7). Osserviamo intanto che esse coincidono termine a termine. Facciamo vedere la loro convergenza in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$. Poniamo: $P_m := \sum_{k=0}^{n}(-1)^n T^{-1}(ST{-}1)^k$. Allora (si ricordi che $T \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$) si ha:

$$\|P_m - P_n\| = \|\sum_{k=m+1}^{n}(-1)^n(ST{-}1)^k\| \le \|T^{-1}\| \sum_{k=m+1}^{n} \|(ST{-}1\|^k \le \sum_{k=m+1}^{n} b^k, \; b < 1$$

e duenque la serie converge in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ perché maggiorata da una serie geometrica convergente. Sia denoti P la somma della serie. Allora $(T + S)P = I$. Infatti:

$$(T + S)P_m = \sum_{k=0}^{m}(T + S)T^{-1}(ST{-}1)^k = I + (-1)^m(ST{-}1)^{m+1} \to I \text{ in } \mathcal{B}(\mathcal{X})$$

Dunque se $P_m u \to P_u$, $\forall\, u \in X$, $(T+S)P_m u \to (T+S)Pu$, $m \to \infty$. Poiché $(T+S)$ èchiuso, ne segue che $PU \in D(T+S)$ e $(T+S)Pu = u$. Inoltre $(T+S)$ è biiettivo fra $D(T)$ e $\mathcal{X}$. Se ne conclude che $= (T+S)^{-1}$ e ciò prova il Lemma.

Dimostrazione del Teorema e del Corollario

Le due affermazioni del teorema seguono dal medesimo ragionamento impiegato per dimostrare il Lemma 8.1. Dimostriamo allora il Corollario. Sia $z_0 \in \rho(T)$, $|z - z_0| \leq \|R)(z_0, T)\|^{-1}$. Facciamo $T \to z_0 - T$, $S \to (z - z_0)I$ nel Lemma 8.2. Allora $\|(ST-1\| < 1$, e $z - T = z_0 - T + z - z_0$ è biiettivo. Dunque $z \in \rho(T)$.Inoltre:

$$R(z, T0 = [(z_0 - T) + (z - z_0)]^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (z - z_0)^n R(z_0, T)^{n+1}$$

Per dimostrare la seconda affermazione, sia $T \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, $|z| > |\mathbb{T}\|$. Facciamo $S = T$ nel Lemma 8.2, e $T = zI$. Allora $\|(ST-1\| < 1$, e $z \in \rho(T)$ perché

$$(z - T)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} z^{-k-1} T^k$$

converge in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ per $|z| > \|T\|$. $\sigma(T)$ è chiuso, e quindi compatto. Le proprietàdi analiticitàdella terza affermazione sono evidenti. Ciò conclude la dimostrazione.

Corollario 3.2 *Sia $\mathcal{X}$ uno spazio di Hilbert, e U unitario in $\mathcal{X}$. Allora $\sigma(U) \subset \{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}$.*

Dimostrazione

Per il corollario precedente, $\{z \in \mathbb{C} : |z| > 1 \subset \rho(U)\}$. Ma U^{-1} è unitario con U, e quindi $\{z \in \mathbb{C} : |z| > 1 \subset \rho(U^{-1})\}$. Dunque $\{z \in \mathbb{C} : |z| < 1 \subset \rho(U)\}$ e ciò prova il Corollario.

4 Operatori simmetrici e autoaggiunti

4.1 Le nozioni di simmetria e autoaggiunzione

Definizione 4.1 *(*Simmetria e autoaggiunzione)

Sia $\mathcal{X}$ uno spazio di Hilbert, e T un operatore in $\mathcal{X}$. Si dice che

1. T è simmetrico *se* $T \subset T^*$.

2. *T è* autoaggiunto *se $T = T^*$;*

3. *T è* essenzialmente autoaggiunto *se $\overline{T}$ è autoaggiunto.*

Teorema 4.1 *1. Se T è simmetrico, e $\mathcal{X}$ complesso, si ha*

$$\langle f, Tg \rangle = \langle Tf, g \rangle, \quad \forall\, (f,g) \in D(T) \times D(T) \tag{4.1}$$

Viceversa, se vale la (4.1) $T \subset T^*$;

2. *Se $T \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, $T \subset T^*$ implica $T = T^*$ (un operatore simmetrico e limitato è autoaggiunto).*

Osservazioni

1. La (4.1) implica $\langle f, Tf \rangle = \langle Tf, f \rangle \in \mathbb{R}\ \forall\, f \in D(T)$. Se esiste $b \in \mathbb{R}$ tale che $\langle f, Tf \rangle \leq b\langle f, f \rangle$ allora T si dice *limitato da sopra*, e se esiste $b \in \mathbb{R}$ tale che $\langle f, Tf \rangle \geq b\langle f, f \rangle$ T si dice *limitato da sotto.*

2. Se T è simmetrico (autoaggiunto) e U unitario, l'immagine unitaria UTU^{-1} è simmetrica (autoaggiunta).

Dimostrazione
L'affermazione 2 è evidente. Per vedere la 1, osserviamo che $T \subset T^*$ implica $\langle f, Tg \rangle = \langle T^* f, g \rangle = \langle Tf, g \rangle$ se $(f,g) \in D(T) \times D(T)$. Inversamente, se $\langle f, Tg \rangle = \langle Tf, g \rangle = \langle f, Tg \rangle = \langle T^* f, g \rangle$ allora $T \subset T^*$ perché $D(T)$ è denso. Ciò prova il teorema.

Esempio 4.1 (Esempi di simmetria e autoaggiunzione)

1. Consideriamo ancora l'operatore integrale T di nucleo $K(x,y)$ sotto le condizioni dell'esempio 1 del §1. Allora T è simmetrico se $K(x,y) = \overline{K(y,x)}$. La dimostrazione è una verifica diretta. Si noti che questa condizione è analoga alla $A_{ik} = \overline{A_{ki}}$ che assicura la simmetria di un matrice $n \times n$ a elementi complessi.

2. Il teorema precedente mostra che simmetria e autoaggiunzione sono nozioni differenti solo nel caso di operatori non limitati. L'esempio più semplice è il seguente: su $\mathcal{X} = L^2(a,b)$, $-\infty < a < b < +\infty$, sia $T_1 = -iu'$, $D(T_1) = \{u \in$

$H^1(a,b) \mid u(a) = u(b) = 0\}$ (condizioni al bordo di Dirichlet). T_1 è simmetrico. Infatti, se $(f,g) \in D(T_1) \times D(T_1)$:

$$\langle T_1 f, g\rangle = -i \int_a^b f'(x)\overline{g(x)}\,dx = -i[f(x)\overline{g(x)}]_a^b + i\int_a^b f(x)\overline{g'(x)} = \langle f, T_1 g\rangle$$

dato che il fattor finito si annulla per le condizioni al contorno. D'altra parte, $T_1^* = T$, dove T è l'operatore massimale definito sopra. Infatti per il medesimo calcolo si trova $\langle T_1 f, g\rangle = \langle f, Tg\rangle$ con $f \in D(T_1)$, $g \in D(T)D(T_1)$ perché per l'annullarsi del fattor finito basta l'annullarsi di f agli estremi, e quindi g può assumere qualsiasi valore al bordo.

3. Sia Q_f l'operatore massimale di moltiplicazione per la funzione $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^n)$. Se f ha valori reali Q_f è ovviamente autoaggiunto.

4. Sia $T = -\Delta$, $D(T) = H^2(\mathbb{R}^3)$. Allora $T = T^*$. Infatti, denotando ancora F la trasformata di Fourier, sappiamo che $FTF^{-1} = Q_{|\xi|^2}$. Pertanto T è autoaggiunto per l'osservazione 2 precedente.

Elenchiamo ora ulteriori proprietà fondamentali degli operatori simmetrici.

Teorema 4.2 *Sia T simmetrico in $\mathcal{X}$. Allora:*

1. *Se λ è autovalore di T, allora $\lambda \in \mathbb{R}$;*

2. *Autovettori corrrispondenti ad autovalori differenti di T sono ortogonali;*

3. *Sia $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Allora $T - zI$ è iniettivo. In generale $R(T - zI) \neq X$. Su $R(T)$ si ha*
$$\|R(z,T)\| \leq \frac{1}{|\Im z|}$$

Dimostrazione
1. Sia $Tu = \lambda u$. Allora $\langle Tu, u\rangle = \lambda\langle u, u\rangle$ da cui $\lambda = \dfrac{\langle Tu, u\rangle}{\langle u, u\rangle} \in \mathbb{R}$.
2. Sia $Tu_1 = \lambda_1 u_1$, $Tu_2 = \lambda_2 u_2$, $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Allora, usando la simmetria di T:

$$0 = \langle Tu_1, u_1\rangle - \langle u_1, Tu_2\rangle = (\lambda_1 - \lambda_2)\langle u_1, u_2\rangle$$

da cui $\langle u_1, u_2\rangle$ perché $\lambda_1 \neq \lambda_2$.
3. Sia $z = x + iy$. Allora, con $u \in D(T)$:

$$\|(T - zI)u\|^2 = \|(T - xI)u + iIyu\|^2 = \|(T - xI)u\|^2 + |y|^2\|u\|^2 \geq |y|^2\|u\|^2$$

e dunque $(T - zI)$ è iniettivo. Sia ora $v \in R(T - zI7,\ v = (T - zI)u$. Allora:

$$\|R(z,T)v\| = \|u\| \leq \frac{1}{|y|}\|(T - zI)u\| = \frac{1}{|\Im z|}\|v\|$$

e ciò conclude la dimostrazione.

Come accertarsi che un operatore simmetrico è autoaggiunto?

4.2 Caratterizzazioni dell'autoaggiunzione

Teorema 4.3 (Criterio fondamentale per l'autoaggiunzione)
Sia T simmetrico in $\mathcal{X}$. Allora T è autoaggiunto (essenzialmente autoaggiunto) se e solo se $R(T \pm iI) = \mathcal{X}$ ($R(T \pm iI)$ denso in $\mathcal{X}$: $\overline{R(T \pm iI)} = \mathcal{X}$). In questa sserzione si può sostituire $\pm i$ con $z_{\pm}$, dove $\Im z_+ > 0$, $\Im z_- < 0$.

Osservazioni

1. I numeri non negativi:

   $$m_{\pm} := \dim[X \ominus R(T \pm iI] = \dim[X \ominus R(T + z_{\pm}I)]$$

   si dicono *indici di difetto* dell'operatore simmetrico T. Dunque un operatore simmetrico è autoaggiunto se e solo se in suoi indici di difetto sono $(0,0)$. Poiché $R(T) = \ker(T^*)$, si ha l'espressione consueta degli indici di difetto

   $$m_{\pm} = \dim\ker[T^* \mp iI]$$

2. Esercizio: T è essenzialmente autoaggiunto se e solo se T^* è simmetrico e allora $\overline{T} = T^*$.

Dimostrazione
1. Sia $R(T \pm iI) = \mathcal{X}$. Dimostriamo che $T = T^*$. Poiché T è simmetrico, $T \pm iI$ è iniettivo, e quindi una biiezione fra $D(T)$ e $\mathcal{X}$. Per il teorema precedente si ha allora $\|(T \pm iI)^{-1}\| \leq \dfrac{1}{|i|} = 1$. Ragionando con la serie di Neumann come in precedenza si prova senza difficiltà che $\|(T - zI)^{-1}\| \leq \dfrac{1}{|\Im z|}$, $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Dunque $T - zI$ è una biiezione fra $D(T)$ e $\mathcal{X}$ $\forall\, z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Per ipotesi $T \subset T^*$. Mostriamo che $T^* \subset T$, cioè

che $D(T^*) \subset D(T)$. Sia dunque $u \in D(T^*)$, e sia $v = (iI - T)^{-1}(iI - T^*)u$. Allora, ricordando che $v \in D(T) \subset D(T^*)$, $Tv = T^*v$, e $(iI - T)v = (iI - T^*)u$:

$$(iI - T^*)(u - v) = (iI - T^*)u - (iI - T^*)v = (iI - T)v - (iI - T)v = 0$$

da ciò segue

$$u - v \in \ker(iI - T^*) = R(-iI - T)^\perp = \mathcal{X}^\perp = \{0\}$$

Dunque $u = v$; ma $v \in D(T)$ e quindi $D(T^*) \subset D(T)$.
Se $\overline{R(z_\mp - T)} = \mathcal{X}$, allora $R(z_\mp - \overline{T}) = \mathcal{X}$. Pertanto $R(z_\mp - \overline{T}) = D((z_\mp - \overline{T}))^{-1}$ è chiuso. Poiché $\overline{T}$ è simmetrico, per il ragionamento precedente $\overline{T}$ è autoaggiunto.
2. Inversamente, sia $T = T^*$, $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Allora $R(z, T)$ è chiuso e limitato su $R(T - zI)$. In altre parole, $D(R(z, T)) = R(T - zI)$ è chiuso. Facciamo vedere che $R(zI - T)^\perp = \{0\}$. Sia $u \perp R(zI - T)$. Allora $u \in \ker(zI - T)^* = \ker(\overline{z} - T)$. Dunque $\overline{z}$ è autovalore di T, cosa impossibile perché $z \notin \mathbb{R}$. Dunque $u = 0$.
Se T è essenzialmente autoaggiunto, facciamo vedere che $\overline{R(z_\mp I - T)} = \mathcal{X}$. Infatti:

$$\overline{R(z_\mp I - T)} = R(z_\mp I - T)^{\perp\perp} = \ker(z_\mp - T^*) = \ker(z_\mp - \overline{T}) = \{0\}^\perp == \{0\}$$

Ciò conclude la dimostrazione.

Corollario 4.1 *Se $T = T^*$, $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$.*

Consideriamo ora gli operatori autoaggiunti semilimitati.

Teorema 4.4 *Sia $T = T^*$ limitato inferiormente da γ_T: $\langle Tu, u\rangle \geq \gamma_T \langle u, u\rangle$. Allora $\sigma(T)$ è limitato inferiormente da $\sup \gamma_T$.*

Dimostrazione
Sia Δ il complemento della chiusura del codominio numerico $\Theta(T)$. Poiché Δ è convesso, $[\gamma, +\infty[\subset \Delta$. Inoltre $\Delta \subset \rho(T)$, perché $\|R(z, T)\| \leq \delta^{-1}$ per $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ (con il consueto ragionamento della serie di Neumann). Allora $\sigma(T)$ è limitato inferiormente da $\gamma_\sigma := \sup \gamma_T$ e viceversa.
Inversamente, sia $\sigma(T)$ limitato inferiormente da γ_σ. Sia $S := T - \gamma_\sigma$. Allora $\sigma(S) \subset \mathbb{R}_+$. Pertanto (sempre tramite la serie di Neumann) $\|(S + \alpha)^{-1}\| \leq \alpha^{-1}$, $\alpha > 0$. Allora, $\forall\, u \in D(T)$:

$$\|u\| \leq \alpha^{-1}\|(S + \alpha)u\| \Longrightarrow \|u\|^2 \leq \alpha^{-2}\|Su\|^2 + 2\alpha^{-1}\langle Su, u\rangle + \|u\|^2 \Longrightarrow$$
$$0 \leq \alpha^{-1}\|Su\|^2 + 2\langle Su, u\rangle \to 2\langle Su, u\rangle \geq 0,\ \alpha \to \infty$$

Dunque $S \geq 0$, $T \geq \gamma_\sigma$ e ciò prova il Teorema.

5 Operatori autoaggiunti e famiglie spettrali

5.1 La risoluzione dell'identità e la misura spettrale

Sia T una matrice simmetrica su C^n (ogni operatore à su uno spazio di Hilbert complesso a dimensione n è ad essa isomorfo). Sappiamo che essa ammette esattamente n autovalori reali $\lambda_i : i = 1, \ldots, n$, contati secondo la loro molteplicità m_i. In generale: $\sum_{i=1}^{k} m_i = n$ se ci sono $1 \leq k \leq n$ autovalori distinti. Sia M_i, $\dim M_i = m_i$ il sottospazio sotteso dagli m_i autovettori linearmente indipendenti corrispondenti all'autovalore λ_i. Senza ridurre la generalità potremo smpre supporre che questi autovettori siano ortonormali e formino così una base in M_i. Sia P_i l'operatore di proiezione ortogonale da $\mathcal{X}$ a M_i. Allora si ha

Teorema 5.1 (Teorema spettrale per le matrici simmetriche)
Vale la rappresentazione:

$$T = \sum_{l=1}^{k} \lambda_l P_l \tag{5.1}$$

o, equivalentemente

$$\langle Tu, u \rangle = \sum_{i=1}^{k} \lambda_l \|P_l u\|^2; \quad \|Tu\|^2 = \sum_{l=1}^{k} \lambda_l^2 \|P_l u\|^2, \quad \forall\, u \in \mathbb{C}^n$$

Dimostrazione Si tratta di una verifica banale. Poiché T è simmetrico, i suoi autovettori formano una base ortonormale. Pertanto:

$$\bigoplus_{i=1}^{k} P_i = I, \quad \text{ovvero} \quad u = \sum_{i=1}^{k} P_k u \tag{5.2}$$

(questa fromula si dice *decomposizione dell'identità*. Dunque:

$$Tu = T[\sum_{l=1}^{k} P_l k u] = \sum_{l=1}^{k} T P_l u = \sum_{l=1}^{k} \lambda_l P_l u$$

il che prova l'asserto.

Osservazione

Definiamo la funzione $t \mapsto E(t)$ da $\mathbb{R}$ a valori nei proiettori ortogonali in $\mathbb{C}^n$ nel modo seguente:

$$\begin{cases} E(t) = 0, -\infty \leq t < \lambda_1; \\ E(t) = P_1, \lambda_1 \leq t < \lambda_2, \\ E(t) = P_1 + P_2, \lambda_2 \leq t < \lambda_3; \\ \ldots \\ E(t) = P_1 + P_2 + \ldots + P_k = I, \lambda_1 + \lambda_2 + \ldots + \lambda_l \leq t \leq +\infty \end{cases}$$

e osserviamo che si verificano immediatamente le seguenti proprietà:

1. $E(t)$ è un proiettore ortogonale $\forall\, t \in \mathbb{R}$, e $E(t)E(s) = E(s)E(t) = E(\min(t,s))$;
2. $E(t)$ è continua a destra: $\lim\limits_{h \to 0_+} E(t+h) = E(t)$.
3. La formula (5.1) può essere riscritta sotto forma di integrale (di Stieltjes-Lebesgue)
$$T = \int_{\operatorname{supp} \sigma(T)} \lambda \, dE(\lambda) \tag{5.3}$$

Queste proprietà, portate in dimensione infinita, costituiscono il teorema spettrale (Hilbert-Schmidt-Stone-Von Neumann).

Sia infatti $\mathcal{X}$ uno spazio di Hilbert, e $\lambda \mapsto M(\lambda) : \mathbb{R} \to \mathcal{X}$ una famiglia di sottosazi chiusi con le seguenti proprietà:

1. $\bigcap\limits_{\lambda \in \mathbb{R}} M(\lambda) = \{0\}$; $\quad \overline{\bigcup\limits_{\lambda \in \mathbb{R}}} = \mathcal{X}$;
2. $M(\lambda)$ è *crescente*: $M(\lambda) \subset M(\mu)$ se $\lambda < \mu$.

Esempio 5.1 (Esempio di famiglia crescente)

La famiglia M_i definita sopra. La sua generalizzazione a dimensione numerabile è la seguente: sia $\mathcal{X}$ separabile, e $\{e_i\} : i = 0, 1, \ldots$ un sistema ortonormale completo in $\mathcal{X}$. Poniamo:

$$\begin{cases} M(\lambda) = 0, \quad -\infty \leq \lambda < 0; \\ M(\lambda) = \{0\} \oplus e_0, \quad 0 \leq \lambda < 1, \\ M(\lambda) = \{0\} \oplus e_0 \oplus e_1, \quad 1 \leq \lambda < 2; \\ \ldots\ldots \\ M(\lambda) = \{0\} \oplus e_0 \oplus e_1 + \ldots + \oplus e_k, \quad k \leq \lambda < k+1, k = 2, \ldots \end{cases} \tag{5.4}$$

Si vede subito che questa definizione implica:

$$M(\lambda + 0) = \bigcap_{\mu > \lambda} M(\mu) = M(\lambda), \qquad M(\lambda - 0) = \overline{\bigcup_{\mu < \lambda} M(\mu)} \subset M(\lambda) \tag{5.5}$$

In generale, quindi

Definizione 5.1 (Famiglia semicontinua di sottospazi) *La famiglia* $M(\lambda)$ *è* continua a destra *se* $M(\lambda+0) = M(\lambda)$, *e* continua a sinistra *se* $M(\lambda-0) = M(\lambda)$.

Osservazione

Negli esempi precedenti $M(\lambda)$ è continua a destra.

Sia ora $\lambda \mapsto E(\lambda)$ la famiglia dei proiettori ortogonali su $M(\lambda)$. Si vede subito che le proprietà 1 e 2 precedenti implicano le due corrispondenti proprietà per $E(\lambda)$:

(i)
$$s - \lim_{\lambda \to -\infty} E(\lambda) = 0, \qquad s - \lim_{\lambda \to +\infty} E(\lambda) = I$$

(ii) $E(\lambda)$ è non decrescente, $E(\lambda) \leq E(\mu)$ per $\lambda \leq \mu$. Ciò significa $\langle E(\lambda)u, u\rangle \leq \langle E(\mu)u, u\rangle$, $\forall\, u \in X$, o anche
$$E(\lambda)E(\mu) = E(\mu)E(\lambda) = E(\min(\lambda, \mu))$$

Definizione 5.2 (Risoluzione dell'identità)
Se $\lambda \mapsto E(\lambda)$ *è una famiglia di proiettori ortogonali che soddisfa le proprietà (i) e (ii) precedenti, ed inoltre fortemente continua a destra,* $E(\lambda+0) := \lim_{\epsilon\downarrow 0} E(\lambda+\epsilon) = E(\lambda)$ *si dice* risoluzione dell'identità *o* famiglia spettrale

Esempio 5.2 (Esempi di risoluzione dell'identità)

1. Generalizziamo l'esempio espresso dalle (5.4, 5.5) in modo tale da ottenere un'analogia completa della famiglia spettrale finita. Sia $\{P_i\}$ una successione di proiettori ortogonali a due a due in $\mathcal{X}$ separabile: $P_iP_j = \delta_{i,j}P_i$, $\bigoplus_{i=0}^{\infty} R(P_i) = \mathcal{X}$. $\{\lambda_i\} : i = 0, 1, \ldots$ è una successione reale di numeri distinti a due a due $l_i \neq \lambda_j, i \neq j$. Allora la funzione a valori nei proiettori ortogonali
$$\lambda \mapsto E(\lambda) := \sum_{i:\lambda_i \leq \lambda} P_i, \qquad \lambda \in \mathbb{R}$$
è una famiglia spettrale. Si vede infatti subito che: $E(\lambda)$ è un roiettore ortogonale $\forall\, \lambda \in \mathbb{R}$, che $E(-\infty) = 0$, che $E(+\infty) = I$, e che $E(\lambda) \leq E(\mu)$ se $\lambda \leq \mu$. Verifichiamo la continuità a destra. Si ha:
$$\|E(\lambda+\epsilon)u - E(\lambda)u\|^2 = \sum_{i:\lambda<\lambda_i\leq\lambda+\epsilon} \|P_iu\|^2 =$$
$$\sum_{\substack{i:\lambda<\lambda_i\leq\lambda+\epsilon \\ i\leq n_0(\epsilon)}} \|P_iu\|^2 + \sum_{\substack{i:\lambda<\lambda_i\leq\lambda+\epsilon \\ i>n_0(\epsilon)}} \|P_iu\|^2 < \delta_1(\epsilon) + \delta_2(\epsilon)$$

$\delta_1(\epsilon) \to 0$ per $\epsilon \downarrow 0$ perché $\forall\, n_0(\delta) \in \mathbb{N}\ \exists \epsilon > 0$ t.c. $\lambda_i \notin (\lambda, \lambda + \epsilon)$ per $i \leq n_0$; $\delta_2(\epsilon) \to 0$ perché la serie è convergente.

2. Sia $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ aperto, e $g : \Omega \to \mathbb{R}$ misurabile. $\forall\, \lambda \in \mathbb{R}$, sia $\Omega(\lambda) := \{x \in \Omega : g(x) \leq \lambda\}$. Allora:

$$E(\lambda)f = \chi_{\Omega(\lambda)} f, \qquad f \in L^2(\Omega) \tag{5.6}$$

è una famiglia spettrale in $L^2(\Omega)$. Qui χ_A denota al solito la funzione caratteristica dell'insieme A. Anche qui l'unica cosa non immediatamente ovvia è la continuità a destra, che ora verifichiamo.

$$\|[E(\lambda + \epsilon_n) - E(\lambda)]u\|^2 = \int_\Omega [\chi_{\Omega(\lambda+\epsilon_n)} - \chi_{\Omega(\lambda)}]|u(x)|^2\, dx \to 0,\ \epsilon_n \to 0$$

Infatti, $0 \leq [\chi_{\Omega(\lambda+\epsilon_n)} - \chi_{\Omega(\lambda)}] \leq 1$, e $[\chi_{\Omega(\lambda+\epsilon_n)} - \chi_{\Omega(\lambda)}] \to 0$ per $n \to \infty$ $\forall\, x \in \Omega$. L'asserzione è quindi una conseguenza del teorema della convergenza dominata.

5.2 Il teorema spettrale per gli operatori autoaggiunti

Procediamo ora alla costruzione della misura spettrale a partire dalla famiglia spettrale $E(\lambda)$. Sia $\Delta \subset \mathbb{R}$ un intervallo chiuso a destra: $\Delta =]\lambda_1, \lambda_2]$. Si ponga poi: $E(\Delta) = E(\lambda_2) - E(\lambda_1)$. Allora $E(\Delta)$ è il proiettore su $M(\Delta) = M(\lambda_2) \ominus M(\lambda_1) = M(\lambda_2) \cap M(\lambda_1)^\perp$.

Proposizione 5.1

1. *Se* $\Delta_1 \cap \Delta_2 = \emptyset$ *se e solo se* $E(\Delta_1)E(\Delta_2) = E(\Delta_2)E(\Delta_1) = 0$;

2. *Sia* $P(\lambda) := E(\lambda) - E(\lambda - 0) = E(\lambda + 0) = E(\lambda - 0)$ *la proiezione su* $M(\lambda) \ominus M(\lambda - 0)$. *Allora* $P(\lambda) \neq 0$ *se e solo se* $E(x)$ *è discontinua a* $x = \lambda$, *e si ha*

$$P(\lambda)P(\mu) = P(\mu)P(\lambda) = 0, \qquad \lambda \neq \mu$$

Dimostrazione

1. Si ha

$$E(\Delta_1)E(\Delta_2) = [E(\lambda_2) - E(\lambda_1)][E(\mu_2) - E(\mu_1)] = E[\min(\lambda_2, \mu_2)] -$$
$$E[\min(\lambda_2, \mu_1)] - E[\min(\lambda_1, \mu_2)] + E[\min(\lambda_1, \mu_1)] =$$
$$E(\lambda_2) - E(\lambda_2) - E(\lambda_1) + E(\lambda_1) = 0$$

2. Discontinuità: segue direttamente dalla definizione. La proprietà $P(\lambda)P(\mu) = P(\mu)P(\lambda) \leq 0$ se e solo se $\lambda \neq \mu$ la si verifica con un calcolo identico a quello del n.1 qui sopra. Ciò prova la Proposizione.

La costruzione della misura spettrale procede ora in completa analogia alla costruzione della misura di Lebesgue-Stieltjes. l'unica differenza è che essa prende valori nei proiettori e non in $\mathbb{R}_+$.

Sia S l'unione di un numero finito di intervalli reali disgiunti qualsiasi (aperti, chiusi, semiaperti). Allora in generale S è l'unione disgiunta di intervalli come il Δ precedente e di punti isolati $\{\lambda\}$. Definiamo quindi $E(S)$ in modo corrispondente tramite i proiettori $E(\Delta_j)$ e $P(\lambda_j)$:

Definizione 5.3 (Misura spettrale elementare)
Sia $S := \bigcup_{j=1}^{k} (\Delta_j \cup \{\lambda_j\}$ *(unione disgiunta). Allora*

$$E(S) := \sum_{j=1}^{k} [E(\Delta_j) + P(\lambda_j)]$$

Osservazioni

1. Se $S_1 \cap S_2 = \emptyset$, si ha evidentemente $E(S_1 \cup S_2) = E(S_1) \oplus E(S_2)$; in ogni caso, poi, $E(S_1)E(S_2) = E(S_1 \cap S_2)$. $E(S)$ definita sulle unioni finite di intervalli si chiama *misura spettrale*. Per la costruzione standard, essa ammette estensione unica a tutti i Boreliani di $\mathbb{R}$.

2. Si vede subito che $\forall\, u \in X$ ma funzione

$$\rho_u(\lambda) = \langle E(\lambda)u, u\rangle = \|E\lambda)u\|^2 \geq 0$$

è monotona non decrescente e limitata. Infatti $\rho_u(-\infty) = 0$, e $\rho_u(+\infty) = \|u\|^2$.

3. γ si dice *punto di costanza* di $E(\lambda)$ se $E(\gamma - \epsilon) = E(\gamma + \epsilon)\ \forall\, \epsilon > 0$.

4. Dicesi *supporto* di $E(\lambda)$ il complementare dei suoi punti di costanza: $\mathrm{supp}\, E(\lambda) = \gamma \in \mathbb{R} : \exists\, \epsilon > 0\, t.c.\ E(\gamma_\epsilon) \neq E(\gamma + \epsilon)$.

Teorema 5.2 (Teorema spettrale (Hilbert-Schmidt-Hellinger-Töplitz-Stone-Von Neumann))
Sia $\lambda \mapsto E(\lambda)$ una famiglia spettrale in $\mathcal{X}$. Allore esiste un operatore autoaggiunto H in $\mathcal{X}$, denotato

$$H = \int_{\mathbb{R}} \lambda\, dE(\lambda) \tag{5.7}$$

nel senso seguente:

1. $$D(H) = \{u \in X \mid \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d\langle E(\lambda)u, u\rangle < +\infty;$$

2. $\langle Hu, v\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda\, d\langle E(\lambda)u, v\rangle, \quad (u, v) \in D(H)$ *di modo tale che*

$$\|Hu\|^2 = \langle Hu, Hu\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda\, d\langle E(\lambda)u, Hu\rangle =$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda\, d_\lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \mu\, d_\mu \langle E(\lambda)u, E(\mu)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda\, d_\lambda \int_{-\infty}^{\lambda} \mu\, d\langle E(\mu)u, u\rangle$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2\, d\langle E(\lambda)u, u\rangle, \qquad u \in D(H)$$

3. *Sia $\lambda \mapsto \phi(\lambda)$ continua a valori in $\mathbb{C}$ e limitata su* $\mathrm{supp}\, E(\lambda)$. *Allora la formula*

$$\phi(H) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\lambda)\, dE(\lambda) \tag{5.8}$$

definisce un operatore in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$. Infatti:

$$\|\phi(H)u\|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(\lambda)|^2\, d\langle E(\lambda)u, u\rangle \leq \sup_{\mathbb{R}} |\phi(\lambda)|^2 \|u\|^2$$

In particolare, per $\phi = (\lambda - z)^{-1}$, $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, si ottiene la rappresentazione spettrale del risolvente di H:

$$R(z, H) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE(\lambda)}{\lambda - z} \tag{5.9}$$

4. $\sigma(H) = \mathrm{supp}\, E(\lambda)$.

Inversamente, sia $H = H^*$. Allora esiste una misura spettrale $E(\lambda)$ ed una sola tale che le asserzioni 1-4 sono vere. Un'espressione esplicita di $E(\lambda)$ è data dalla Formula di Stone

$$E(\Delta) = E(\mu) - E(\lambda) = s - \lim_{\delta \downarrow 0} \lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda+\delta}^{\mu+\delta} [R(t - i\epsilon, H) - R(t + i\epsilon, H)]\, dt \tag{5.10}$$

Osservazioni e esempi

1. $H \geq \gamma$ se e solo se $E(\gamma - 0) = 0$;

2. Se λ è un punto isolato di $\sigma(H)$ è un autovalore. Il viceversa non è vero.

3. Sia H compatto. Allora (teorema di Hilbert-Schmidt) $\sigma(H)$ consiste in un insieme al più numerabile $\{\lambda_j\}$ di autovalori isolati di molteplicità finita, che si possono accumulare al più a 0. In questo caso, quindi, la famiglia spettrale è quella dell'esempio 1 precedente. Detti P_j i corrispondenti proiettori ortogonali, si ha

$$E(\lambda) = P_0 + \sum_{j:\lambda_j \leq \lambda} P_j; \quad Hu = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j P_j u, \ \forall\, u \in D(H)$$

   dove P_0 proietta sul sottospazio corrispondente all'autovalore 0.

4. *Lo spettro discreto.* Il sottoinsieme di $s(H)$ costituito da tutti e soli gli autovalori isolati di molteplicità finita $\{\lambda_j\} : j = 0, 1, \ldots$ si dice *spettro discreto*, e si denota $\sigma_d(H)$. Il complementare $\sigma(H) \setminus \sigma_d(H)$ si dice *spettro essenziale* di H e lo si denota $\sigma_{ess}(H)$. Se H ècompatto $\sigma_{ess}(H) = \{0\}$. Se lo spettro è discreto, il teorema spettrale assume la forma

$$H = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j P_j \tag{5.11}$$

6 Alcuni richiami di meccanica analitica

Consideriamo un sistema di N punti materiali non vincolati. li possiamo descrivere on $n = 3N$ coordinate cartesiane $\mathbf{q} = (\mathbf{q_1}, \ldots, \mathbf{q_N})$ che identifichiamo con le coordinate $(q_1, \ldots, q_{3n})$. Lo *spazio delle configurazioni* del sistema sarà dunque $\mathbb{R}^n$. Ammettiamo inoltre che il sistema sia conservativo: esista una funzione regolare $V(\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n)$ tale che la forza $\mathbf{F}_i$ che agisce sull' i-esimo punto è

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_{\mathbf{q}_i} V(\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n)$$

Il moto può essere descritto in tre formulazioni equivalenti:

1. Newtoniana.

Equazioni del moto:

$$\ddot{q}_i(t) = -\frac{\partial V}{\partial q_i}(q_i(t), \dots, q_n(t)) \tag{6.1}$$

che ammettono soluzione unica, se V è decente, per ogni assegnamento delle $6n$ condizioni iniziali di posizione e velocità $(\mathbf{q}_1(0), \dots, \mathbf{q}_n(0); \dot{\mathbf{q}}_1(0), \dots, \dot{\mathbf{q}}_n(0))$ all'istante iniziale $t = 0$;

2. Lagrangiana.

Le equazioni (6.1) possono essere riscritte sotto la forma:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}_i} - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}_i} = 0 \tag{6.2}$$

Qui L è la lagrangiana del sistema: $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = T - V$, T essendo l'energia cinetica: $T = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} m_k \dot{\mathbf{q}}_k^2$. Le condizioni iniziali rimangono inalterate.

3. Hamiltoniana.

L'Hamiltoniana è la trasformata di Legendre della Lagrangiana:

$$H(p, q) = \max_{\dot{q} \in \mathbb{R}^{3n}} [\langle p, \dot{q} \rangle - L(q, \dot{q})] \tag{6.3}$$

Si ottiene subito, al solito

$$\mathbf{p}_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}_i} = m_i \dot{\mathbf{q}}_i; \quad \dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}$$

e pertanto

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m_k} + V(\mathbf{q})$$

Le variabili $\mathbf{p}_i$ si dicono *impulsi hamiltoniani coniugati.* allora le equazioni del moto si possono riscrivere sotto forma di $6n$ equazioni del primo ordine, le equazioni di Hamilton:

$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}_i}; \qquad \dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \tag{6.4}$$

che necessitano sempre di $6n$ condizioni iniziali per ammettere soluzione unica. Lo spazio delle coordinate Hamiltoniane $(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n; \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$, dette anche *coordinate canoniche*, è $R^{6n} = T^*\mathbb{R}^{3n}$, dove T^* denota il *fibrato cotangente*. Esso si dice *spazio delle fasi*.

6.1 Formalismo canonico

Una funzione decente $F(p,q): T^*\mathbb{R}^{3n} \to \mathbb{R}$ si dice *osservabile.*

Esempio 6.1 (Esempi di osservabili)

L'energia $E = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}$, le componenti del momento della quantià di moto di un punto in moto nello spazio $\mathbb{R}^3$, $L_1 = q_2p_3 - p_2q_3$, $L_2 = q_1p_3 - p_1q_3$, $L_3 = q_1p_2 - p_1q_2$, il quadrato del momento della quantità di moto $L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$, ecc.

Sia ora per semplicità $p = (p_1, \dots, p_n)$, $q = (q_1, \dots, q_n)$ (sistema a n gradi di libertà). Date due osservabili $F(p,q)$, $G(p,q)$ la loro *parentesi di Poisson* è definita nel modo seguente:

$$\{F, G\} := \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial p_k}\frac{\partial G}{\partial q_k} - \frac{\partial G}{\partial p_k}\frac{\partial F}{\partial q_k} \tag{6.5}$$

Esercizio 1 Si dimostrino le *relazioni canoniche elementari*

$$\{p_i, p_k\} = \{q_i, q_k\} = 0; \qquad \{p_i, q_k\} = \delta_{i,k} \tag{6.6}$$

Esercizio 2 (Le parentesi di Poisson formano un'algebra di Lie). Dimostrare che:

$$\{F, G\} = -\{G, F\}; \quad \{F, \lambda_1 G + \lambda_2 H\} = \lambda_1\{F, G\} + \lambda_2\{F, H\} \tag{6.7}$$

$$\{\{F, G\}, H\} + \{\{G, H\}, F\} + \{H, F\}, G\} = 0 \quad (\text{Identita}' \text{ di Jacobi}) \tag{6.8}$$

Data un'Hamiltoniana H, dicesi *flusso Hamiltoniano corrispondente* la biiezione $(p_0, q_0) \mapsto [p(t; p_0, q_0); q(t; p_0, q_0)]$ da $\mathbb{R}^n$ in sè definita dalle soluzioni delle equazioni (6.4).

Una notazione più compatta è la seguente: sia $x := (q, p) \in \mathbb{T}^*\mathbb{R}^n$. Si definiscano poi la *matrice simplettica unitaria* J *e il gradiente simplettico* $J\nabla f$ *di una funzione* $f: \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}$ *nel modo seguente*

$$J := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}; \quad J\nabla f = \left(\partial f_{x_{n+1}}, \dots, \partial f_{x_{n+1}}; -\partial f_{x_1}, \dots, \partial f_{x_n}\right) \tag{6.9}$$

Le equazioni di Hamilton (6.4) possono essere pertanto riscritte come

$$\dot{x} = J\nabla H(x); \quad J\nabla H(x) := \mathcal{X}_H = (-\nabla_q H, \nabla_p H)$$

Il campo vettoriale $J\nabla H(x)$ si dice *campo vettoriale Hamiltoniano.*

Teorema 6.1 (Liouville)
Il flusso Hamiltoniano conserva i volumi nello spazio delle fasi.

Dimostrazione

Il campo vettoriale Hamiltoniano X_H ha divergenza nulla:

$$\mathrm{div} J\nabla H(x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_k} - \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial p_k} = 0$$

Data un'osservabile F, calcoliamone la sua derivata lungo il flusso Hamiltoniano X_H, *per definizione* la derivata di Lie L_{X_H}. Si ha

Lemma 6.1 *Vale la formula*

$$L_{X_H} F(p(t), q(t)) = \{H, F\}(p(t), q(t)) \tag{6.10}$$

Dimostrazione

Si ha, per definizione di derivata lungo la direzione di un campo vettoriale di curve integrali $x(t) = (p(t), q(t))$:

$$\begin{aligned} L_{X_H} F &= \frac{d}{dt} F(p(t), q(t)) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i = \\ &= -\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} = \{H, F\} \end{aligned}$$

Poiché $L_{X_H} F = 0$ se e solo se $\{H, F\} = 0$:

Corollario 6.1 *L'osservabile F è un integrale primo per il flusso generato dall'Hamiltoniana H se e solo se la parentesi di Poisson $\{H, F\}$ si annulla.*

L'aspetto forse più importane del formalismo Hamiltoniano è la possibilità di cambiare coordinate mantenendo inalterata la forma delle equazioni.

Definizione 6.1 *Una biiezione $\mathcal{C} : (p, q) \leftrightarrow (\xi(p, q), x(p, q))$ di $\mathbb{R}^{2n}$ in sè si dice (completamente)* canonica *se conserva le parentesi di Poisson:*

$$\{\xi(p, q), x(p, q)\} = \{p, q\}$$

Esercizio

Dimostrare che la trasformazione in coordinate polari

$$(p, q) \mapsto \begin{cases} A(p, q) = \sqrt{p^2 + q^2} \\ \phi(p, q) = -\mathrm{arctg} \dfrac{p}{q} \end{cases}$$

è canonica.

Teorema 6.2 *Data l'Hamiltoniana $H(p,q)$, sia $K(\xi,x)$ la sua immagine attraverso la trasformazione canonica $\mathcal{C}$ della definizione 6.1. Allora le funzioni $t \mapsto (p(t),q(t))$ risolvono le equazioni di Hamilton $\dot p_i = -\partial H/\partial q_i$, $\dot q_i = -\partial H/\partial p_i$ se e solo se le funzioni $(\xi(t),x(t)) = \mathcal{C}((p(t),q(t))$ risolvono le equazioni di Hamilton $\dot\xi_i = -\partial K/\partial x_i$, $\dot x_i = -\partial K/\partial \xi_i$.*

Dimostrazione. Si vedano i libri di Meccanica razionale.[10]

6.2 Il metodo di Jacobi

Le equazioni di Hamilton si integrano immediatamente se l'Hamiltoniana dipende solo dalla metà delle coordiante canoniche. Ad esempio, solo dalle p. Infatti se $H = H(p)$ si ha

$$\dot p_i = 0 \Longrightarrow p_i = \text{cost.}, \quad \dot q_i = \omega_i(p) \Longrightarrow q_i(t) = \omega_i(p)t + q_i^0, \quad \omega_i(p) := \nabla_{p_i} H(p)$$

Dunque il problema di integrare le equazioni di Hamilton può essere affrontato così (metodo di Jacobi): trovare la trasformazione canonica che trasforma l'Hamiltoniana data in una nuova che dipenda da uno solo dei due sistemi di coordinate canoniche. Per trovare questa trasformazione, Jacobi introdusse il concetto di *funzione generatrice* di una trasformazione canonica.

Consideriamo infatti una funzione $S(\xi,q) : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}$. Poniamo

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}(\xi,q), \qquad x_i = \frac{\partial S}{\partial \xi_i}(\xi,q) \tag{6.11}$$

Supponiamo che le prime n equazioni siano globalmente invertibili per $\xi = (\xi_1,\dots,\xi_n)$, per ogni fissato $q \in \mathbb{R}^n$, e che le seconde n siano globalmente invertibili per $q = (q_1,\dots,q_n)$, per ogni fissato $\xi \in \mathbb{R}^n$. Invertendo le prime n otterremo n funzioni $\xi_i = \xi_i(p,q)$ da $\mathbb{R}^{2n}$ a $\mathbb{R}^n$. Sostituendole nelle second equazioni si avrà:

$$x_i = \frac{\partial S}{\partial \xi_i}(\xi(p,q),q) := x_i(p,q)$$

[10] Il migliore è ancora il trattato di T.Levi-Civita e U.Amaldi, *Lezioni di Meccanica Razionale*, 3 voll., Bologna, Zanichelli 1927. La Meccanica analitica è nella II parte del Vol.II. A questo si ispira E.Whittaker, *A Treatise on Analytical Dynamics*, Cambridge University Press 1938. Il testo più diffuso oggi nel mondo è il classico V.I.Arnold, *Metodi matematici della meccanica classica*, Editori Riuniti 1978. Un altro libro consigliato è G.Gallavotti, *Meccanica elementare*, Boringhieri, Torino 1979.

Allora la biiezione $\mathcal{C}$ da $\mathbb{R}^{2n}$ in sè definita da $(p,q) \mapsto (\xi(p,q), x(p,q))$ è canonica. La sua inversa $\mathcal{C}^{-1}$ si ottiene invertendo le seconde n equazioni nella (6.11): si ottengono n funzioni $q_i = q_i(\xi, x)$, che sostituite nelle prime danno le rimanenti n equazioni $p_i = p_i(\xi, x)$ della trasformazione canonica inversa $\mathcal{C}^{-1}$: $(\xi, x) \mapsto (p(\xi, x), q(\xi, x))$.
Per trovare la trasformazione canonica $\mathcal{C}$ che trasforma la data Hamiltoniana $H(p,q)$ in una che dipende da un solo insieme delle nuove coordinate canoniche possiamo quindi cercane la funzione generatrice soto la forma (6.11). Otterremo dunque l'equazione differenziale di Hamilton-Jacobi (alle derivate parziali del primo ordine non lineare)

$$H(\nabla_q S(\xi, q), q) = E(\xi) \tag{6.12}$$

L'equazione di Hamilton-Jacobi va interpretata così: le incognite sono *due*, e cioè la $S(\xi, q)$ e la funzione $E(\xi)$ (la notazione E viene dal fatto che si tratta dell'energia del sistema espressa come funzione delle ξ). Quello che è interessa è il cosiddetto *integrale completo* dell'equazione di Hamilton-Jacobi, cioè la $S(\xi, q)$, funzione delle $q \in \mathbb{R}^n$ dipendente parametricamente dalle $\xi \in \mathbb{R}^n$. Una volta trovata, si devono verificare le condizioni di invertibilità per la (6.11).

Esercizio Sia $H(p,q) = p^2 + q^2$ (oscillatore armonico di frequenza unitaria). Dimostrare che il immagine dell'hamiltoniana tramite la trasformazione canonica dell'esercizio precedente è $K(A, \phi) = A$.

7 Cenno sui principi della meccanica quantistica.

7.1 I: gli stati, le grandezze fisiche, la misura

Si comincia a riassumere qui i principi fondamentali della formulazione matematica della meccanica quantistica, dovuti essenzialmente a J.Von Neumann (1932); una formulazione sostanzialmente equivalente, anche se espressa in un linguaggio matematico assai meno preciso, è quella di P.A.M.Dirac (1930).

Cominciamo con i principi relativi agli stati e alle grandezza, e ne descriveremo subito alcune loro conseguenze.

Principio I (Principio di sovrapposizione)

Gli stati (puri) di un sistema quantistico sono i vettori di uno spazio di Hilbert complesso separabile $\mathcal{H}$.

Principio II

Ad ogni osservabile fisica a è associato un unico (a meno di equivalenze unitarie) operatore autoaggiunto A in $\mathcal{X}$.

Principio III (Postulato della misura)

La distribuzione di probabilità dei valori che la grandezza a può assumere sullo stato $u \in \mathcal{X}$, $\|u\| = 1$ in seguito ad un processo di misura è $d\rho_u(\lambda) := d\langle E(\lambda)u, u\rangle$, dove $E(\lambda)$ è la famiglia spettrale dell'operatore autoaggiunto A.

Osservazioni

1. Se $\|u\| \neq 1$, $d\rho_u(\lambda) := \dfrac{d\langle E(\lambda)u, u\rangle}{\|u\|^2}$.

2. Dai principi II e III, e dal teorema spettrale, segue che l'aspettazione matematica a_u, o valore medio, della misura di una grandezza fisica a sullo stato $u \in \mathcal{X}, u \in D(A)$ vale

$$a_u = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \, d\langle E(\lambda)u, u\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda \, d\rho_u(\lambda) = \langle Au, u\rangle \tag{7.1}$$

   In linguaggio probabilistico, i valori che un'osservabile quantistica può assumere in seguito a misura su uno stato sono un avariabile aleatoria distribuita secondo la misura spettrale dell'operatore autoaggiunto corrispondente calcolata sullo stato in questione.

3. Lo *scarto quadratico medio* Δa_u, o *errore quadratico medio della media* della

misura di a sullo stato u è la varianza della distribuzione di probabilità $d\rho_u(\lambda)$

$$\Delta a_u = \int_{-\infty}^{+\infty} (\lambda - a_u)^2 \, d\rho_u(\lambda) = \langle \|(A - a_u)u\|^2 \tag{7.2}$$

4. Da 1 e 2 segue immediatamente un'affermazione fondamentale:

   un'osservabile a può assumere con certezza un valore μ su uno stato $\psi \in \mathcal{X}$ se e solo se ψ è autovettore di A corrispondente all'autovalore μ; cioè se $\psi \in D(A)$ e $A\psi = \mu\psi$.

5. Se u non è autovettore, i valori possibili del risultato di una misura sono, come abbiamo visto, distribuiti secondo la probabilità definita dalla misura spettrale. Il caso particolare dello spettro discreto dà un'illustrazione molto chiara di questa situazione. In questo caso, detti α_j gli autovalori di A, per la (5.11) si ha

   $$a_u = \langle Au, u \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j p_j, \quad p_j := \|P_j u\|^2$$

   In parole: i risultati possibili di una misura dell'osservabile a su uno stato qualsiasi u sono assimilabili alla variabile aleatoria discreta definita dagli autovalori di A, in cui ogni la probabilità di ogni valore (peso di α_j) vale la norma quadrata della proiezione dello stato u sul corrispondente autospazio. Se u è autovettore di autovalore α_l allora $p_j = 0, j \neq l$, $p_l = 1$ e la variabile aleatoria diventa certa.

6. Fisicamente, quando lo spettro di A è discreto si riscontra il fenomeno della *quantizzazione* dei valori dell'osservabile a: essa non può assumere tutti i valori del codominio di a, come in meccanica classica, ma solo il sottoinsieme *discreto* costituito dagli autovalori di A. Storicamente, il processo è stato quello inverso. La quantizzazione è stata osservata assai prima della formalizzazione che stiamo descrivendo ora, che ha superato anche la prima teoria che rendeva conto dei fenomeni quantizzati, la teoria semiclassica di Bohr-Sommerfeld.

7. Finora non abbiamo considerato alcun esempio specifico di spazio di Hilbert in cui scrivere il formalismo quantistico. Se $\mathcal{X}$ è L^2, si parla di *meccanica ondulatoria* (di De Broglie-Schrödinger) e i vettori si dicono *funzioni d'onda* perché essi mostrano il fenomeno tipico del comportamento ondulatorio, la

sovrapposizione. Se $\mathcal{X} = \ell^2$, si parla di *meccanica delle matrici* perché le osservabili sono delle matrici infinite.

8. *Il principio di indeterminazione.* Si ha

Teorema 7.1 *Siano A e B operatori autoaggiunti in $\mathcal{H}$. Allora $\forall\, u \in D(AB)\cap D(BA)$ e $\forall\,(a,b) \in \mathbb{R}$ si ha:*

$$\|(A-a)u\|\,\|(B-b)u\| \geq \frac{1}{2}|\langle [A,B]u,u\rangle| \tag{7.3}$$

L'uguaglianza vale se e solo se $(A-a)u = i(B-b)u$.

Dimostrazione. Si ha

$$\langle [A,B]u,u\rangle = \langle (AB-BA)u,u\rangle = \langle [(A-a)(B-b)-(B-b)(A-a)]u,u\rangle$$
$$= \langle (B-b)u,(A-a)u\rangle - \langle (A-a)u,(B-b)u\rangle = 2i\mathrm{Im}\langle (B-b)u,(A-a)u\rangle$$

Dunque

$$|\langle [A,B]u,u\rangle| \leq 2|\langle (B-b)u,(A-a)u\rangle| \leq 2\|(A-a)u\|\,\|(B-b)u\|$$

La prima disuguaglianza è un'uguaglianza quando $\langle [A,B]u,u\rangle$ è puramente immaginario; la seconda disuguaglianza è un'uguagianza quando $(A-a)u$ e $(B-b)u$ sono linearmente dipendenti. Ciò prova il teorema.

Conseguenza:

due osservabili a e b sono misurabili simultaneamente sul medesimo stato se e solo se i corrispondenti operatori autoaggiunti A e B commutano.

Ammettiamo ora (lo giustificheremo tra poco) quanto segue: lo spazio di Hilbert $\mathcal{X}$ degli stati quantistici di una particella che si muove sulla retta è $L^2(\mathbb{R})$, l'operatore che corrisponde all'osservabile posizione x è l'operatore massimo di moltiplicazione Q_x e l'operatore corrispondente all'impulso è l'operatore massimo di derivazione $\hbar D_x$, dove $\hbar$ è la costante di Planck divisa per 2π. Allora, almeno su $\mathcal{S}$, $[D_x, Q_x] = i\hbar$. Pertanto, per la (7.3)

$$\|(D_x-a)u\|\,\|(Q_x-b)u\| \geq \frac{\hbar}{2}\|u,u\|$$

Dunque posizione e velocità non potranno mai essere misurate simultaneamente sul medesimo stato. Questa è la formulazione abituale del principio di indeterminazione.

9. *L'interpretazione statistica.*

   Rimaniamo nell'assunzione precedente riguardo l'operatore Q_x che corrisponde alla posizione classica x. Per l'esempio 5.2, Punto 2, se Δ è un intervallo reale di estremi $]a,b]$, e $E_Q(\lambda)$ denota la risoluzione dell'identità di Q_x, si ha $E(\Delta)\psi = \chi(\Delta)\psi$, $\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Dunque la posizione x della particella quantistica è distribuita come $|f(x)|^2$. In altre parole: se la particella quantistica mobile sulla retta è descritta dal vettore $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ (detto *funzione d'onda*) l'integrale

   $$P_{(a,b)} = \int_a^b |\psi(x)|^2 \, dx \tag{7.4}$$

   è la probabilità che la particella si trovi nell'intervallo di estremi a e b.

7.2 II: le equazioni di Heisenberg, l'equazione di Schrödinger

Cominciamo col riportare un teorema fondamentale. Osservando che l'esponenziale $e^{iAt} : t \in \mathbb{R}$ di un operatore autoaggiunto A è un operatore unitario definito ad esempio tramite il teorema spettrale si ha

Teorema 7.2 (Teorema di Stone)
Ogni gruppo fortement continuo $U(t) : t \in \mathbb{R}$ di operatori unitari in uno spazio di Hilbert $\mathcal{X}$ è generato da un operatore autoaggiunto:

$$U(t) = e^{iAt}, \qquad A := s - \lim_{t\to 0} \frac{U(t) - I}{it}$$

Viceversa, se A è autoaggiunto la famiglia di operatori $t \mapsto e^{iAt}$ è un gruppo fortemente continuo di operatori unitari in $\mathcal{X}$ che gode delle proprietà seguenti:

1. $e^{iAt}D(A) \subset D(A)$; $Ae^{iAt}\psi = e^{iAt}A\psi$, $\psi \in D(A)$;

2. *Se $\psi \in D(A)$, $e^{iAt}\psi$ è derivabile fortemente e si ha*

$$i\frac{d\psi(t)}{dt} = A\psi(t)$$

Osservazione
Si dice *gruppo unitario fortemente continuo* ad un parametro in uno spazio di Hilbert $\mathcal{X}$ una famiglia $t \mapsto U(t)$ da $\mathbb{R}$ a $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ tale che

1. $U(t)$ è fortemente continuo $\forall\, t \in \mathbb{R}$;

2. $U(t+s) = U(t)U(s)$, $\forall\, t; s \in \mathbb{R}$. In particolare, $U(0) = I$, $U(-t) = U(t)^{-1} = U(t)^*$.

Dimostrazione
Sia $e^{iAt} = \int_{\mathbb{R}} e^{i\lambda t}\, dE(t)$. Allora

$$\|U(t)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} \langle E(\lambda)\psi, \psi\rangle = \|\psi\|^2$$

e inoltre

$$e^{iAt}(e^{iAs}\psi) = \int_{\Re}^{it\mu} dE(\mu)(e^{iAs}\psi) = \int_{\Re}^{it\mu} dE(\mu) \int_{\Re}^{is\lambda} dE(\lambda)\psi =$$
$$= \int_{\Re}^{it\mu} dE(\mu) \int_{\infty}^{\mu} e^{is\lambda}\, dE(\lambda)\psi = \int_{\Re}^{i(t+s)\mu} dE(\mu) = e^{i(t+s)A}$$
$$Ae^{iAt}\psi = \int_{\mathbb{R}} e^{i\lambda t}\lambda\, dE(\lambda)\psi = e^{itA}A\psi, \quad \lim_{h\to 0} h^{-1}\|[e^{iA(t+h)} - e^{iAt}]\psi\|^2 =$$
$$\lim_{h\to 0} h^{-1} \int_{\mathbb{R}} |e^{it(\lambda+h)} - 1|^2 \langle dE(\lambda)\psi, \psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 \langle dE(\lambda)\psi, \psi\rangle = \|A\psi\|^2$$

Omettiamo la dimostrazione del viceversa.

Esempio 7.1 (Esempi di gruppi unitari)

1. La traslazione in x: sia $(U_t f)(x) = f(x+t)$, $f \in L^2(\mathbb{R})$. Ovviamente $U_t : t \in \mathbb{R}$ è un gruppo unitario. Il generatore H è $H = i\partial_x$.

2. La traslazione in ξ, = moltiplicazione per una fase in x. L'operatore $(U_t f)(x) = e^{-itx}f(x)$, $f \in L^2(\mathbb{R})$, è evidentemente unitario. D'altra parte

$$\mathcal{F}(U_t)(\xi) = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} e^{-itx-ix\xi} f(x)\, dx = (\mathcal{F}f)(\xi + t)$$

3. Sia $T = -\Delta$, $D(T) = H^2$. Calcoliamo $U(t) = e^{-itT}$. Così come abbiamo fatto per il risolvente, lavoriamo nello spazio duale per trasformazione di Fourier. Poiché $\mathcal{F}\Delta\mathcal{F}^{-1} = -|\xi|^2$, avremo

$$\mathcal{F}e^{-itT}\mathcal{F}^{-1} = e^{it|\xi|^2}$$

La trasformata di Fourier inversa di $e^{it|\xi|^2}$ vale (trattasi sempre di integrale gaussiano)

$$\int_{\mathbb{R}^3} e^{it|\xi|^2 + i\langle\xi,x\rangle}\, d\xi = \frac{1}{4\pi t^{3/2}} e^{-i|x|^2/4t}$$

pertanto, per il teorema di convoluzione, se $u \in \mathcal{S}$:

$$(e^{-itT}u)(x) = \frac{1}{4\pi t^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i(x-y)^2/4t} u(y)dy$$

da cui l'estensione unica a $u \in L^2$. Si può dimostrare che l'estensione è data esplicitamente dalla formula

$$(e^{-itT}u)(x) = \frac{1}{4\pi t^{3/2}} \text{l.i.m.}_{R\to\infty} \int_{|x|<R} e^{-i(x-y)^2/4t} u(y)dy, \quad u \in L^2(\mathbb{R}^3)$$

Per descrivere l'evoluzione delle osservabili quantistiche, si comincia col ricordare (Lemma 6.1) che le traslazioni temporali delle osservabili classiche sono generate dall'Hamiltoniana. Segue inoltre dal postulato del'associazione unica fra osservabili classiche e operatori nello spazio di Hilbert e dalla quantizzazione canonica che ricorderemo sotto che se A e B sono gli operatori autoaggiunti corrispondenti alle osservabili classiche a e b, l'operatore corrispondente alla parentesi di Poisson $\{a, b\}$ è il commutatore $[A, B]/i\hbar$. Ricordando ancora il Lemma 6.1, si postula allora:

Principio IV (Equazioni del moto)
Sia H l'operatore autoaggiunto in $\mathcal{X}$ corrispondente all'osservabile energia, l'Hamiltoniana $\mathcal{H}(p, q)$, supposta autonoma. Sia $A(t)$ l'operatore autoaggiunto corrispondente all'osservabile classico $a(t)$ calcolato all'istante t lungo il flusso Hamiltoniano generato da $\mathcal{H}(p, q)$. Allora $A(t)$ soddisfa le equazioni del moto di Heisenberg

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{[H, A]}{i\hbar} \tag{7.5}$$

Le equazioni di Heisenberg si integrano subito. Si ha infatti:

$$A(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt\hbar}, \qquad t \in \mathbb{R}$$

Le funzioni a valori operatoriali $t \mapsto A(t)$ si chiamano *osservabili di Heisenberg*, e questa descrizione del moto quantistico *rappresentazione di Heisenberg*. Le osservabili di Heisenberg sono operatori autoaggiunti ben definiti in $\mathcal{X}$ $\forall t$ se lo è A.

Una descrizione unitariamente equivalente è quella in cui sono i vettori dello spazio di Hilbert a muoversi col tempo, mentre gli operatori rimangono costanti. Questa nuova rappresentazione, detta *rappresentazione di Schrödinger*, è ovviamente quella in cui i gli stati quantistici che si evolvono sono $\psi(t) = e^{-iHt/\hbar}\psi_0$, dove ψ_0 è lo stato all'istante iniziale. Ammettiamo ora che esiste un core D di H tale che $e^{-iHt/\hbar}D \subset D$. Allora se $\psi_0 \in D$ derivando fortemente rispetto a t otteniamo:

$$H\psi(t) = i\hbar\partial_t\psi(t) \tag{7.6}$$

che dicesi *equazione di Schrödinger dipendente dal tempo*, o *non stazionaria*. Questa è l'equazione di evoluzione nella rappresentazione di Schrödinger.

Osserviamo ora che nelle nostre ipotesi H non dipende da t. Possiamo dunque cercare di risolvere l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo per separazione delle variabili. Poniamo (con il consueto abuso di notazione): $\psi(t) = \psi(x)e^{iEt/\hbar}$. Sostituendo in (7.6) otteniamo

$$H\psi = E\psi \tag{7.7}$$

Ora ricordiamo che la quantizzazione canonica permette di descrivere lo spazio di Hilbert degli stati quantistici a n gradi di libertà come $L^2(\mathbb{R}^n$ e che fa ivi corrispondere all'osservabile classica impulso p l'operatore $-i\hbar\nabla_x$, e quindi all'osservabile classica energia cinetica $\dfrac{p^2}{2m}$ l'operatore $-\hbar^2\dfrac{\Delta}{2m}$, la cui autoaggiunzione è già stata provata; inoltre all'osservabile classica $V(x)$ corrisponde l'operatore massimo di moltiplicazione per la medesima funzione. L'equazione (7.7) diventa pertanto

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(x)\psi = E\psi \tag{7.8}$$

che è la forma consueta dell'equazione di Schrödinger stazionaria.

Gli autovalori isolati dell'equazione di Schrödinger stazionaria prendono il nome di *livelli di energia*. L'autovalore minimo, se coincide con il minimo dello spettro, si dice *stato fondamentale*.

8 Cenno sui principi della meccanica quantistica. III: la quantizzazione, le relazioni canoniche di commutazione, l'algebra di Weyl-Heisenberg

Riconsideriamo lo spazio delle fasi classico $\mathbb{R}^{2n}$ con coordinate (ξ, x) (x posizione, ξ impulso) e la consueta $2-$ forma simplettica $2-$ $\omega^2 = d\xi \wedge dx = d\omega^1$, $\omega^1 = \sum_{k=1}^{n} \xi_i \, dx_i$.

Un procedimento di quantizzazione è una regola per associare all'osservabile classico g un unico operatore formalmente autoaggiunto G che agisce nello spazio di Hilbert separabile che descrive gli stati quantistici (puri) del sistema. L'operatore G è detto *osservabile quantistico*[11]

Sia $f(x,\xi) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2n})$ un osservabile classico. Denotiamo $\hat{f}(p,q)$ la sua trasformata di Fourier. Allora $\hat{f}(p,q) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2n})$ e per il teorema di inversione di Fourier si ha

$$f(\xi,x) = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{\mathbb{R}^{2n}} \hat{f}(p,q)T_{x,\xi}(p,q)\,dp\,dq, \quad T_{x,\xi}(p,q) := e^{i(\langle p,\xi\rangle + \langle q,x\rangle)} \tag{8.1}$$

Il procedimento di quantizzazione canonico consiste nel postulare che alla famiglia (con indici $(p,q) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$) di osservabili classiche $T_{x,\xi}(p,q) = e^{i(\langle p,\xi\rangle + \langle q,x\rangle)}$ corrisponda una famiglia di operatori unitari $\hat{T}_\hbar(p,q)$ in uno spazio di Hilbert che soddisfa le regole di commutazioni canoniche scritte nella forma di Weyl.

Più precisamente: cerchiamo uno spazio di Hilbert $\mathcal{X}$ e una famiglia $\hat{T}_\hbar(p,q)$ di operatori unitari che ivi agisce, di indici $(p,q) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$, alla quale si richiede di soddisfare le proprietà

$$\hat{T}_\hbar(-p,-q) = \hat{T}_\hbar(p,q)^* \tag{8.2}$$

$$\hat{T}_\hbar(p,q)\hat{T}_\hbar(p',q') = e^{i\pi\hbar\omega((p,q);(p',q'))}\,\hat{T}_\hbar(p',q')\hat{T}_\hbar(p,q) \tag{8.3}$$

Questo postulato pone in modo naturale il problema di determinare tutti gli spazi di Hilbert e tutti gli operatori che vi agiscono che rappresentino queste relazioni puramente algebriche, note come algebra di Weyl-Heisenberg[12].

Definizione 8.1 *(Problema delle CCR) Per problema della rappresentazione delle relazioni di commutazione canoniche (in breve, rappresentazioni delle CCR) intendiamo quanto segue: trovare tutte le rappresentazione Hilbertiane unitarie dell'algebra di Weyl-Heisenberg, cioè trovare tutti gli spazi di Hilbert $\mathcal{X}$ e tutti i gruppi di operatori unitari fortemente continui in $\mathcal{X}$ che soddisfano le relazioni (8.2,8.3).*

[11] Un osservabile quantistico G deve sempre essere autoaggiunto; in altre parole la proprietà $G = G^*$ (che assicura la realtà dello spettro) deve sempre valere. L'autoaggiunzione di G deve essere verificata in ogni caso concreto, e non sempre vale. Tipicamente le Hamiltoniane classicamente incomplete non generano operatori quantistici autoaggiunti. Per simili questioni, si veda ad esempio[RS], VolII, §10

[12] Si noti che, poiché $\hbar$ ha dimensione di un'azione, cioè del prodotto pq, questa normalizzazione implica che la dimensione di x,ξ è la radice quadrata di un'azione, e quella di p,q l'inverso della radice quadrata di un'azione.

La cosiddetta soluzione di Schrödinger[13] (unica a meno di equivalenze unitarie per il teorema di Stone-Von Neumann che ricorderemo in seguito) delle regole di commutazioni canoniche (8.3) di Weyl-Heisenberg afferma che gli osservabili quantistici corrispondenti alla famiglia di osservabili classici $T_{p,q}(x,\xi) := e^{i(\langle p,\xi\rangle + \langle q,x\rangle)}$ sono rappresentati dalla famiglia $\hat{T}_\hbar(p,q)$ di operatori unitari in $L^2(\mathbb{R}^n)$ definita come

$$\hat{T}_\hbar(p,q) := e^{i(\langle q,X\rangle) + \langle p,\hbar D_x\rangle)} \tag{8.4}$$

Qui $\mathcal{X}$ e D_x sono gli operatori massimali di moltiplicazione per x e gli operatori massimali di derivazione $-i\nabla_x$, rispettivamente (notazione vettoriale: $x = (x_1, \ldots, x_n)$; $\partial_x = \nabla_x = (\partial_{x_1}, \ldots, \partial_{x_n})$). L'azione di $\hat{T}_\hbar(p,q)$ sulle funzioni regolari $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}^n)$ è (eseguiremo il calcolo esplicito nel paragrafo 1.3 qui di seguito)

$$(\hat{T}_\hbar(p,q)(\psi) = e^{i\langle q,X\rangle + \langle p,\hbar D_x\rangle}\psi = e^{i\hbar pq/2 + i\langle q,x\rangle}\psi(x+\hbar p) \tag{8.5}$$

oppure, equivalenetemente,

$$(\hat{T}_\hbar(p,q)(\hat{\psi}) = e^{i(\langle q,x\rangle + \langle p,\hbar D_x\rangle)}\hat{\psi} = e^{i\hbar pq/2 + i\langle p,\xi+q\rangle}\hat{\psi}(\xi+\hbar q) \tag{8.6}$$

donde si può immediatamente verificare la validità odi (8.2,8.3). Inoltre, la rappresentazione $\hat{T}_\hbar(p,q)$ è irriducibile. Esistono altre soluzioni delle CCR oltre quella di Schrödinger? Un risultato molto importante afferma che, a meno di equivalenze unitarie, questo non è il caso.

Teorema 8.1 *(Il teorema di unicità di Stone-Von Neumann)*
La soluzione di Schrödinger delle CCR è unica a meno di equivalenze unitarie. Più precisamente, sia $\hat{\Theta}_\hbar(p,q)$ una rappresentazione unitaria dell'algebra di Weyl-Heisenberg in qualche spazio di Hilbert $\mathcal{X}$. Allora $\mathcal{X} = \oplus\mathcal{X}_\alpha$, dove $\mathcal{X}_\alpha \perp \mathcal{X}_\beta$, $\alpha \neq \beta$; $\hat{\Theta}_\hbar(p,q)\mathcal{X}_\alpha \subset \mathcal{X}_\alpha$ e $\hat{\Theta}_\hbar(p,q) \,|\, \mathcal{X}_\alpha$ è unitariamente equivalente a $(\hat{T}_\hbar(p,q)$ per ogni α. In particolare se $\hat{\Theta}_\hbar(p,q)$ è irreducibile allora essa è unitariamente equivalente to $\hat{T}_\hbar(p,q)$.

Dimostrazione Si ved ad esempio[Fo], §1.5.

Osservazioni

[13]In realtà Schrödinger non considerò mai il problema delle CCR in questa formaa, ma osservò che la sua equazione poteva essere ottenuta dall' Hamiltoniana classica del sistema sostituendo formalmente gli impulsi p con $-i\hbar\partial_x$. Allo stesso modo si ottiene una soluzione formale delle CCR sostituendo gli impulsi p_k con $\hbar\partial_{x_k}$. Questo è il motivo per cui Von Neumann introdusse la locuzione "soluzione di Schrödinger" delle CCR nel suo teorema di teorema di unicità[VN].

1. Per $q = 0$ o $p = 0$ (8.5) e (8.6) riducono l'azione di $\hat{T}_\hbar(p, q)$ a traslazioni in x e ξ, rispettivamente, o, equivalentemente, a moltiplicazioni per le fasi $e^{i\langle q,x\rangle}$ o $e^{i\langle p,\xi\rangle}$. In altre parole, $\hat{T}_\hbar(0, q)$ e $\hat{T}_\hbar(p, 0)$ sono i gruppi unitari in L^2 generati da $\mathcal{X}$ e $\hbar\nabla_x := P_x$, rispettivamente. Sul core comune $\mathcal{S}$ di $\mathcal{X}$ e P_x possiamo scrivere
$$[P_{x_i}, X_j] = i\hbar\delta_{i,j} \tag{8.7}$$
che è la forma differenziale consueta delle CCR. La rappresentazione corrispondente è la rappresentazione solita delle coordinate, o rappresentazione delle q, nel linguaggio della fisica. Il problema delle CCR può essere direttamente formulato nella forma infinitesimale (8.7). Per una discussione delle sottigliezze connesse all'equivalenza delle forme "integrate" e differenziali del problema delle rappresentazioni delle CCR veda ad esempio [RS], §VIII.

2. Per trasformazione di Fourier otteniamo la rappresentazione unitariamente equivalente delle p, o rappresentazione degli impulsi nel linguaggio della fisica. Una rappresentazione unitariamente equivalente delle CCR meno consueta (l'altra sola costruita esplicitamente finora), ma non meno importante, è la rappresentazione di Bargmann (o rappresentazione di Fock-Bargmann), richiamata in dettaglio nell'Appendice A.

3. Il teorema di unicità di Stone-Von Neumann esclude dal procedimento canonico di quantizzazione ogni insieme di coordinate canoniche diverse dalle cartesiane, o loro combinazioni lineari canoniche. In altre parole trasformazione canoniche (diverse da quelle lineari) e quantizzazione sono operazioni che non commutano. La libertà di scelta delle coordinate canoniche scompare a seguito del procedimento di quantizzazione. Un esempio chiarificherà meglio questa asserzione. Si consideri in un grado di libertà l' hamiltoniana $\mathcal{Q}(x, \xi) = \xi^2 + x^4$ (l'oscillatore quartico). La quantizzazione canonica genera (vedi sotto) il consueto operatore di Schrödinger $Q = -\hbar^2 d_x^2 + x^4$. Lo spettro di A è discreto, con autovalori $E_n \sim (n\hbar)^{4/3} + O(n^{1/3})$ per $n \to \infty$. D'altra parte, poiché c'è solo un grado di libertà l'hamiltoniana $\mathcal{Q}$ è integrabile tramite una trasformazione canonica in variabili azione-angolo $(A, \phi) \in R_+ \times T^1$. L'hamiltoniana si può scrivere coem funzione solo dell'azione $A := \int_{x_(E)}^{x_+(E)} \sqrt{E - x^4}\, dx$ dove

$x_{\pm}(E)$ sono le radici reali di $x^4 = E$. Calcolando questo integrale e invertendo per E troviamo $Q(x,\xi) = E = E(A) = cA^{4/3}$ per una qualche costante c. Lo spazio delle fasi $\mathbb{R}^2$ è canonicamente trasformato in $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{T}^1$. Le variabili azione-angolo (A,ϕ) sono canoniche, cioè $\{A,\phi\} = \{\xi, x\} = 1$. Proviamo a postulare le regole di commutazioni canoniche anche per queste ultime. In questo caso dovremmo ovviamente richiedere $\mathcal{X} = L^2(\mathbb{T}^1)$; la quantizzazione di A sarebbe $P_A := -i\hbar\partial_\phi$, e la quantizzazione di ϕ l'operatore di moltiplicazione per ϕ, denotato Φ, cosicché $[P_A, \Phi] = [-i\hbar\partial_\phi, \phi] = i$. Lo spettro di P_A è ovviamente la successione $\{n\hbar\}_{n\in\mathbb{Z}}$. Supponiamo ora che il problema di definire le radici di P_A si possa risolvere in qualche modo (ad esempio per restrizione a $n \geq 0$). Allora l'operatore di Schrödinger corrispondente a $\mathcal{Q}(A)$ sarebbe l'operatore in $L^2(\mathbb{T}^1)$ definito da $(-i\partial_\phi)^{4/3}$, e i suoi autovalori *esatti* sarebbero $(n\hbar)^{4/3}$. Dunque i due procedimenti definiscono autovalori *differenti* e sono così inequivalenti. Il fatto che le coordinate cartesiane siano privilegiate nel procedimento di quantizzazione è un modo di formulare la natura misteriosa del postulato di quantizzazione medesimo.

8.1 Quantizzazione degli osservabili

La formula (8.1) consente subito di definire la quantizzazione di ogni osservabile in $\mathcal{S}$. Si denoti F l'osservabile quantistico corrispondente a f o, equivalentemente, la sua *quantizzazione di Weyl* $Op^W(f)$. Allora F è data dalla formula seguente

Definizione 8.2 *Sia $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ un osservabile classico. Allora il corrispondente osservabile quantistico F o, equivalentemente, la quantizzazione di Weyl $Op^W(f)$ è l'operatore in $L^2(\mathbb{R}^n)$ definito nel modo seguente:*

$$F = Op^W(f) = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{\mathbb{R}^{2n}} \hat{f}(p,q)\hat{T}_\hbar(p,q)\, dpdq \tag{8.8}$$

Osservazioni.

1. La formula (8.8) si dice talvolta *trasformata di Weyl* di f, e si denota $\rho(\hat{f})$.

2. L'integrale converge nella norma operatoriale perché $\hat{f} \in \mathcal{S}$ con f, e $\|\hat{T}_\hbar(p,q)\| = 1\ \forall\ (p,q) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$;

3. F è un operatore continuo in $L^2(\mathbb{R}^n)$, perché $\|\hat{T}_\hbar(p,q)\| = 1$ implica:

$$\|F\|_{L^2 \to L^2} \leq \int_{\mathbb{R}^{2n}} |\hat{f}(p,q)|\, dp\, dq := \|\hat{f}\|_{L^1} \tag{8.9}$$

   Ovviamente questo implica anche che $F = Op^W(f)$ esiste ed è continuo per ogni osservabile classico f che ammette trasformata di Fourie in L^1.

4. Quando f è ancora regolare ma cresce al più come un polinomio all'infinito, cosicché $\hat{f}(p,q)$ esiste solo in senso distribuzionale, il significato di (8.8) è in generale definito dalla teoria degli operatori pseudodifferenziali (si veda in seguito) che permette la realizzazione di F come un operatore chiuso, non limitato in $\mathcal{X}$. In questo caso ovviamente si intende che (8.8) agisca su opportuni insiemi densi nello spazio di Hilbert.

8.2 Espressioni esplicite per i generatori nella rappresentazione di Schrödinger

Ci proponiamo ora di dedurre le formule (8.5,8.6) per l'azione dei generatori $\hat{T}_\hbar(p,q)$ dell'algebra di Weyl-Heisenberg. A questo proposito seguiamo [BS], §5.3. Si introduca la funzione a valori operatoriali

$$U(t) := e^{-it\langle p, \hbar D_x\rangle} e^{-it\langle q, X\rangle} e^{it(\langle q, X\rangle + \langle p, \hbar D_x\rangle)} := \prod_{k=1}^{n} U_k(t) \tag{8.10}$$

dove

$$U_k(t) := e^{-itp_k \hbar \partial_k} e^{-itq_k X_k} e^{it(q_k X_k + p_k \hbar \partial_k)} \tag{8.11}$$

Qui $\partial_k := \partial_{x_k}$; si osservi che la decomposizione prodotto (8.29) vale per le CCR nella forma differenziale (8.7), cioè ∂_k e X_j commutano se $j \neq k$. Si derivi ora rispetto a un t. Si trova:

$$\frac{dU_k(t)}{dt} = -ip_k e^{-i\hbar\partial_k}[-i\hbar\partial_k e^{-itq_k X_k} - e^{-itq_k X_k} - i\hbar\partial_k] e^{it(q_k X_k + p_k \hbar \partial_k)} =$$
$$i\hbar t p_k q_k e^{-i\hbar\partial_k} e^{-itq_k X_k} e^{it(q_k X_k + p_k \hbar\partial_k)} = i\hbar t U_k(t)$$

Dato che $U_k(0) = I_d$ otteniamo

$$U_k(t) = e^{i\hbar p_k q_k t^2/2} I_d$$

Da ciò segue

$$U(t) = e^{i\hbar \langle q,p\rangle t^2/2} I_d$$

e come conseguenza diretta

$$e^{it(\langle q,X\rangle+\langle p,\hbar D_x\rangle)} = e^{i\hbar\langle q,p\rangle t^2/2}e^{it\langle q,X\rangle}e^{it\langle p\hbar\nabla_x\rangle}$$

In particolare, per $t=1$, si trova

$$\hat{T}_\hbar(p,q) = e^{i\hbar\langle q,p\rangle/2}e^{it\langle q,X\rangle}e^{it\langle p,\hbar\nabla_x\rangle} \tag{8.12}$$

Pertanto l'azione dei generatori su una funzione $u \in \mathcal{S}$ è

$$\hat{T}_\hbar(p,q)u(x) = e^{i\hbar\langle q,p\rangle/2}e^{it\langle q,x\rangle}u(x+\hbar p) \tag{8.13}$$

da cui la verifica esplicita della relazione di unitarietà

$$\|\hat{T}_\hbar(p,q)u(x)\|^2_{L^2} = \int_{\mathbb{R}^n} |u(x+\hbar p)|^2\,dx = \|u\|^2_{L^2}.$$

Prendendo la trasformata di Fourier si ricava la formula (8.6).
Si può così concludere che, per la (8.8), la quantizzazione di Weyl di F dell'osservabile classico f agisce sulle funzioni regolari nel modo seguente

$$(Fu)(x) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \hat{f}(p,q)e^{i\hbar\langle q,p\rangle/2}e^{i\langle q,x\rangle}u(x+\hbar p)\,dpdq \tag{8.14}$$

8.3 La funzione di Wigner

Se ψ, χ sono due funzioni date in $L^2(\mathbb{R}^n)$, la *trasformata di Fourier-Wigner* corrispondente $W_{\psi,\chi}(p,q)$ è l'elemento di matrice del generatore del gruppo di Weyl-Heisenberg $\hat{T}_\hbar(p,q)$ nella rappresentazione di Schrödinger, cioè è definita nel modo seguente:

$$V_{\psi,\chi}(p,q) := \langle\psi, \hat{T}_\hbar(p,q)\chi\rangle \tag{8.15}$$

Per la (8.6) o la (8.13) si calcola facilmente

$$V_{\psi,\chi}(p,q) = \int_{R^n} e^{i\hbar\langle q,p\rangle/2}e^{it\langle q,x\rangle}\psi(x+\hbar p)\overline{\chi}(x)\,dx \tag{8.16}$$

$$= \int_{R^n} e^{i\langle q,y\rangle}\psi(y+\hbar p/2)\overline{\chi}(y-\hbar p/2)\,dy$$

Ancora per la (8.1), gli elementi di matrice degli osservabili quantistici si possono esprimere come "trasformata di Fourier-Wigner inversa", cioè:

$$\langle\psi, F\chi\rangle = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{\mathbb{R}^{2n}} \hat{f}(p,q)V_{\psi,\chi}(p,q)\,dpdq \tag{8.17}$$

La *funzione di Wigner*[Wi] $W_{\psi,\chi}(p,q)$ è la trasformata di Fourier della trasformata di Fourier-Wigner, cioè

$$W_{\psi,\chi}(p,q) = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{\mathbb{R}^{2n}} V_{\psi,\chi}(r,s)e^{-i(\langle p,r\rangle+\langle q,s\rangle)}\,drds \tag{8.18}$$

Inserendo la (8.16), prendendo la trasformata di Fourier inversa

$$W_{\psi,\chi}(p,q) = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{\mathbb{R}^{3n}} e^{i\langle s,y\rangle-i\langle p,r\rangle-i\langle q,s\rangle}\psi(y+\hbar r/2)\overline{\chi}(y-\hbar r/2)\,dydrds$$

e integrando su s $W_{\psi,\chi}(p,q)$ si può scrivere sotto la forma

$$W_{\psi,\chi}(p,q) = \int_{R^n} e^{i\langle p,r\rangle}\psi(q+\hbar r/2)\overline{\chi}(q-\hbar r/2))\,dr \tag{8.19}$$

$W_{\psi,\psi}(p,q) := W_\psi(p,q)$ si dice talvolta *distribuzione di Wigner* di ψ anche se non è definita positiva.

La funzione di Wigner $W_\psi(p,q)$ è per costruzione una funzione sullo spazio delle fasi classico $\mathbb{R}^{2n}$. Queste sono le sue due proprietà fondamentali:

1. Valgono le formule seguenti:

$$\int_{R^n} W_\psi(p,q)\,dp = |\psi(q)|^2, \quad \int_{R^n} W_\psi(p,q)\,dq = |\hat{\psi}(p)|^2 \tag{8.20}$$

   Ricordando che $|\psi(q)|^2$ è la distribuzione di probabilità della posizione della particella quantistica, e $|\hat{\psi}(p)|^2$ la distribuzione di probabilità per impulso, si vede che la funzione di Wigner agisce come distribuzione di probabilità congiunta di posizione e impulso[14]. Per vedere la (8.20) basta calcolare

$$\begin{aligned}\int_{R^n} W_\psi(p,q)\,dq &= \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-i\langle p,r\rangle}\psi(q+r/2)\overline{\psi}(q-r/2))\,dr\,dq = \\ &\int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-i\langle p,u\rangle}\psi(u)\overline{e^{-i\langle p,v\rangle}\psi(v)}\,du\,dv = \hat{\psi}(p)\overline{\hat{\psi}(p)} = |\hat{\psi}(p)|^2\end{aligned}$$

   e analogamente per la prima delle(8.20). Gli elementi di matrice degli operatori di moltiplicazione e derivazione sono i momenti di questa distribuzione congiunta:

$$\begin{aligned}\int_{R^n} p_j^k W_\psi(p,q)\,dq &= \int_{\mathbb{R}} p_j^k|\hat{\psi}(p)|^2\,dp = \langle P_j^k\psi,\psi\rangle \\ \int_{\mathbb{R}^{2n}} q_j^k W_\psi(p,q)\,dp &= \int_{\mathbb{R}} q_j^k|\psi(q)|^2\,dq = \langle X_j^k\psi,\psi\rangle\end{aligned}$$

   for $j=1,\ldots,n$ e $k=1,2,\ldots$.

[14]Wigner[Wi] stava proprio cercando l'analogo quantistico della funzione di distribuzione di Boltzmann $\rho(q,p)$ nello spazio delle fasi. Si osservi tuttavia che $f(q,p)$ non è definita positiva, e quindi non si può considerare un analogo quantistico a tutti gli effetti della funzione di distribuzione di Boltzmann.

2. La seconda proprietà fondamentale della funzione di Wigner è che soddisfa l'equazione di Liouville classica a meno di un errore d'ordine $\hbar$. In altre parole, sia $p = p(t), q = q(t)$ il flusso generato dall'hamiltoniana $\mathcal{H}$, H il corrispondente operatore di Schrödinger, e sia $e^{iHt/\hbar}$ l'evoluzione quantistica. Sia $W_\psi(p, q, t)$ la funzione di Wigner calcolata lungo il vettore che dipende dal tempo $\psi(t) = e^{i\frac{Ht}{\hbar}}\psi$. Allora si ha

$$\frac{\partial W_\psi(p, q, t)}{\partial t} + \{\mathcal{H}, W_\psi\} = O(\hbar). \tag{8.21}$$

   Questo implica, in particolare, $\{\mathcal{H}, W_\psi\} = 0$ se ψ è un autovettore di H come si verifica immediatamente tramite la (8.19). Più precisamente, $W_{\psi e^{iHt/\hbar}} = W_\psi$ se ψ è un autovettore di H. La funzione di Wigner è invariantee rispetto all'evoluzione quantistica degli autovettori.

3. La trasformata di Wigner si può estendere dalle funzioni di (x, y) sotto la forma del prodotto $\psi(x)\overline{\chi}(y)$ a funzioni arbitrarie (regolari quanto basta) $\Phi(x, y) : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}$ come una trasformata integrale lineare. Basta definire

$$W\Phi(p, q) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{i\langle p,r\rangle}\Phi(q + \hbar r/2, q - \hbar r/2)\, dr \tag{8.22}$$

   Si osservi che W agisce come la composizione della trasformazione di variabili $(q, r) \to (q + r/2, q - r/2)$ che conserva la misura con la trasformazione di Fourier rispetto alla seconda variabile. Pertanto W è unitario in $L^2(\mathbb{R}^{2n})$:

$$\|W\Phi(p, q)\|^2_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} = \|\Phi\|^2_{L^2(\mathbb{R}^{2n})}$$

8.4 Il simbolo di Weyl

Il procedimento precedente per costruire l'osservabile quantistico G a partire da quello classico g richiede il calcolo della trasformata di Fourier $\hat{g}$. Un modo alternativo è calcolare gli elementi di matrice tramite la trasformata di Fourier-Wigner, ma questo richiede la costruzione della funzione di Fourier-Wigner, cioè il calcolo di un'altra trasformata integrale. Ovviamente è molto più interessante costruire G evitando ogni passo intermedio, e questo è possibile tramite la realizzazione di G come un operatore pseudodifferenziale che ammette g come simbolo di Weyl, che ora richiamiamo. Si consideri ancora la corrispondenza fra g e G definita dalla (8.8).

Per la (8.5) luna formula di quantizzazione (8.8), che agisce su $\psi \in \mathcal{S}$, diventa

$$(F\psi)(x) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \hat{f}(y-x,q) e^{i\langle q,(x+y)\rangle)} \psi(y)\, dydq \tag{8.23}$$

Questa formula rappresenta F come un operatore integrale di nucleo

$$K_F(x,y) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(y-x,q) e^{i\langle q,(x+y)\rangle)}\, dq \tag{8.24}$$

perché la (8.23) può essere riscritta come

$$(F\psi)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} K_F(x,y)\psi(y)\, dy \tag{8.25}$$

Denotando $\mathcal{F}$, $\mathcal{F}^{-1}$ gli operatori di trasformata di Fourier diretta e inversa, rispettivamente, la (8.24) si può chiaramente riscrivere anche nella forma seguente

$$K_F(x,y) = \mathcal{F}_q^{-1}\hat{f}(y-x,(y+x)/2) \tag{8.26}$$

dove $\mathcal{F}_q^{-1}$ denota la trasformata di Fourier inversa rispetto a un q, cioè rispetto alla seconda variabile. Dunque, poiché $\hat{f}$ è la trasformata di Fourier di f:

$$K_F(x,y) = \mathcal{F}_p f(y-x,(y+x)/2) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} f(\xi,(x+y)/2) e^{i\langle \xi,(x-y)\rangle \hbar}\, d\xi \tag{8.27}$$

e riassumendo

$$(F\psi)(x) = (Op^W f)(\psi)(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} f(\xi,(x+y)/2) e^{i\langle \xi,(x-y)\rangle \hbar} \psi(y)\, d\xi \tag{8.28}$$

Formalmente (saremo più precisi nel prossimo capitolo) F agisce come un operatore integrale di nucleo

$$K_F = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} f(\xi,(x+y)/2) e^{i\langle \xi,(x-y)\rangle \hbar}\, d\xi. \tag{8.29}$$

Si può pertanto enunciare la seguente

Definizione 8.3 (Formula di quantizzazione di Weyl)
Dato l'osservabile classico $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{2n};\mathbb{R})$, il corrispondente osservabile quantistico $G := Op^W(g)$ è l'operatore in $L^2(\mathbb{R}^n)$ che agisce nel modo seguente, su funzioni $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$:

$$(Gu)(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} g\left(\xi, \frac{x+y}{2}\right) e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} u(y)\, dy\, d\xi \tag{8.30}$$

Osservazioni.

1. L'osservabile classico g si dice simbolo dell'operatore G e, viceversa, G è la *quantizzazione di Weyl* del simbolo g. Si osservi tuttavia che in generale un operatore sullo spazio di Hilbert L^2 può non possedere un simbolo di Weyl.

2. Un calcolo più diretto del simbolo di Weyl è inserire l'azione esplicita dei generatori dell'algebra di Weyl-Heisenberg data dalla (8.13) nella formula della trasformata di Fourier inversa (totale). Scrivendo
$$\hat{f}(r,s) = \frac{1}{2\pi^n}\int_{\mathbb{R}^{2n}} f(x,\xi)e^{-i\langle x,r\rangle - i\xi,s\rangle} f(q,p)\,dqdp$$
si trova
$$\begin{aligned}(Fu)(x) &= \frac{1}{2\pi^n}\int_{\mathbb{R}^{4n}} e^{i[\langle r,(x-q)\rangle - \langle s,(p-\hbar r/2)\rangle]} f(q,p)u(x+\hbar)\,drdsdqdp \\ &= \frac{1}{2\pi^n}\int_{\mathbb{R}^{4n}} e^{i[\langle r,((x-q)+s\hbar/2)\rangle - \langle s,p\rangle]} f(q,p)u(x+\hbar)\,drdsdqdp \\ &= \frac{1}{2\pi^n}\int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{-i\langle s,p\rangle} f(x+\hbar s/2,p)u(x+\hbar s)\,dpds\end{aligned}$$
Eseguendo il cambiamento di variabili $y = x + hs$ otteniamo
$$(Fu)(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{i\langle (x-y,p\rangle/\hbar} f(\frac{x+y}{2},p)u(y)\,dydp$$
che è la formula (10.2).

8.5 Proprietà fondamentali della quantizzazione di Weyl

Enunciamo e dimostriamo alcune delle proprietà fondamentali della quantizzazione di Weyl

1. Se g dipende solo da x l'azione (10.2) si riduce all'azione consueta dell'operatore di moltiplicazione. Sia infatti $g(\xi,x) = V(x)$. Allora:
$$\begin{aligned}(Op^W Vu)(x) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int_{\mathbb{R}^n} V\left(\frac{x+y}{2}\right)u(y)\,dy\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar}\,d\xi = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} V\left(\frac{x+y}{2}\right)u(y)\delta(x-y)\,dy = V(x)u(x)\end{aligned}$$

2. Se g dipende solo da ξ l'azione (10.2) si riduce alla convoluzione consueta. Sia infatti $g(x,\xi) = g(\xi)$. Allora
$$\begin{aligned}(Op^W gu)(x) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int_{\mathbb{R}^n} g(\xi)\,d\xi\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar}u(y)\,dy = \\ &\int_{\mathbb{R}^n} g(\xi)e^{i\langle (x,\xi\rangle/\hbar}\hat{u}(\xi)\,d\xi = \int_{\mathbb{R}^n} \tilde{g}(x-y)u(y)\,dy\end{aligned}$$

dove $\tilde{g}(x)$ è la trasformata di Fourier di g. Se inoltre$g$ è un polinomio in ξ, G si riduce all'azione degli operatori differenziali consueti. Sia $g(\xi, x) = \xi^l := \xi_1^{l_1} \cdots \xi_n^{l_n}$. Allora

$$Op^W(\xi^l)u = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \xi^l \, d\xi \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle(x-y,\xi\rangle/\hbar} u(y)\, dy =$$
$$= \int_{\mathbb{R}^n} \xi^l \hat{u}(\xi) e^{i\langle x,\xi\rangle/\hbar} \, d\xi = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^l u(x)$$

3. Sia $g = x\xi = \xi x$. Allora:

$$Op^W(x\xi)u = Op^W(\xi x)u =$$
$$\frac{x}{2} \int_{\mathbb{R}^n} \xi \hat{u}(\xi) e^{i\langle(x,\xi\rangle/\hbar} \, d\xi + \int_{\mathbb{R}^n} \xi e^{i\langle x,\xi\rangle/\hbar} \, d\xi \int_{\mathbb{R}^n} \frac{y}{2} e^{-i\langle y,\xi\rangle/\hbar} u(y)\, dy =$$
$$= -i\hbar\frac{1}{2} x\partial_x u + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} \xi \hat{u}'(\xi) e^{i\langle(x,\xi\rangle/\hbar} \, d\xi = -i\hbar\frac{1}{2} x\partial_x u - i\hbar\frac{1}{2}\partial_x(xu(x))$$

applicando lunluna formula di integrazione per parti all'ultimo integrale.

4. Sia ancora $g = x\xi = \xi x$. In questo caso la quantizzazione "ingenua" rappresentata dalle sostituzioni $x \mapsto x$, $\xi \mapsto -i\hbar\partial_x$ è ovviamente ambigua perché gli operatori (formali) che ne risultano sono differenti se si applica questo procedimento a $x\xi$ e a ξx. Tuttavia, per il calcolo precedente:

$$Op^W(g)u = -i\hbar\frac{1}{2}(x\partial_x + \partial_x x)u(x)$$

cioè la quantizzazione di Weyl automaticamente seleziona la combinazione simmetrica dei due operatori non simmetrici $x\partial_x$ e $\partial_x(xu(x))$. Questa proprietà è caratteristica della quantizzazione di Weyl, che si può in effetti definire in termini di prodotti simmetrici di operatori ([BS], Capitolo 5.8).

5. In tutti gli esempi precedenti l'osservabile classico g non appartiene a $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ (anche se il calcolo ha ancora senso su funzioni che appartengono a $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. La teoria degli integrali oscillanti, richiamata brevemente qui di seguito, assegna un significato alla (10.2) quando g cresce come un polinomio cosicché l'operatore corrispondente G può essere incluso nella teoria degli operatori pseudodifferenziali. È in ogni caso chiaro dai punti precedenti che G è un operatore differenziale d'ordine m se e solo se g è un polinomio in ξ dello stesso ordine, con coefficienti che possono dipendere da x.

6. In conclusione stabiliamo la relazione fra la trasformata di Wigner e il simbolo di Weyl Se poniamo $u = x - y$ e $v = (x+y)/2$ nella (8.27) si può riscrivere la relazione fra simbolo e nucleo distribuzionale nel modo seguente:

$$\mathcal{F}_p f(u, v) = K_F(v + u/2, v - u/2)$$

Invertendo la trasformata di Fourier, applicando la (8.22) e tenendo conto dell'unitarietà di W in $L^2(\mathbb{R}^{2n})$ si trova:

$$f(x, \xi) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle \xi, u\rangle/\hbar} K_F(v + u/2, , v - u/2)\, du = W K_F(\xi, v)$$

Poniamo ora $h(x, y) := \psi(x)\overline{\chi}(y)$. Allora:

$$\langle F\psi, \chi\rangle = \langle Op^W f\psi, \chi\rangle = \langle K_F, h\rangle_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} = \langle W^{-1} f, h\rangle_{L^2(\mathbb{R}^{2n})}$$
$$= \langle f, W(\chi, \psi)\rangle_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} = \langle f, Wh\rangle_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} = \int_{\mathbb{R}^{2n}} f(x, \xi)\overline{W(\chi, \psi)(x, \xi)}\, dx d\xi =$$
$$= \int_{\mathbb{R}^{2n}} f(x, \xi) W(\psi, \chi)(x, \xi)\, dx d\xi$$

Riassumendo possiamo concludere

$$\langle F\psi, \chi\rangle = \langle Op^W f\psi, \chi\rangle = \int_{\mathbb{R}^{2n}} f(x, \xi) W(\psi, \chi)(x, \xi)\, dx d\xi \qquad (8.31)$$

e questa è la relazione fra quantizzazione di Weyl e trasformata di Wigner.

9 L'operatore di Schrödinger. I: l'autoaggiunzione

9.1 Il caso unidimensionale

Studiamo in questo paragrafo l'equazione di Schrödinger unidimensionale, cioè l'equazione differenziale ordinaria

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad (9.1)$$

e l'associato problema spettrale. Poiché per il momento non siamo interessati alla dipendenza esplicita dalle costanti, prenderemo $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$, e scriveremo la (9.1) sotto la forma spettrale

$$L\psi = E\psi, \qquad L := -\frac{d^2}{dx^2} + V^2$$

L prende il nome di *operatore di Schrödinger unidimensionale formale*. Esso è un caso particolare dell'*operatore di Surm-Liuville singolare* su $\mathbb{R}$, cioè dell'operatore differenziale formale

$$L_{SL} = -\frac{d}{dx}[p(x)\frac{d}{dx}] + q(x) \tag{9.2}$$

dove $p(x) > 0$ e q sono assegnate funzioni a valori reali. Studieremo la realizzazione in $L^2(\mathbb{R})$, l'autoaggiunzione e lo spettro di $\dot{T}$ e T.

Definizione 9.1 *Sia $V(x) \in C^1(\mathbb{R})$ a valori reali. Si definisce su $L2(\mathbb{R})$:*

1. *L'operatore (di Schrödinger)* minimale $\dot{T}$*:*

$$D(\dot{T}) = C_0^\infty(\mathbb{R}), \qquad \dot{T} = Lu; \tag{9.3}$$

2. *L'operatore (di Schrödinger)* massimale T*:*

$$D(T) = \{u \in H^2_{loc}(\mathbb{R}); Lu \in L^2(\mathbb{R})\}, \dot{T} = Lu. \tag{9.4}$$

Vogliamo stabilire delle condizioni esplicite, in termini del comportamento qualitativo delle soluzioni dell'equazione differenziale ordinaria $Lu = 0$, sotto le quali $\dot{T}$ è essenzialmente autoaggiunto e quindi T autoaggiunto. Richiamiamo anzitutto un risultato generale sugli operatori differenziali:

Teorema 9.1 $\dot{T}^* = T$.

Dimostrazione
Basta osservare che, per la formula di integrazione per parti:

$$\langle \dot{T}u, v\rangle = \langle u, Tv\rangle, \quad \forall \in D(\dot{T}), \, \forall \, u \in D(T)$$

Conseguenza: $\dot{T}$ è essenzialmente autoaggiunto se e solo se T è simmetrico: $T \subset T^* = \dot{T}^{**} = \overline{\dot{T}}$. Allora $\overline{\dot{T}} = T = T^*$.

Enunciamo il risultato fondamentale in quest'ambito

Teorema 9.2 (Alternativa di Weyl)
Sia $z \in \mathbb{C}$, e $c \in \mathbb{R}$. Allora vale la seguente alternativa

(i) Ogni soluzione dell'equazione differenziale $(L-z)u = 0$ *appartiene a* $L^2(c, +\infty)$ $\forall\, z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$*;*

oppure

(ii) Esiste una ed una sola soluzione (a meno di una costante moltiplicativa) di $(L-z)u=0$ *tale che* $u(x,z) \notin L^2(c,+\infty)$ $\forall\, z \in \mathbb{C}\setminus\mathbb{R}$*;*

(iii) La medesima alternativa vale a $-\infty$*.*

Osservazione Se vale la condizione (i) si dice che per l'operatore L vale il caso del *cerchio limite* a $+\infty$. Se vale la condizione (ii) si dice che per l'operatore L vale il caso del *punto limite* a $+\infty$. Definizione analoga per $-\infty$.

Omettiamo la dimostrazione. Conseguenza diretta di questo teorema è il risultato fondamentale che segue:

Teorema 9.3 *Siano* L, $\dot{T}$, T *definiti come sopra. Allora, se e solo se vale il caso del punto limite sia a* $-\infty$ *che a* $+\infty$*:*

1. $\dot{T}$ *è essenzialmente autoaggiunto, e* T *è autoaggiunto.*

2. *Per* $z \notin \mathbb{R}$ *il risolvente* $R(z,T)$ *è l'operatore integrale continuo di nucleo* K *definito nel modo seguente*

$$(R(z,T)f)(x) = \int_{\mathbb{R}} K(x,y;z)f(y)\,dy \tag{9.5}$$

$$K(x,y;z) := \frac{1}{W(z)} \begin{cases} u(x,z)v(y,z), & -\infty \le x \le y \le +\infty \\ v(x,z)u(y,z), & -\infty \le y \le c \le +\infty \end{cases} \tag{9.6}$$

dove: $u(x,z)$ *è l'unica soluzione (a meno di una costante moltiplicativa) che sia* L^2 *a* $-\infty$*, e* $v(x,z)$ *quella* L^2 *a* $+\infty$*;* $W(z)$ *è il loro Wronskiano (che per il teorema di Liouville dipende solo da* z*). In particolare:* $z_0 \in \mathbb{R}$ *è autovalore di* T *se e solo se* $W(z_0)=0$*: in tal caso* u *e* v *sono linearmente dipendenti.*

3. *Tutti gli autovalori di* T *sono semplici.*

Osservazione Il nucleo integrale $K(x,y;z)$ si dice *funzione di Green*, o *soluzione fondamentale* di $(L-z)u=0$ nel senso consueto della teoria delle equazioni a derivate parziali. Essa infatti soddisfa l'equazion

$$(L-z)K(x,y;z) = \delta(x-y)$$

da cui la soluzione esplicita dell'equazione non omogenea $(L-zu)=f$:

$$u(x,z) = \int_{\mathbb{R}} K(x,y;z)f(y)\,dy, \quad f \in L^2$$

Un altro esempio di calcolo di soluzione fondamentale è il calcolo del nucleo risolvente del laplaciano in $\mathbb{R}^3$.

Dimostrazione (Cenno)

Date f e $g \in D(T)$, possiamo formarne il Wronskiano:

$$W_x(f,\overline{g}) = f(x)\overline{g'}(x) - f'(x)\overline{g}(x)$$

che per il Lemma di Sobolev è una funzione continua. Vale l'identità:

$$W_b(f,\overline{g}) - W_a(f,\overline{g}) = \int_a^b [(Tf)(x)\overline{g}(x) - f(x)\overline{(Tg)(x)}]\,dx$$

Per la disuguaglianza di Schwartz, la funzione integranda è in $L^2(\mathbb{R})$. Pertanto i limiti per $a \to -\infty$ e $b \to +\infty$ nel primo memebro esistono, e si trova

$$W_\infty(f,\overline{g}) - W_{-\infty}(f,\overline{g}) = \langle Tf, g\rangle - \langle f, Tg\rangle$$

A questo punto si dimostra che $W_\infty(f,\overline{g}) = W_{-\infty}(f,\overline{g}) = 0$; quindi T è simmetrico, e la prima affermazione è dimostrata.

Quanto alla seconda, ricordiamo che, per la formula della variazione dei parametri di Lagcodominio, l'integrale generale dell'equazione non omogenea $(L-z)u = f$ è:

$$u = c_1u_1 + c_2u_2 + u_1(x)\int_{-\infty}^x W(u_1,u_2;y)^{-1}u_2(y)\,dy + u_2(x)\int_x^{+\infty} W(u_1,u_2;y)^{-1}u_1(y)\,dy$$

Qui $u_1 = u_1(x,z)$, $u_2 = u_2(x,z)$ sono due soluzioni linearmente indipendenti dell'equazione omogenea, e $W(\cdot)$ il loro Wronskiano. Siccome vale il caso del punto limite ad ambedue gli estremi, potremo sempre assumere u_1 L^2 a $-\infty$ ma non a $+\infty$, e inversamente per u_2. Il Wronskiano è indipendente da y. Da ciò segue senza troppa difficoltà la limitatezza del nucleo integrale. La terza affermazione è immediata. Questo conclude il cenno di dimostrazione.

Rimane da stabilire sotto quali condizioni su V vale il caso del punto limite tanto a $-\infty$ quanto a $+\infty$. A ciò risponde il seguente risultato molto generale, che riportiamo senza dimostrazione:

Teorema 9.4 *Se esiste $c \geq 0$ tale che $V(x) \geq -cx^2$ per $|x| \to \infty$ vale il caso del punto limite tanto a $-\infty$ quanto a $+\infty$.*

Osservazione

Si osservi che questa è la condizione ottimale affinché il moto classico sia completo: un punto che si muove sulla retta sotto l'azione della forza $F = -V'(x)$, se raggiunge l'infinito, ci metterà sempre un tempo infinito se $V(x)\ geq -cx^2$, mentre ci metterà un tempo finito se $V(x) \leq -x^{2+\epsilon}, \forall\, \epsilon > 0$.

9.2 Un esempio esplicito: l'oscillatore armonico

Esponiamo in dettaglio l'esempio fondamentale dell'oscillatore armonico che risolveremo con il metodo altrettanto fondamentale degli operatori di creazione e distruzione. Qui il potenziale (vogliamo tenere conto esattamente di tutte le costanti) è $V(x) = \dfrac{m\omega^2 x^2}{2}$. Otteniamo così l'operatore di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{9.7}$$

Consideriamo in $L^2(\mathbb{R})$ l'operatore di Schrödinger minimale $\dot{H}(m,\omega,\hbar)$ definito dal primo membro della (9.7) sulle funzioni $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$. Sappiamo che $\dot{H}(m,\omega,\hbar)$ è essenzialmente autoaggiunto, e pertanto H è autoaggiunto. Per liberarci delle costanti, usiamo le dilatazioni. Si ha:

Lemma 9.1 *$\dot{H}(m,\omega,\hbar)$ è unitariamente equivalente a $\dfrac{\omega\hbar}{2}\dot{H}$, $\dot{H} := \dot{H}(1,1,1)$. Per di più, $\dot{H}$ è positivo:*

$$\langle \dot{H}f, f\rangle \geq 0, \qquad \forall\, f \in D(\dot{H})$$

Dimostrazione Consideriamo per $\lambda > 0$ la dilatazione unitaria

$$(U(\lambda)f)(x) = \lambda^{1/4} f(\lambda^{1/2}x), \quad (U(\lambda)^{-1}f)(x) = \lambda^{-1/4} f(\lambda^{-1/2}x)$$

L'immagine unitaria di $\dot{H}$ è chiaramente

$$U(\lambda)\dot{H}(m,\omega,\hbar)U(\lambda)^{-1}f = [-\lambda^{-1}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \lambda\frac{m\omega^2x^2}{2}]f = \frac{\lambda^{-1}\hbar^2}{2m}[-\frac{d^2}{dx^2} + m^2\lambda^2\omega^2x^2]f$$

Se poniamo $\lambda = \hbar/m\omega$ si ha

$$U(\lambda)\dot{H}U(\lambda)^{-1}f = \frac{\omega\hbar}{2}[-\frac{d^2}{dx^2} + x^2]f = \frac{\omega\hbar}{2}\dot{H}$$

La seconda affermazione è immediata. Ciò prova il Lemma.

Possiamo pertanto limitarci a considerare l'operatore $\dot{H}$ e la sua chiusura H. Detti μ_n i suoi autovalori, gli autovalore di $H(m,\omega,\hbar)$ saranno $E_n = \mu_n\omega\hbar/2$.

Lemma 9.2 $D(H) = D(T) \cap D(V) = H^2(\mathbb{R}) \cap L_2^2(\mathbb{R})$.

Dimostrazione Poiché $C_0^\infty(\mathbb{R})$ è un core tanto per T quanto per V, è suffoiciente dimostrare che, $\forall\, \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, esiste $b > 0$ tale che

$$\| -\frac{d^2}{dx^2}\psi\|^2 + \|x^2\psi\|^2 \le \|[-\frac{d^2}{dx^2} + x^2]\psi\|^2 + b\|\psi\|^2 \tag{9.8}$$

Si ha infatti, nel senso dei prpdotti scalari $\langle H^2 u, u\rangle = \langle Hu, Hu\rangle, u \in C_0^\infty(\mathbb{R})$:

$$\begin{aligned}
(T+x^2)^2 &= T^2 + x^4 + Tx^2 = x^2T = \frac{d^4}{dx^4} + x^4 + \frac{d^2}{dx^2}x^2 + x^2\frac{d^2}{dx^2} = \\
&= \frac{d^4}{dx^4} + x^4 + [-i\frac{d}{dx}, [-i\frac{d}{dx}, x^2]] + 2(-i\frac{d}{dx})x^2(-i\frac{d}{dx}) = \\
&= (-\frac{d^2}{dx^2})^2 + (x^2)^2 + [-i\frac{d}{dx}, -2ix] + 2(-i\frac{d}{dx})x^2(-i\frac{d}{dx}) = \\
&= (-\frac{d^2}{dx^2})^2 + (x^2)^2 - 2 + 2(-i\frac{d}{dx})x^2(-i\frac{d}{dx})
\end{aligned}$$

Pertanto, con $b > 2$:

$$\begin{aligned}
\|[-\frac{d^2}{dx^2} + x^2]\|^2 + b\|\psi\|^2 = \langle[-\frac{d^2}{dx^2} + x^2]\psi, [-\frac{d^2}{dx^2} + x^2]\rangle + +b\|\psi\|^2 \ge \\
\langle -\frac{d^2}{dx^2}\psi, -\frac{d^2}{dx^2}\psi\rangle + \langle x^2\psi, x^2\psi\rangle + 2\langle -i\frac{d\psi}{dx}x^2 - i\frac{d\psi}{dx}\rangle \ge \\
\ge \|[-\frac{d^2}{dx^2} + x^2]\psi\|^2 + b\|\psi\|^2 \ge \| -\frac{d^2}{dx^2}\psi\|^2 + \|x^2\psi\|^2
\end{aligned}$$

perché $\langle -i\frac{d\psi}{dx}x^2 - i\frac{d\psi}{dx}\rangle \ge 0$. Ciò prova il Lemma. Possiamo ora determinare lo spettro di H.

Teorema 9.5 $\sigma(H) = \{2n+1\} \Longrightarrow \sigma(H(m,\omega,\hbar)) = (n+1/2)\hbar\omega, n = 0, 1, \ldots$.

Per la dimostrazione, introduciamo gli *operatori di creazione e distruzione.*

Definizione 9.2 *Si definiscano su* $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ *gli operatori* a, $a^\dagger$, N *tramite le azioni seguenti :*

$$a = -i\frac{d}{dx} - ix; \quad a^\dagger = -i\frac{d}{dx} + ix; \quad N = a^\dagger a \tag{9.9}$$

Si noti che $a\mathcal{S} \subset \mathcal{S}$, $a^\dagger\mathcal{S} \subset \mathcal{S}$; *pertanto* N *è ben definito su* $\mathcal{S}$. a *si dice* operatore di distruzione, $a^\dagger$ operatore di creazione, N operatore numero.

Lemma 9.3 *Come identità su* $\mathcal{S}$

$$a^* = a^\dagger; \quad [a^\dagger, a] = -2I; \quad H = N + I; \quad [a, H] = 2a; \quad [a^\dagger, H] = -2a^\dagger \tag{9.10}$$

Dimostrazione

Sempre come identità su $\mathcal{S}$:

$$\begin{aligned}
[a^\dagger, a] &= [-i\frac{d}{dx} + ix, -i\frac{d}{dx} - ix] = [-i\frac{d}{dx}, -ix] + [ix, -i\frac{d}{dx}] = -2I \\
a^\dagger a &= N - I \Longrightarrow H = a^\dagger a + 1 = N + 1
\end{aligned}$$

e inoltre

$$[a, H] = [a, N] = [a, a^\dagger a] = aa^\dagger a - a^\dagger a = (aa^\dagger - a^\dagger a) = 2a$$

$$[a^\dagger, H] = [a^\dagger, N] = [a^\dagger, a^\dagger a] = a^\dagger a^\dagger a - a^\dagger a a^\dagger = a^\dagger(a^\dagger a - aa^\dagger) = -2a^\dagger$$

Ciò conclude la dimostrazione.

Lemma 9.4 *Sia $\psi \in \mathcal{S}$ un autovettore di H di autovalore μ. Allora $a^\dagger\psi \in \mathcal{S}$ è autovettore corrispondente all'autovalore $\mu+2$, e $a\psi \in \mathcal{S}$ è autovettore corrispondente all'autovalore $\mu - 2$.*

Dimostrazione

Anzitutto $a^\dagger\psi \in \mathcal{S}$, $a\psi \in \mathcal{S}$ perché a e $a^\dagger$ lasciano $\mathcal{S}$ invariante. Sia $H\psi = (a^\dagger a + I)\psi = \mu\psi$, $\psi \in \mathcal{S}$. Allora, dato che $Ha^\dagger = a^\dagger + [H, a^\dagger]$:

$$Ha^\dagger\psi = a^\dagger H\psi + H, a^\dagger]\psi = a^\dagger\mu\psi + 2a^\dagger\psi \Longrightarrow H(a^\dagger\psi) = (\mu+2)(a^\dagger\psi)$$

$$Ha\psi = aH\psi + [H, a]\psi = a\mu\psi - 2a\psi \Longrightarrow H(a\psi) = (\mu-2)(a\psi)$$

Ciò prova il lemma.

Dimostrazione del Teorema

Iterando il lemma precedente possiamo concludere che se $\psi \in \mathcal{S}$ è un autovettore di H di autovalore μ, allora $(a^\dagger)^n\psi \in \mathcal{S}$ è un autovettore di autovalore $\mu + 2n$ e $(a^\dagger)^n\psi \in \mathcal{S}$ un autovettore di autovalore $\mu - 2n$. Il procedimento si arresta se e solo se esiste un vettore $\psi_0 \in \mathcal{S}$ tale che $a^\dagger\psi_0 = 0$ oppre $a\psi_0 = 0$. Esplictamente, almeno una delle due equazioni

$$-\psi_0' + x\psi_0 = 0; \qquad \psi_0' + x\psi_0 = 0$$

deve avere soluzione in $\mathcal{S}$ si vede subito che la prima non l'ha, mentre la seconda, $a\psi_0 = 0$, ammette la soluzione

$$\psi_0(x) = Ce^{-x^2/2}, \quad C = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$$

dove la scelta della costante rende ψ_0 normalizzata in L^2. Si vede subito che $H\psi_0 = \psi_0$. Dunque otteniamo la successione di autovalori $\mu_n = 2n+1, n = 0, 1, \ldots,$ con corrispondent autovettori

$$\psi_n := C_n a(^\dagger)^n e^{-x^2/2} = C_n(-i\frac{d}{dx} + ix)^n e^{-x^2/2}$$

Questi autovalori esauriscono lo spettro di H. Sappiamo infatti che $\sigma(H) = \sigma_d(H)$; inoltre si può dimostrare che le autofunzioni ψ_n, che sono ortogonali, costituiscono un sistema completo in L^2. Ciò conclude la dimostrazione.

Osservazioni

1. Le autofunzioni di $H(m,\omega,\hbar)$ si ottengono dalle ψ_n riscalando all'indietro. esse sono quindi

$$\psi_n(x; m, \omega, \hbar) = C_n(m,\omega,\hbar)[[-i\frac{d}{dx} + i\frac{m\omega}{\hbar}x]^n e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

2. Il vettore ψ_0 si dice *stato fondamentale*, o anche *vuoto*. L'operatore $a^\dagger$ si dice di creazione perché la sua azione "crea" gli autostati a partire dal vuoto. Correspondentemente, l'operatore a li "distrugge".

Esercizio ("Buca infinita di potenziale ") Si calcolino autovalori e autovettori nel caso seguente ($a > 0$):

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & |x| > a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$

9.3 Stabilità dell'autoaggiunzione: il teorema di Rellich-Kato

Affrontiamo ora in astratto il seguente problema naturale. Sia T autoaggiunto, e gli si aggiunga un operatore V. Sotto quali condizioni la somam $T+V$ esisterà come operatore autoaggiunto? Il criterio fondamentale è il seguente

Teorema 9.6 (Rellich-Kato)
Sia T autoaggiunto, e V simmetrico e $T-$limitato con $T-sup < 1$. Allora

1. *$H = T + V$ definito su $D(T)$ è autoaggiunto;*

2. *Se T è essenzialmente autoaggiunto, $T+V$ definito su $D(T)$ è essenzialmente autoaggiunto;*

3. Se T è limitato inferiormente da M, $T+V$ è limitato inferiormente da $M - \max(\dfrac{a}{1-b}, b|M|+a)$.

Dimostrazione

1. Per ipotesi vale la

$$\|V\psi\| \le b\|T\psi\| + a\|\psi\|, \quad b<1, \psi \in D(T) \tag{9.11}$$

Essa è equivalente a

$$\|V\psi\|^2 \le b_1^2\|T\psi\|^2 + a_1\|\psi\|^2, \quad b_1<1, \psi \in D(T) \tag{9.12}$$

Infatti se vale la (9.12), vale anche la (9.11) con $b = b_1$, $a = a_1$; se vale la (9.11), vale anche la (9.12) con $b_1^2 = (1+\epsilon)b^2$, $(1+1/\epsilon)a^2 = a_1^2$, $\epsilon > 0$, per cui $\inf\{b_1\} = \inf\{b_\}$. Dimostriamo allora che $R(T+V \pm i\lambda) = \mathcal{X}$ per un qualche 0. Si ha:

$$\|(T+i\lambda)\psi\|^2 = \|T\psi\|^2 + |\lambda|^2\|\psi\|^2 \ge \|T\psi\|^2, \quad \forall\, \psi \in D(T)$$

Poiché $(T+i\lambda)^{-1}$ è una biiezione fra $\mathcal{X}$ e $D(T)$, prendendo $\psi = (T+i\lambda)^{-1}\phi$ troviamo

$$\|(T+i\lambda)^{-1}\| \le \lambda^{-1} \Longrightarrow \|T(T+i\lambda)^{-1}\| < 1$$

per $|\lambda|$ sufficientemente grande. Applicando la (9.11) con $\psi = (T+i\lambda)^{-1}\phi$ troviamo

$$\|V(T+i\lambda)^{-1}\phi\| \le b\|T(T+i\lambda)^{-1}\phi\| + a\|(T+i\lambda)^{-1}\phi\| \le (b + a/|\lambda|)\|\phi\|$$

da cui:

$$\|V(T+i\lambda)^{-1}\| \le b + a/|\lambda| < 1$$

per $|\lambda|$ sufficientemente grande. Sia ora $B_+ := V(T+i\lambda)^{-1}$. Allora $\|B_+\| < 1$, e quindi sappiamo (Lemma 3.2 con $T = I$, $S = B_+$) che $I + B_+$ è una biiezione di $\mathcal{X}$ in sè. Dunque $R(I+B_+) = \mathcal{X}$. D'altra parte, $\forall\, \psi \in D(T) = D(H)$ vale l'identità

$$(T+V+i\lambda)\psi = (I+B_+)(T+i\lambda)\psi$$

dato che $R(T+i\lambda) = \mathcal{X}$. Questa rappresentazione implica $R(T+V+i\lambda) = \mathcal{X}$. Con un ragionamento speculare si dimostra che $R(T+V-i\lambda) = \mathcal{X}$. Ciò conclude la dimostrazione dela prima asserzione. Omettiamo la facile dimostrazione della seconda e passiamo direttamente alla terza. Sia $\lambda \in \mathbb{R}$, $-\lambda < M$. Allora $R(T+\lambda) = R(T+V+i\lambda) = \mathcal{X}$, e caome sopra, $\|V(T+i\lambda)^{-1}\| < 1$ se

$$-\lambda < M - \max\{\frac{a}{1-b}, b|M|+a\}$$

Per un tale λ, $R(T+V+\lambda) = \mathcal{X}$ il che permette di provare l'asserto.

9.4 Applicazione all'operatore di Schrödinger a due corpi

Consideriamo ora in $L^2(\mathbb{R}^3)$ l'operatore di Schrödinger formalmente definito da $H = T + V$, $T = -\Delta$. Si ha

Teorema 9.7 (Kato)
Sia $V : R^3 \to \mathbb{R}$, $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, cioè esistano $v_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ e $v_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ tali che $V = v_1 + v_2$. Allora l'operatore massimo di moltiplicazione per V è $T-$ limitato con $T-$sup 0 e pertanto l'operatore di Schrödinger H definito su $D(T) = H^2(\mathbb{R}^3)$ è autoaggiunto.

Esempio 9.1 Con $r = \|x\|$, β, γ costanti: $V = \dfrac{\beta}{r}$ (potenziale di Coulomb); $V = \dfrac{\beta}{r}$ (potenziale di Yukawa). In particolare: l'operatore di Schrödinger corrispondente all'atomo idrogenoide è autoaggiunto.

Dimostrazione
Sia $\phi \in D(T) = H^2(\mathbb{R}^3)$. Allora per il lemma di Sobolev ϕ è cotinua e limitata in $\mathbb{R}^3$; inoltre (si veda il lemma successivo) $\forall\, b > 0$ esiste $a > 0$ tale che

$$\|\psi\|_\infty \leq b\|\Delta\psi\|_2 + \|\psi\|_2$$

dove al solito il laplaciano va inteso nel senso distribuzionale. Ora per ipotesi esistono $v_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ e $v_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ tali che $V = v_1 + v_2$. Pertanto:

$$\|V\psi\|_2 \leq \|v_1\psi\|_2 + \|v_2\psi\|; \|v_2\psi\|_2 \leq \|v_2\|_\infty\|\psi\|_2;$$
$$\|v_1\psi\|_2 \leq \|v_1\|_2\|\psi\|_\infty \leq \|v_1\|_2(b\|\Delta\psi\|_2 + a\|\psi\|_2);$$
$$\|V\psi\|_2 \leq b_1\|\Delta\psi\|_2 + a_1\|\psi\|_2, \quad b_1 = b\|v_1\|_2$$

Poiché b è piccolo a piacere, così sarà b_1. Ciò dimostra l'asserto.

Lemma 9.5 *Sia $\phi \in H^2(\mathbb{R}^3)$. Allora ϕ è continua dappertutto e $\forall\, b > 0$ esiste $a > 0$ tale che*

$$\|\phi\|_\infty \leq b\|\Delta\phi\|_2 + \|\phi\|_2 \tag{9.13}$$

Dimostrazione
Sia $\hat{\phi}(\xi)$ la trasformata di Fourier di ϕ. Dimostriamo anzitutto che $\hat{\phi}(\xi) \in L^1(\mathbb{R}^3)$. Infatti, se $\phi \in H^2$, allora $(1 + |\xi|^2)\hat{\phi}(\xi) \in L^2$. D'altra parte, $(1 + |\xi|^2)^{-1} \in L^2(\mathbb{R}^3)$, e possiamo applicare la disuguagliazna di Schwartz:

$$\|\hat{\phi}(\xi)\|_1 \leq c\|(1 + |\xi|^2)\hat{\phi}(\xi)\|_2 \leq c[\||\xi|^2\hat{\phi}(\xi)\|_2 + \|\hat{\phi}(\xi)\|_2, \ c := \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d\xi}{(1 + |\xi|^2)^2}$$

Dato $\hat{\phi} \in L^1$, per il lemma di Riemann-Lebesgue $\phi(x)$ è limitata e continua su $\mathbb{R}^3$, e $\|phi(x)\|_\infty \leq \|\hat{\phi}(\xi)\|_1$. Per dimostrare la (9.13), per il teorema di Fourier-Plancherel basterà far vedere che

$$\|\hat{\phi}(\xi)\|_1 \leq b\|\xi^2\hat{\phi}(\xi)\|_2 + a\|\hat{\phi}(\xi)\|_2$$

con $b > 0$ piccolo a piacere. Per $\alpha > 0$ sia $\hat{\phi}_\alpha(\xi) := \alpha^3\phi(\alpha\xi)$. Allora:

$$\|\hat{\phi}_\alpha\|_1 = \|\hat{\phi}\|_1; \ \|\hat{\phi}_\alpha\|_2 = \alpha^{3/2}\|\hat{\phi}\|_2; \ \|\xi^2\hat{\phi}_\alpha\|_2 = \alpha^{-1/2}\|\xi^2\hat{\phi}\|_2$$

Pertanto:

$$\|\hat{\phi}\|_1 \leq c\alpha^{-1/2}\|\xi^2\hat{\phi}\|_2 + c\alpha^{3/2}\|\hat{\phi}\|_2$$

e ciò prova il Lemma data l'arbitrarietà di $\alpha > 0$.

9.5 L'operatore di Schrödinger dell'effetto Zeeman

L'effetto Zeeman consiste nella separazione delle righe spettrali dell'atomo di idrogeno che si osserva quando lo si sottopone all'azione di un campo magnetico costante. Vogliamo dimostrare l'autoaggiunzione dell'operatore di Schrödinger corrispondente. Ricordiamo che se il punto materiale classico di massa 1/2 e carica unitarie si muove sotto l'azione di un campo magnetico costante $\mathbf{B}$, e quindi potenziael vettor $\mathbf{A}$, $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, il suo impulso è $\mathbf{p} = m\dot{q} - \mathbf{A}$ e quindi l'Hamiltoniana ha l'espressione

$$\mathcal{H} = (\mathbf{p} - \mathbf{A})^2 + V(r)$$

dove $V(r)$ è il potenziale, supposto per semplicità centrale. L'effetto Zeeman vero e proprio corrisponde al caso di $V = -Z/r$, potenziale di Coulomb, e $\mathbf{A} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{B}$.

L'operatore massimale di Schrödinger corrispondente sarà quindi

$$H = (-i\nabla - \mathbf{A})^2 + V(r); \quad D(H) = \{u \in L^2(\mathbb{R}^3) : (-i\nabla - \mathbf{A})^2 + V(r)u \in L^2(\mathbb{R}^3)\} \tag{9.14}$$

Dimostriamo ora l'autoaggiunzione di H sotto ipotesi molto generali.

Teorema 9.8 *Sia $\dot{H}$ l'operatore minimale in $L^2(\mathbb{R}^3)$ definito da H. Allora $\dot{H}$ è essenzialmente autoaggiunto e l'operatore autoaggiunto H ha dominio H^2 soptto le ipotesi seguenti*

1. *V ha valori reali, e $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$*

2. *$\mathbf{A}$ ha valori reali, $A_i \in L^4 + L^\infty, i = 1,2,3$ e $\nabla \cdot \mathbf{A} \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$*

Dimostrazione

Si ha

$$\dot{H}\phi = -\Delta\phi + 2i\mathbf{A}\cdot\nabla\phi + i(\nabla\cdot\mathbf{A})\phi + \mathbf{A}^2\phi + V\phi$$

Integrando per parti si vede subito che $\dot{H}$ è simmetrico. Date le ipotesi, i termini $(\nabla\cdot\mathbf{A})$, $\mathbf{A}^2$, V sono per il teorema precedente relativamente limitati rispetto a $T = -\Delta$, $D(T) = H^2$ con $T-$sup relativo 0. Dimostriamo allora che anche $\mathbf{A}\cdot\nabla$ lo è. Poiché $A_i \in L^4$, applicando prima la disuguaglianza di Hölder $\|fg\|_2 \le \|f\|_p\|g\|_q$, $\dfrac{1}{p}+\dfrac{1}{q} = 1$, e poi la disuguaglianza di Hausdorff-Young $\|\hat{f}\|_q \le (2\pi)^{(1/2-1/p)n}\|f\|_p, 1 \le p \le 2, \dfrac{1}{p}+\dfrac{1}{q} = 1$, si ottiene:

$$\begin{aligned}
\|A_i\frac{\partial}{\partial x_i}\phi\|_2 &\le \|A_i\|_4\|\frac{\partial}{\partial x_i}\phi\|_4 \le \|A_i\|_4\|\xi_i\hat{\phi}(\xi)\|_{4/3} \\
&\le \|A_i\|_4\|(1+|\xi|)^{-\alpha}\|_4 + \|(1+|\xi|)^\alpha\xi_i\hat{\phi}(\xi)\|_2, \quad 3/4 < \alpha < 1
\end{aligned}$$

Qui la disuguaglianza ultima scritta segue ancora da quella di Hölder. Infatti:

$$\xi_i\hat{\phi}(\xi) = (1+|\xi|)^{-\alpha}(1+|\xi|)^\alpha\xi_i\hat{\phi}(\xi)$$

e $\|(1+|\xi|)^{-\alpha}\|_4 < +\infty$ se $3/4 < \alpha < 1$. Osserviamo ora che $\forall\, b > 0$ esiste $a > 0$ tale che

$$\|(1+|\xi|)^\alpha\xi_i\hat{\phi}(\xi)\|_2 \le \|(a+b|\xi|^2)\hat{\phi}(\xi)\|_2 \le b\|\Delta\phi\|_2 + a\|\phi\|_2$$

dove l'ultima disuguaglianza vale per il teorema di Fourier-Plancherel. Ciò conclude la dimostrazione.

Per quanto riguarda l'essenziale autoaggiunzione, vale un risultato molto generale (che riportiamo senza dimostrazione; segue dalla disuguaglianza di Kato) sotto la sola ipotesi che il potenziale sia non negativo (*repulsivo*, nel gergo dei fisici

Teorema 9.9 (Kato)

Sia $V(x) \le 0$, $V(x) \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^n)$. Allora l'operatore di Schrödinger minimale $\dot{H} = -\Delta + V$ è essenzialmente autoaggiunto.

9.6 Un altro esempio esplicito: i livelli di Landau

Consideriamo ancora l'operatore che descrive il moto quantistico di una carica in un campo magnetico, sotto l'ipotesi che il campo magnetico sia costante e che non vi siano altre forze oltre quella di Lorentz dovuta al campo magnetico.

Notiamo anzitutto che per l'effetto Zeeman propriamente detto (campo magnetico costante) l'operatore di Schrödinger (9.14) è simmetrico attorno alla direzione del campo: possiamo infatti prendere:

$$\mathbf{B} = (0, 0, B); \qquad \mathbf{A} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{B} = B(x_2, -x_1, 0)$$

e pertanto

$$(-i\nabla - \mathbf{A})^2 = \langle(-i\nabla - \mathbf{A}), (-i\nabla - \mathbf{A})\rangle = -\Delta + B^2(x_1^2 + x_2^2) - i\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla + \mathbf{A}^2 =$$
$$-\Delta + B^2(x_1^2 + x_2^2) - (-i\nabla) \cdot (\mathbf{x} \wedge \mathbf{B}) - (\mathbf{x} \wedge \mathbf{B}) \cdot i\nabla = -\Delta + B^2(x_1^2 + x_2^2) - 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$$

dove $2\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$ è la proiezione del momento della quantità di moto lungo l'asse z moltiplicata per l'intensità del campo magnetico. Essa è una costante, denotata L_B. Omettendo questa costante additiva otteniamo allora l'operatore di Schrödinger che descrive il moto di una carica elettrica unitaria in un campo magnetico costante:

$$H_B = -\Delta + B^2(x_1^2 + x_2^2), \quad D(H) = H^2(\mathbb{R}^3) \cap D(x_1^2 + x_2^2) \tag{9.15}$$

Sappiam già che questo operatore è autoaggiunto. Calcoliamone lo spettro. Procediamo per separazione delle variabili, ponendo

$$\psi(x_1, x_2, x_3; E) = \psi_1(x_1, E_1) \cdot \psi_2(x_2, E_2) \cdot \psi_3(x_3, E_3); \qquad E = E_1 + E_2 + E_3$$

nell'equazione di Schrödinger $H_B\psi = E\psi$. Essa allora si spezza nelle tre equazioni seguenti

$$\begin{cases} -\psi_1''(x_1) + B^2 x_1^2 = E_1\psi_1(x_1) \\ -\psi_2''(x_2) + B^2 x_2^2 = E_2\psi_2(x_2) \\ -\psi_3''(x_3) = E_3\psi_3(x_3) \end{cases}$$

Le prime due equazioni sono quelle dell'oscillatore armonico. Per quanto visto sopra, avremo allora $E_1 = (2n_1 + 1)B$, $E_2 = (2n_2 + 1)B$, $n_1 = 0, 1, \ldots$, $n_2 = 0, 1, \ldots$. La terza equazione corrisponde al mosto quantistico libero sull'asse x_3. Lo spettro è continuo su $]0, +\infty[$. Potremo scrivere $E_3 = k^2, k \in \mathbb{R}$. Riassumendo:

1. $\sigma(H_B) = \sigma_{ess}(H_B) =]0, +\infty[$, $\sigma_d(H_B) = \emptyset$;

2. $\sigma_p(H_B) = \emptyset$ 2. $\sigma_p(H_B) := \{E_n\} = 2n+1$, $n = n_1 + n_2 = 0, 1, ;$ l'autovalore ha molteplicità n;

3. I punti $E_n = 2n+1$, $n = n_1 + n_2 = 0, 1$, sono i *livelli di Landau*. Si noti che essi non sono autovalori, perché le corrispondenti autofunzioni non appartengono a L^2 lungo la direzione x_3.

9.7 La disuguaglianza di Kato

10 L'operatore di Schrödinger. II: elementi di teoria spettrale

10.1 Classificazioni dello spettro di un operatore autoaggiunto

Notiamo anzitutto una facile conseguenza del teorema spettrale:

Proposizione 10.1 *Sia T un operatore autoaggiunto in $\mathcal{X}$: $T = T^*$. Allora*

1. *$\lambda \in \sigma(T)$ se e solo se esiste una successione $\{f_n\} \in D(T)$ con* $\liminf \|f_n| > 0$ *tale che $\|(T - \lambda I)f_n\| \to 0$;*

2. *λ —eh autovalore di T se e solo se esiste una successione di Cauchy $\{f_n\} \in D(T)$ con* $\liminf \|f_n| > 0$ *tale che $\|(T - \lambda I)f_n\| \to 0$;*

3. *λ è autovalore di T se e solo se $E(\lambda) - E(\lambda - 0) \neq 0$.*

Dimostrazione

Limitiamoci a dimostrare la terza affermazione. Sia $Tf = \lambda f$, $f \neq 0$. Allora:

$$0 = \|(T - \lambda I)f\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |\lambda - t|^2 \, d\|E(t)f\|^2 \longrightarrow |\lambda - t| = 0 \; q.d.$$

rispetto a $\rho_f := \|E(t)f\|^2$. Quindi $E(t)f$ è costante in $]-\infty, \lambda]$ e in $[\lambda, +\infty[$. Da ciò segue che $E(\_-) = 0$, $E(\lambda)f = E(\lambda_+)f = f$. Dunque $E(\lambda) - E(\lambda - 0) \neq 0$.

Viceversa, sia $f \in R[E(\lambda) - E(\lambda - 0)]$. Allora

$$\|(T - \lambda I)f\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |\lambda - t|^2 \, d\|E(t)f\|^2 = 0;$$

$$\langle E(t)[E(\lambda) - E(\lambda - 0)]f, f\rangle = \langle [E(\lambda) - E(\lambda - 0)]f, fE(t)\rangle =$$

$$= \langle E(min(s,t))f, f\rangle - \langle E(min(s_-,t))f, f\rangle = 0$$

Una prima classificazione dello spettro, valida per *tutti* gli operatori chiusi in uno spazio di Banach, è la seguente:

Definizione 10.3 *$\sigma(T) = \sigma_d(T) \cup \sigma_{ess}(T)$. Qui $\sigma_d(T)$ è l'insieme di tutti gli autovalori isolati e di molteplicità finita di T, e $\sigma_{ess}(T) = \sigma(T) \setminus \sigma_d(T)$. In altre parole, $\sigma_{ess}(T)$ consiste in tutti i punti di $\sigma(T)$ che non sono autovalori* isolati *di molteplicità finita. Pertanto $\lambda \in \sigma_{ess}(T)$ può essere o un autovalore di molteplicità infinita, oppure un punto non isolato dello spettro, autovalore o no.*

Nel caso particolare degli operatori autoaggiunti in uno spazio di Hilbert lo spettro essenziale si può caratterizzare tramite le *successioni di Weyl*

Proposizione 10.2 *Valgono le equivalenze seguenti*

(i) $\lambda \in \sigma_{ess}(T)$;

(ii) $\exists \{f_n\} \in D(T)$, $\liminf \|f_n| > 0$, $f_n \to 0$ *debolmente, tale che* $\|(T - \lambda I)f_n\| \to 0$;

(iii) $\dim R[E(\lambda + \epsilon) - E(\lambda - \epsilon)] = \infty$, $\forall \, \epsilon > 0$.

Dimostrazione

(i) implica (ii). Sia λ autovalore di molteplicità infinita. Allora $\dim\ker(T - \lambda I) = +\infty$. Allora esiste almeno una successione ortogonale $\{f_n\} \in \ker(T - \lambda I)$, ed essa converge debolmente a 0.

Sia ora λ un punto di accumulazione di $\sigma(T)$. Allora $\exists \{\lambda_n\} \in \sigma(T)$, $\lambda_n \neq \_m$ se $m \neq n$, tale che $\lim_{n\to\infty} \lambda_n = \lambda$. Sia $\epsilon_n > 0$ tale da rendere gli intervalli $\Delta_n :=]\lambda_n - \epsilon_n, \lambda_n + \epsilon_n[$ disgiunti. Sia ha $E(]\lambda_n - \epsilon_n, \lambda_n + \epsilon_n[) \neq 0$ perché $\lambda \in \sigma(T)$. Allora esiste $f_n \in R(E(]\lambda_n - \epsilon_n, \lambda_n + \epsilon_n[))$ con $\|f_n\| = 1$. Si ha per costruzione $\langle f_n, f_m\rangle = \delta_{n,m}$, e quindi $f_n \to 0$ debolmente, e poi $\|(T - \lambda I)f_n\| \to 0$. Infatti:

$$\|(T - \lambda I)f_n\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |t - \lambda|^2 \, d\|E(t)f_n\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |t - \lambda|^2 \chi_{\Delta_n} \, d\|E(t)f_n\|^2 \leq \epsilon_n^2 \|f_n\|^2$$

Facciamo ora vedere che la (ii) implica la (iii). Sia per assurdo $\dim R[E(\lambda+\epsilon)-E(\lambda-\epsilon)] < +\infty$. Sia $\{f_n\}$ la successione di (ii). Allora $E(\lambda+\epsilon)-E(\lambda-\epsilon)$ è compatto e quindi $[E(\lambda+\epsilon)-E(\lambda-\epsilon)]f_n \to 0$ fortemente. D'altra parte:

$$\|(T-\lambda I)f_n\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |t-\lambda|^2\, d\|E(t)f_n\|^2 \geq \int_{\mathbb{R}-[\lambda-\epsilon,\lambda+\epsilon]} |t-\lambda|^2\, d\|E(t)f_n\|^2 \geq$$
$$\epsilon^2[\int_{\mathbb{R}} d\|E(t)f_n\|^2 - \int_{\mathbb{R}} \chi(\lambda-\epsilon,\lambda+\epsilon)\, d\|E(t)f_n\|^2] =$$
$$\epsilon^2[\|f_n\|^2 - \|[E(\lambda+\epsilon)-E(\lambda-\epsilon)]f_n\|^2$$
$$\Longrightarrow \liminf \|(T-\lambda I)f_n\|^2 \leq \epsilon^2 \liminf \epsilon^2\|f_n\|^2 > 0$$

il che contraddice la (ii).

Per concludere la dimostrazione basterà ora fare vedere che la (iii) implica la (i). Se $\dim R[E(s)-E(s_-)] = +\infty$, s è autovalore di molteplicità infinita e pertanto $s \in \sigma_{ess}(T)$. Sia infine $\dim R[E(s)-E(s_-)] < +\infty$, ma $\dim R[E(s+\epsilon)-E(s-\epsilon)] = +\infty$ $\forall\, \epsilon > 0$. Per la proposizione precedente l'insieme $]s-\epsilon, s[\cup]s, s+\epsilon[$ contiene almeno un punto di $\sigma(T)$ $\forall\, \epsilon > 0$. Quindi s è un punto di accumulazione dello spettro e ciò prova la proposizione.

Esiste un'altra classificazione naturale, nel senso della teoria della misura, di $\sigma(T)$.

Definizione 10.4 (Classificazione dello spettro)
Sia T un operatore autoaggiunto. Allora

(i) L'insieme degli autovalori di T costituisce lo spettro puntuale *di T, denotato $\sigma_p(T)$.*
L'inviluppo lineare chiuso degli autovettori, denotato $X_p(T)$, si dice sottospazio discontinuo di T.

(ii) Il complemento ortogonale $X_C(T) := \mathcal{X}_p(T)^\perp$ del sottospazio discontinuo si dice sottospazio continuo di T.

(iii) Sia P_p il proiettore su $X_p(T)$, e P_c il proiettore su $X_c(T)$, $P_p \oplus P_c = I$. Allora lo spettro di $T_p := P_pTP_p = P_pT = TP_p$ è lo spettro puntuale *di T, e lo spettro di $T_c := P_cTP_c = P_cT = TP_c$, denotato $\sigma_c(T)$, si dice* spettro continuo *di T.*

Osservazione

I proiettori P_p e P_c ovviamente *riducono* T: $TX_p \subset X_p$, $TX_c \subset X_c$. Equivalentemente: $[T,P_p] = [T,P_c] = 0$. Quindi $\sigma_p(T) \subset \sigma(T)$, $\sigma_c(T) \subset \sigma(T)$.

Si ha ovviamente subito:

Proposizione 10.3 *Sia T autoaggiunto. Allora:*

1.

$$X_p(T) = \{u \in D(T) \mid \rho_u(t) = \langle E(t)u, u\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \theta(\lambda_k - u)\},$$
$$c_k = \langle u, \psi_k\rangle, \quad T\psi_k = \lambda_k \psi_k;$$

cioè $\mathrm{supp}\ \rho_u(t) = \mathrm{sing\ supp}\ \rho_u(t) \subset \sigma_d(T)$*;*

2. $X_c(T) = \{u \in D(T) \mid \rho_u(t) = \langle E(t)u, u\rangle$ continua $\}$

Proseguendo nel teorema di decomposizione di Lebesgue, poniamo al seguente ulteriore

Definizione 10.5 (Spettro assolutamente continuo e singolare continuo) *Sia:*

1. *il sottospazio* assolutamente continuo $X_{ac}(T)$ *di T è definito nel modo seguente:*

$$X_{ac}(T) := \{u \in X_c(T) \mid \rho_u(t) = \langle E(t)u, u\rangle \text{ assolutamente continua } \}$$

2. *il sottospazio* singolare continuo $X_{sc}(T)$ *di T è definito nel modo seguente:*

$$X_{sc}(T) := \{u \in X_c(T) \mid \rho_u(t) = \langle E(t)u, u\rangle \text{ singolare continua } \}$$

Anche qui i proiettori P_{ac} e P_{sc} (notazioni ovvie) ovviamente *riducono* T_c. Quindi $\sigma_{ac}(T) \subset \sigma_c(T)$, $\sigma_{sc}(T) \subset \sigma_c(T)$.

la stabilità dello spettro essenziale rispetto alle perturbazioni è l'oggetto del prossimo paragrafo. La stabilità dello spettro discreto viene esaminata nella teoria delle perturbazioni e quella dello spettro continuo nella teoria della diffusione.

10.2 Relativa compattezza e stabilità dello spettro essenziale

Premettiamo il risultato fondamentale sulla teoria spettrale degli operatori compatti.

Teorema 10.10 (Hilbert-Schmidt)
Sia T compatto in $\mathcal{X}$. Allora:

1. *$\sigma(T)$ è un insieme numerabile che ammette 0 come solo punto di accumulazione;*

2. *$\sigma_{ess}(T) = \{0\}$, e pertanto $\sigma_d(T) = \sigma(T) \setminus \{0\}$;*

3. *Se $\mathcal{X}$ è Hilbertiano, e T simmetrico, allora $\sigma_d(T)$ contiene almeno un punto.*

Dimostrazione Si veda un libro qualsiasi. Il mio preferito è il Kolmogorov-Fomin.

Queste proprietà spettrali si riflettono immediatamente sugli inversi degli operatori compatti.

Teorema 10.11 (Operatori con risolvente compatto)
Sia T un operatore chiuso in $\mathcal{X}$. Sia $\rho(T) \neq \emptyset$, e sia $R(z_0, T)$ compatto per un qualche $z_0 \in \rho(T)$. Allora $R(z, T)$ è compatto $\forall\, z \in \rho(T)$ e $\sigma(T)$ è discreto, cioè $\sigma_{ess} = \emptyset$.

Omettiamo la semplice dimostrazione.

La nozione fondamentale per la stabilità dello spettro essenziale è la *relativa compattezza.*

Definizione 10.6 (Compattezza relativa) *Sia T chiuso nello spazio di Banach $\mathcal{X}$. L'operatore V in $\mathcal{X}$ dicesi* compatto relativamente a T, *o* T-compatto, *se $D(T) \subset D(V)$ e V è compatto se considerato come operatore da $\mathcal{X}_T$ a $\mathcal{X}$.*
Equivalentemente: V è T-compatto *se, per ogni successione $u_n \in \mathcal{X}$ tale che $\|u_n\|_T^2 = \|u_n\|_T^2 + \|Tu_n\|_T^2 \leq C$, Vu_n contiene una sottosuccessione convergente.*

Le affermazioni che seguono sono conseguenze più o meno immediate della definizione:

1. Se V è T-compatto allora è anche T-limitato. Se V è chiudibile, il $T - \sup$ relativo è 0.

2. Se V è T-compatto, e T continuo in $\mathcal{X}$, V è compatto e viceversa;

3. Se V è T-compatto, e T una biiezione fra $D(T)$ e $\mathcal{X}$, (e pertanto $T^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ per il teorema del grafico chiuso) allora VT^{-1} è compatto e viceversa.

Si ha allora

Teorema 10.12 (Weyl)
Sia $\mathcal{X}$ un Hilbert, T un operatore ivi autoaggiunto, V simmetrico e $T-$compatto. Allora $H := T + V$, $D(H) = D(T)$ è autoaggiunto e $\sigma_{ess}(H) = \sigma_{ess}(T)$.

Dimostrazione
Se V è simmetrico e $T-$compatto è anche T-limitato. con $T-\sup$ relativo 0. Quindi H è autoaggiunto per il teorema di Rellich-Kato. Se V è $T-$compatto le successioni di Weyl di T e H sono le stesse. Infatti, sia $\{u_n\} \in D(T) = D(H)$ tale che lim inf $\|u_n\| > 0$, $u_n \to 0$ debolmente, $\|(T - \lambda I)u_n\| \to 0$. Allora $\exists\, C > 0$ tale che $\|u_n\| + \|Tu_n\| \leq C$, e

$$\|(H - \lambda I)u_n\| = \|(T + V - \lambda I)u_n\| \leq \|(T - \lambda I)u_n\| + \|Vu_n\| \to 0$$

dato che $\|Vu_n\| \to 0$ per la compattezza relativa. Ciò prova il teorema.

Possiamo ora caratterizzare lo spettro essenziale dell'operatore di Schrödinger a due corpi quando il potenziale si annulla all'infinito.

Teorema 10.13 *Consideriamo l'operatore di Schrödinger $H = T + V$ come nel Teorema 9.7. Sia ora $V \in L^2 + L^\infty_\epsilon$, cioè (nelle notazioni del citato teorema) sia $\|v_2\|_\infty < \epsilon$ per ogni $\epsilon > 0$. Allora V è $T-$ compatto.*

Dimostrazione
Occorre fare vedere che per ogni successione u_n tale che $\|u_n\|_{H^2} = \|\Delta u_n\| + \|u_n\| > C$ ammette una sottosuccessione convergente. Poiché, come abbiamo visto nella dimostrazione del Teorema 9.7, si ha $\|u_n\|_\infty \leq K\|u_n\|H^2 \leq C'$, la successione u_n è uniformemente limitata, e per di più equicontinua in ogni compatto $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Ora possiamo sempre prendere v_1 a supporto compatto; $\{v_1 u_n\}$ contiene una sottosuccessione convergente in L^2 per il teorema della convergenza dominata dato che u_n contiene una successione uniformemente convergente in Ω per il teorema di Ascoli-Arzelà. Inoltre $\|v_2\|_\infty < \epsilon$ implica che $\|v_2 u_n\| < \epsilon$ uniformemente su n, e ciò basta a concludere la dimostrazione.

Dato che $\sigma(T) = \sigma_{ess}(T) = [0, +\infty[$, si ottiene subito:

Corollario 10.1 *Se $V(x) \to 0$ per $|x| \to \infty$, $\sigma_{ess}(H) = [0, +\infty[$.*

10.3 Operatori di Schrödinger con spettro discreto

Le considerazioni del paragrafo precedente sistemano la questione dell'autoaggiunzione e della collocazione dello spettro essenziale in una vasta classe di operatori di Schrödinger nel caso in cui il potenziale $V(x)$ si annulli all'infinito. Vogliamo occuparci ora del caso opposto, quello in cui il potenziale diverge. Se il potenziale diverge a $+\infty$ per $|x| \to \infty$ i moti classici non raggiungono mai l'infinito. Vedremo che lo spettro del corrispondente operatore di Schrödinger è discreto. Nel paragrafo precedente abbiamo visto invece visto che quando i moti classici possono raggiungere l'infinito, come aviene quando il potenziale si annulla a grandi distanze, lo spettro essenziale è non vuoto, potremo concludere, almeno qualitativamente, che lo spettro discreto "corrisponde" ai moti classici confinati mentre lo spettro "continuo" ai moti che possono raggiungere l'infinito. Il teorema d Ruelle del Capitolo 13 dà una formulazione amtematica precisa a questa intuizione.

Cominciamo col caratterizzare gli operatori dal risolvente compatto.

Lemma 10.6 *Sia T autoaggiunto e inferiormente limitato (senza ridurre la generalità, positivo). Allora $R(z,T)$ è compatto per uno $z_0 \in \rho(T)$ (e conseguentemente, tutti gli $z \in \rho(T)$) se e solo se l'identità è compatta da $\mathcal{X}_T$ a $\mathcal{X}$, cioè se l'insieme $\{\psi : \|\psi\|_T^2 = \|\psi\|^2 + \|T\psi\|^2 \le b^2\}$ è compatto in $\mathcal{X}$.*

Dimostrazione

Si tratta di una conseguenza immediata delle definizione di compattezza relativa. Basta scrivere $\psi = (T+I)^{-1}\phi,\ \phi \in \mathcal{X}$.

Occorre allora stabilire criteri di compattezza per sottoinsiemi di $\mathcal{X}$, ad esempio per $\mathcal{X} = L^2$. Si ha

Teorema 10.14 (M.Riesz)

La chiusura di un sottoinsieme della boccia unitaria S in L^p, $1 < p < \infty$, è compatta se e solo se

1. *$f \to 0$ in senso L^p uniformemente in S per $|x| \to \infty$: ciò significa che $\forall\, \epsilon > 0$ esiste un compatto K indipendente da $f \in S$ tale che*

$$\int_{\mathbb{R}^n \setminus K} |f(x)|^p \, dx < \epsilon^p$$

2. *S è una famiglia equicontinua in senso L^p, cioè $\forall\, \epsilon > 0\ \exists\, \delta > 0$ indipendente da $f \in S$ tale che*

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f(x-y) - f(x)|^p\, dx < \epsilon^p$$

Non dimostreremo questa proposizione, ma una delle sue conseguenze, di facile applicazione nel caso di Schrödinger:

Proposizione 10.4 (Criterio di Rellich)
Siano $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $G : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ misurabili, non negative e divergenti positivamente per $|x| \to +\infty$, cioè $\forall\, N > 0\ \exists\, R_N$ tale che $F(x) \geq N$, $G(x) \geq N$ quasi dappertutto in $|x| > R_N$. Allora l'insieme:

$$S := \{\psi : \|\psi\|^2 \leq 1\ ,\ \int_{\mathbb{R}^n} F(x)|\psi(x)|^2\, dx \leq 1\ ;\ \int_{\mathbb{R}^n} G(\xi)|\hat{\psi}(\xi)|^2\, d\xi \leq 1\}$$

è compatto in $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Dimostrazione
Sia $\psi \in S$. Si ha:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(x)|^2\, dx = \int_{\mathbb{R}^n} F^{-1}F|\psi(x)|^2\, dx \leq \operatorname{ess\,sup} F^{-1} \int_{\mathbb{R}^n} F\psi(x)|^2\, dx$$

e quindi possiamo prendere $K = R_N$ nel teorema precedente, indipendentemente da ψ. Inoltre, ricordando che $\mathcal{F}f(x-y) = e^{-i\xi y}\hat{f}(\xi)$, possiamo scrivere, per il teorema di Fourier-Plancherel:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(x-y) - \psi(x)|^2\, dx = \int_{\mathbb{R}^n} |e^{-i\xi y} - 1|^2 |\hat{\psi}(\xi)|^2\, d\xi =$$
$$= \int_{\mathbb{R}^n} G(\xi)^{-1}G(\xi)|e^{-i\xi y} - 1|^2|\hat{\psi}(\xi)|^2\, d\xi \leq \int_{K_\epsilon} |e^{-i\xi y} - 1|^2|\hat{\psi}(\xi)|^2\, d\xi +$$
$$+ \operatorname{ess\,sup} G^{-1} \int_{\mathbb{R}^n \setminus K_\epsilon} G(\xi)|e^{-i\xi y} - 1|^2|\hat{\psi}(\xi)|^2\, d\xi < \epsilon^p + \epsilon^p$$

dove il primo ϵ^p viene dalla condizione 1 del teorema di M.Riesz e il secondo ϵ^p dalla continuità uniforme in senso L^p. Ciò conclude la dimostrazione.

Corollario 10.2 *Sia $\dot{H} = -\Delta + V$ l'operatore di Schrödinger minimale su $L^2(\mathbb{R}^n)$; V inferiormente limitato; $V \to +\infty$ per $|x| \to +\infty$; allora H è autoaggiunto con risolvente compatto. Pertanto $\sigma(H) = \sigma_d(H)$.*

Dimostrazione (Cenno)

È sufficiente far vedere che $D(H) \subset S := H^1(\mathbb{R}^n) \cap D(V)$. S è infatti compatto per il teorema di Rellich: basta infatti prendere $F = V$, $G(\xi) = \sqrt{1 + |\xi|^2}$. Ora, dato che sia $T = -\Delta$ e V sono positivi (senza ridurre la generalità abbiamo supposto che V lo sia), per $\psi \in D(H)$ si ha

$$\|\psi\|_{H^1} = \|\psi\|^2 + \langle -D\psi, \psi\rangle \leq \langle \|\psi\|^2 + \langle -D\psi, \psi\rangle + \langle V\psi, \psi\rangle \leq \|H\psi\| \cdot \|\psi\| + \|\psi\|^2$$

e quindi $\psi \in S$ se $\psi \in D(H)$.

Esempio 10.2

Qualsiasi operatore di Schrödinger del tipo $H = T + V$, con un potenziale $V = P_{2m}(x)$, dove $P_{2m} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ è inferiormente limitata, localmente L^2, e tale che $P_{2m}(x) \to +\infty$ per $|x| \to \infty$. In particolare, se P_{2m} è un polinomio in R^n di grado $2m$, si può dimostrare che $D(H) = H^2(\mathbb{R}^n) \cap L^2_{2m}(\mathbb{R}^n)$.

Esercizio

Verificare l'affermazione precedente nel caso particolare di $n = 1$, $V(x) = x^4$.

11 Teoria delle perturbazioni degli autovalori (Rayleigh-Schrödinger)

Lo scopo della teoria delle perturbazioni degli operatori lineari è determinare la variazione dello spettro di un operatore le cui proprietà spettrali siano per ipotesi note quando gli si aggiunga una perturbazione, cioè un operatore che possa essere considerato piccolo in un qualche senso. Detto T l'operatore le cui proprietà spettrali sono note, di solito l'operatore perturbato si può rappresentare sotto la forma $T(\beta) = T + \beta V$, dove β è un parametro reale (detto spesso *costante di accoppiamento*) che in quelche modo misura l'intensità della perturbazione specificata dall'operatore V, di modo che $T(0) = T$, l'operatore *imperturbato*.

Esempio 11.1

1. *L'effetto Zeeman.* L'operatore dell'effetto Zeeman dell'atomo di idrogeno, già analizzato nei paragrafi 9.5 e 9.6:

$$\begin{aligned} T(\beta) &= (-i\nabla - \mathbf{A})^2 + V(r); \quad V(r) = -\frac{Ze^2}{r}; \quad \mathbf{A} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{B} = B(x_2, -x_1, 0) \Longrightarrow \\ T(\beta) &= -\Delta - \frac{Ze^2}{r} + \beta(x_1^2 + x_2^2), r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2) + x_3^2} \end{aligned}$$

   Qui T è l'operatore dell'atomo idrogenoide (Z numero atomico, e carica dell'elettrone), che come vedremo è esattamente solubile; il potenziale magnetico $V = (x_1^2 + x_2^2)$ rappresenta la perturbazione, la cui intensità β è il quadrato dell'intensità del campo magentico $\mathbf{B}$. la costante additiva $\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$ è stata omessa.

2. *L'effetto Stark.* Qui l'atomo idrogenoide viene sottoposto all'azione di un campo elettrico costante $\mathbf{E} = (0, 0, E)$ il cui potenziale è quindi $V = Ex_3$. L'operatore T è sempre l'atomo di idrogeno, e quindi

$$T(\beta) = -\Delta - \frac{Ze^2}{r} + \beta x_3$$

   Qui pertanto l'intensità della perturbazione coincide con l'intensità del campo elettrico perturbante.

3. *L'atomo di elio.* Il sistema fisico consiste in due elettroni che si muovono sotto l'azione di un elettrostatico generato da un nucleo positivo di carica Z nonché dalla loro repulsione. Collocando per semplicità il nucleo nell'origine del sistema di coordinate cartesiane, e dette $r_1 = (x_1, y_1, z_1)$, $r_2 = (x_2, y_2, z_2)$ le posizioni dei due elettroni, r_1, r_2, r_{12} le loro distanze dall'origine e reciproche, il potenziale elettrostatico totale vale

$$V = V_1 + V_2 + e^2 V_{12}, \quad V_1 = -\frac{Ze^2}{r_1}, \quad V_2 = -\frac{Ze^2}{r_2}, \quad V_{12} = \frac{1}{r_{12}}$$

   Lo spazio di Hilbert del sistema è $L^2(\mathbb{R}^6) \sim L^2(\mathbb{R}^3) \otimes L^2(\mathbb{R}^3)$. L'operatore di Schrödinger corrispondente al sistema è

$$\begin{aligned} T &= -\Delta_1 - \Delta_2 + V = -\Delta_1 - \Delta_2 + V_1 + V_2 + e^2 V_{12} \\ &:= T_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes T_2 + e^2 V_{12} \end{aligned}$$

   dove: D_i denota il laplaciano riferito alle coordinate $\mathbf{r}_i\,:\, i = 1, 2$ dei due elettroni; T_1 denota l'operatore di Schrödinger dell'atomo di idrogeno $-\Delta_1 + V_1$

riferito primo elettrone, che agisce su $L^2(\mathbb{R}^3)$, e analogamente per T_2. Ora $T = T_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes T_2$ è esattamente solutbile; pertanto possiamo scrivere l'operatore di Schrödinger dell'atomo di elio sotto la forma

$$T(\beta) = T + \beta V_{12}, \quad \beta = e^2$$

l'intensità β della perturbazione essendo stavolta il quadrato della carica elettrica.

In questo capitolo esamineremo l'effetto di una perturbazione sullo spettro discreto. Il risultato principale è costituito dalla costruzione dello sviluppo degli autovalori e degli autovettori in serei di potenze di β. A tale scopo occorre premettere le necessarie nozioni tecniche.

11.1 Il proiettore come integrale sul risolvente

Teorema 11.1 (Sz.Nagy-Kato)
Sia T chiuso in $\mathcal{X}$, e $\lambda \in \sigma(T)$ isolato*: $\{z \in \mathbb{C} \mid |z - \lambda| < \epsilon\} \cap \sigma(T) = \{\lambda\}$. Allora:*

1. *$\forall\, 0 < r < \epsilon$ l'integrale forte di Riemann*

$$P_\lambda = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma_r} (T - zI)^{-1}\, dz, \quad \Gamma_r := \{z \in \mathbb{C} \mid |z - \lambda| = r\} \tag{11.1}$$

   definisce un operatore in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ che non dipende da r;

2. *$P_\lambda^2 = P_\lambda$; pertanto P_λ è un proiettore (non necessariamente ortogonale); più precisamente*

3. *$\mathcal{G}_\lambda := R(P_\lambda)$ e $\mathcal{F}_\lambda := \ker(P_\lambda)$ sono sottospazi chiusi complementari (non necessariamente ortogonale), cioè $\mathcal{X} = \mathcal{F}_\lambda + \mathcal{G}_\lambda$, $\mathcal{F}_\lambda \cap \mathcal{G}_\lambda = \{0\}$. Inoltre T lascia $\mathcal{F}_\lambda$ e $\mathcal{G}_\lambda$ invarianti: $T\mathcal{F}_\lambda \subset \mathcal{F}_\lambda$, $T\mathcal{G}_\lambda \subset \mathcal{G}_\lambda$; equivalentemente:*

4. *P_λ riduce T, cioè $TP_\lambda \subset P_\lambda T$. Allora $T = T_1 + T_2$, $T_1 = P_\lambda T P_l$, $T_2 = (I - P_\lambda)T(I - P_\lambda)$, e $\sigma(T) = \sigma(T_1) \cup \sigma(T_2)$;*

5. *Se $\mathcal{X}$ è uno spazio di Hilbert, e T è ivi autoaggiunto, allora λ è autovalore di T e P_λ è il proiettore ortogonale sull'autospazio corrrispondente: $P_\lambda = E(\lambda) - E(\lambda - 0)$;*

6. *Nel caso generale λ è autovalore di T se* $\dim\mathcal{G}_\lambda < +\infty$. *In tal caso* $\mathcal{G}_\lambda = \{u \in D(T) \,|\, \exists\, n : (T-\lambda I)^n u = 0\}$ *è il sottospazio geometrico di λ;* $\mu(\lambda) := \dim\mathcal{G}_\lambda$ *si dice* molteplicità geometrica *dell'autovalore λ. Si ha:* $\mu(\lambda) \geq m(\lambda)$*; qui* $m(\lambda) := \dim\{u \in D(T) \,|\, Tu = \lambda u\}$ *è la* molteplicità algebrica *dell'autovalore λ; se $T = T^*$, $\mu(\lambda) = m(\lambda)$;*

7. *Inversamente, se* $\Gamma_r := \{z \in \mathbb{C} \,|\, |z-\lambda| = r\} \subset \rho(T)$ *allora*

$$P = \frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma_r} (T-zI)^{-1}\, dz$$

è una proiezione in $\mathcal{B}(X)$; se $\dim P = m < +\infty$ *allora $\sigma(T)$ ha al più m punto interni a Γ_r e ciascuno di essi è un autovalore isolato di molteplicità finita. La somma delle loro molteplicità geometriche è m. Se $m = 1$ viè un solo autovalore di molteplicità* 1*, detto* semplice *o* non degenere.

Dimostrazione (Cenno)

1. Facciamo vedere anzitutto che $P_\lambda \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$. Infatti $(T-zI)^{-1}$ è olomorfo per $z \in \rho(T)$. Γ_r :eh un insieme compatto e pertanto $\|(T-zI)^{-1}\|$ è limitato uniformemente su Γ_r. Dunque:

$$\|P_\lambda u\| \leq \frac{1}{2\pi}\int_{\Gamma_r} \|(T-zI)^{-1}u\|\,|dz| \leq C_\Gamma \|u\|$$

Sia ora $r < R <: ep$, e sia $\Gamma' := |z'-\lambda| = R$. Allora, applicando la prima identità del risolvente, si ha

$$\begin{aligned}
P_\lambda^2 = (2\pi i)^{-2}\int_\Gamma\int_{\Gamma'} (T-zI)^{-1}(T-z'I)^{-1}\, dz dz' = \\
(2\pi i)^{-2}\int_\Gamma\int_{\Gamma'} (z-z')^{-1}[(T-zI)^{-1} - (T-z'I)^{-1}]\, dz dz' = \\
(2\pi i)^{-2}[\int_{\Gamma'} (T-z'I)^{-1} dz' \int_\Gamma (z-z')^{-1}\, dz - \int_\Gamma (T-zI)^{-1} dz \int_{\Gamma'} (z-z')^{-1}\, dz' \\
= (2\pi i)^{-2}[\int_{\Gamma'} (T-z'I)^{-1} dz' \cdot 0 - 2\pi i \int_\Gamma (T-zI)^{-1} dz] = P_\lambda
\end{aligned}$$

3 e 4: P_λ riduce P per costruzione; $T = (I - P_\lambda + P_\lambda)T(I - P_\lambda + P_\lambda) = T_1 + T_2$ perché $P_\lambda(I-P_\lambda) = 0$; $\sigma(T) = \sigma(T_1) \cup \sigma(T_2)$ perché chiaramente

$$(T-zI)^{-1} = (T_1 - zI)^{-1} + (T_2 - zI)^{-1}$$

L'affermazione 5 segue subito dal teorema spettrale:

$$R(z,T) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dE(t)}{t-z}, \quad P_\lambda = -\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma dz \int_{\mathbb{R}} \frac{dE(t)}{t-z} = E(\lambda) - E(\lambda - 0) = P_\lambda$$

e P_λ ha dimensione finita per ipotesi.
6. Se dim$P_\lambda = m < +\infty$, $\sigma(T_1)$ contiene al più n punti. Nel nostro caso, ce n'è almeno uno se $P_\lambda \neq 0$ e inversamente. Se non ce n'è, $P = 0$ per il teorema di cauchy e inversamente.
L'affermazione 7 risulta provata da quanto precede. Ciò conclude la dimostrazione.

Lemma 11.1 *Siano P e Q due proiettori (non necessariamente ortogonali) in $\mathcal{X}$ tali che $\|P - Q\| < 1$. Allora* dim$R(P) =$ dim$R(Q)$, *cioè i due proiettori sono equivalenti.*
Più in generale, se la famiglia $t \mapsto P(t)$ da $\Omega \subset\subset \mathbb{C}$ connesso a valori nei proiettori in $\mathcal{X}$ è continua allora dim$R(P(t))$ *è costante.*

Dimostrazione
Sia $R := (P - Q)^2 = P + Q - PQ - QP$. Si vede subito che $[R, P] = [R, Q] = 0$.
Poniamo:

$$U' = QP + (1 - Q)(1 - P), \quad V' = PQ + (1 - P)(1 - Q)$$

e si ha tramite calcolo diretto: $V'U' = U'V' = I - R$. Dunque U' e V' non sono l'inverso l'uno dell'altro. Osserviamo però che R commuta con P e Q, e quindi anche con U' e V'. Possiamo allora definire gli operatori U e V nel modo seguente:

$$U = U'(1 - R)^{-1/2} = (1 - R)^{-1/2}U', \quad V = V'(1 - R)^{-1/2} = (1 - R)^{-1/2}V'$$

dove (serie binomiale):

$$(1 - R)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{-1/2}{n} (-R)^n$$

La serie converge in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ perché $\|R\| < 1$. Si ha allora $VU = UV = I$, $U = V^{-1}$, $V = U^{-1}$. Poiché $U'P = QP = QU'$, $PV' = PQ = V'Q$, allora $UP = QU$, $PV = VQ$ dato che R commuta con tutti gli operatori qui coinvolti:

$$UP = U'(1-R)^{-1/2}P = U'P(1-R)^{-1/2} = QU'(1-R)^{-1/2} = Q(1-R)^{-1/2}U' = QU$$

Concludendo: $Q = UPU^{-1}$, $P = U^{-1}QU$. Dunque P e Q sono simili o, equivalentemente, isomorfi: se $v = Pu$, allora $v' = Qu'$ attraverso la biiezione U: $u' = Uu$, $v' = Uv$. In particolare le immagini $P\mathcal{X}$ e $Q\mathcal{X}$ sono isomorfe, e dim$R(P) =$ dim$R(Q)$.
Se $t \mapsto P(t)$ è continua, allora $\|P(t + h) - P(t)\| < 1$ per h sufficientemente piccolo, e ciò conclude la dimostrazione.

11.2 Famiglie olomorfe di operatori

È conveniente introdurre un concetto generale relativo alla dipendenza dal parametro perturbativo β:

Definizione 11.1 (Famiglie omomorfe di operatori*)*
Sia $\Omega \subset \mathbb{C}$ aperto. Una famiglia di operatori $\beta \mapsto T(\beta)$ in $\mathcal{X}$, $\beta \in \Omega$, si dice fagmiglia olomorfa di operatori *(nel senso di Kato) se e solo se*

1. *$T(\beta)$ è chiuso, $\rho(T(\beta)) \neq \emptyset$, $\forall\, \beta \in \Omega$.*
2. *$\forall\, \beta_0 \in \Omega$ fisso, se $\forall\, z_0 \in \rho(T(\beta_0))$ allora $z_0 \in \rho(T(\beta))$ per $|\beta - \beta_0|$ sufficientemente piccolo e la funzione $\beta \mapsto [T(\beta) - z_0]^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ è ivi olomorfa.*

Si ha allora

Teorema 11.2 *Sia $T(\beta)$ uan famiglia olomorfa in $\Omega \subset \mathbb{C}$. Allora l'insieme*

$$\Gamma := \{(\beta, z) : \beta \in \Omega; z \in \rho(T(\beta))\}$$

è aperto e la funzione $(\beta, z) \mapsto [T(\beta) - zI]^{-1}$ è olomorfa in Γ.

Osservazione
L'olomorfia in β del risolvente implica a fortiori la sua continuità nella norma di $\mathcal{B}(\mathcal{X})$.

Le famiglie di operatori che si incontrano in meccancia quantistica hanno per lo più la forma $T(\beta) = T + \beta V$. È dunque necessario disporre di un criterio per esaminare la loro analiticità. Si ha

Teorema 11.3 (Rellich-Kato)
Sia T chiuso, $\rho(T) \neq \emptyset$. Allora se V è T-limitato con $T-$sup b $T(\beta)$ è una famiglia olomorfa di operatori nel cerchio $\Omega := \{\beta : |\beta| < b^{-1}\}$. Se $b = 0$ $\Omega = \mathbb{C}$ e $T(\beta)$ è una famiglia intera.

Dimostrazione
Osserviamo anzitutto che per il teorema sulla stabilità della chiusura $T(\beta)$ è chiuso per $|\beta| < b^{-1}$. Sia ora $z \in \rho(T)$. Allora $[T - zI]^{-1}$ e $T[T - zI]^{-1} = I + z[T - zI]^{-1}$ sono operatori continui. Di conseguenza, $\forall\, u \in \mathcal{X}$:

$$\begin{aligned}\|V[T - zI]^{-1}u\| &\leq b\|T[T - zI]^{-1}u\| + a\|T - zI]^{-1}u\| \Longrightarrow \\ \|V[T - zI]^{-1}\| &\leq [b\|T[T - zI]^{-1}\| + a\|T - zI]^{-1}\|]\end{aligned}$$

Dunque $V[T - zI]^{-1}$ è continuo. Allora per $|\beta|$ sufficientemente piccolo, vale lo sviluppo in serie geometrica in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$:

$$[1 + \beta V[T - zI]^{-1}]^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n[\beta V[T - zI]^{-1}]^n$$

Da ciò segue, per il medesimo ragionamento della dimostrazione del teorema di Rellich-Kato, che vale la rappresentazione

$$[T(\beta) - zI]^{-1} = [T - zI]^{-1}[1 + \beta V[T - zI]^{-1}]^{-1}.$$

Ne segue ancora che se $|\beta|$ è sufficientemente piccolo allora $z \notin \sigma(T(\beta))$ e il risolvente $[T(\beta) - zI]^{-1}$ è olomorfo in β. Scrivendo $T(\beta) = T + \beta V = (T + \beta_0 V) + (\beta - \beta_0)V$ si dimostra allo stesso modo l'analiticità attorno a $\beta_0 \in \Omega$. Se $b = 0$ si vede subito che Ω è ogni compatto in $\mathbb{C}$. Ciò conclude la dimostrazione.

11.3 Perturbazioni regolari e convergenza della serie delle perturbazioni

Teorema 11.4 (Rellich-Kato)
Sia $T(\beta)$ una famiglia olomorfa nel senso di Kato in $\Omega \subset \mathbb{C}$. Sia λ_0 una autovalore isolato di molteplicità geometrica m di $T(\beta_0)$, $\beta_0 \in \Omega$. Allora per $|\beta - \beta_0|$ sufficientemente piccolo λ_0 è stabile*, cioè esistono al più m punti $\lambda_j(\beta)$ di $\sigma(T(\beta))$ vicino a λ_0. Ciascun punto $\lambda_j(\beta)$ è autovalore isolato di $T(\beta)$, e la sommma delle molteplicità di questi autovalori vale m. Per $|\beta - \beta_0|$ sufficientemente piccolo gli autovalori $\lambda_j(\beta)$ sono rami di una funzione analitica di β su una superficie di Riemann di ordine m con punto di diramazione a β_0.*

Osservazione
Se $m = 1$ l'unico autovalore $\lambda(\beta)$ vicino a λ_0 ha molteplicità 1 ed è olomorfo attorno a $\beta = \beta_0$. L'autovettore corrispondente $\psi(\beta)$ è parimenti olomorfo. Se $T(\beta) = T(\beta)^*$ per $\beta \in \mathbb{R}$ $\psi(\beta)$ è sempre normalizzabile.

Dimostrazione
Sia $\Gamma_\epsilon := \{z \in \mathbb{C} \,|\, |z - \lambda_0| = \epsilon\}$. Per ipotesi, poiché λ_0 è isolato ϵ può essere scelto così piccolo che il solo punto di $\sigma(T(\beta_0))$ entro la circonferenza Γ_ϵ è λ_0 medesimo. Poiché Γ_ϵè compatto, e Ω è aperto, esiste $\delta > 0$ tale che $z \in \sigma(T(\beta))$ se $|z - \lambda_0| = \epsilon$

e $|\beta-\beta_0|<\delta$. Ciò segue dal consueto ragionamento basato sulla convergenza della serie geometrica. Sia ora $\Omega(\delta) := \{\beta : |\beta-\beta_0|<\delta\}$. Allora

$$P(\beta) = -\frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon}[T(\beta)-z]^{-1}\,dz$$

esiste ed è olomorfo come operatore in $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ per $\beta\in\Omega(\delta)$. Ora:

$$\|P(\beta)-P(\beta_0)\| \le \frac{1}{2\pi}\int_{\Gamma_\epsilon}\|[T(\beta)-z]^{-1}-[T(\beta_0)-z]^{-1}\|\,d|z| \to 0, \quad \beta\to\beta_0$$

perché $[T(\beta)-z]^{-1}$ è olomorfo a β_0. Allora per il Lemma precedente $\dim P(\beta)=m$ $\forall\,\beta\in\Omega(\delta)$. Quindi $T(\beta)$ ha almeno 1 e al più m autovalori $\lambda_j(\beta)$ di molteplicità geometrica totale m tali che $|\lambda_j(\beta)-\lambda_0|<\epsilon$, $\beta\in\Omega(\delta)$. Quanto all'analiticità,cominciamo con l'esaminare il caso di $m=1$. In questo caso $\psi(\beta):=P(\beta)\psi_0$ è autovettore, e $\lambda(\beta)$ è una funzione olomorfa di β in un intorno di β_0. Si ha infatti

$$\lambda(\beta) = \frac{\langle\psi(\beta),T(\beta)\psi(\beta)\rangle}{\langle\psi(\beta),\psi(\beta)\rangle} = \frac{\langle P(\beta)\psi_0,T(\beta)P(\beta)\psi_0\rangle}{\langle P(\beta)\psi_0,P(\beta)\psi_0\rangle} = \frac{\langle\psi_0,T(\beta)P(\beta)\psi_0\rangle}{\langle\psi_0,P(\beta)\psi_0\rangle}$$

Dunque l'autovalore $\lambda(\beta)$ è il quoziente di due funzioni olomorfe in un intorno di β_0 e pertanto anch'esso olomorfo. Sia ora $m>1$. Poiché $P(\beta)$ riduce $T(\beta)$; gli autovalori $\lambda_j(\beta)$ sono gli autovalori dell'operatore di rango m $P(\beta)T(\beta)P(\beta)=P(\beta)T(\beta)=T(\beta)P(\beta)$. Detta $T_{kl}(\beta)$ la matrice $m\times m$ di $P(\beta)T(\beta)P(\beta)$ su una base ortonormale qualsiasi in $R(P(\beta))$, gli autovalori $\lambda_j(\beta)$ coincidono con le soluzioni dell'equazione algebrica di grado m

$$\det(T_{lk}-\lambda I)=0$$

le soluzioni di quests sono funzioni analitiche su una superficie di Riemann di ordine m con punto di diramazione a β_0. Ciò conclude la dimostrazione.

Vogliamo ora ricavare esplicitamente, nel caso non degenere $m=1$ per semplicità, lo sviluppo in serie di Taylor di $\lambda(\beta)$ attorno a $\beta=\beta_0$. Tale sviluppo in serie si dice *serie delle perturbazioni* di *Rayleigh-Schrödinger* per l'autovalore $\lambda(\beta)$, e in questo caso risulterà convergente. Senza ridurre la generalità potremo assumere $\beta_0=0$, ma per semplificare l'esposizione assumeremo T autoaggiunto. Denotiamo poi $T:=T(0)$.

Teorema 11.5 *Nelle ipotesi del teorema precedente, si ha*

$$\lambda(\beta) = \lambda_0 + \beta\sum_{n=0}^{\infty}A_n\beta^n$$

dove i coefficienti $A_n : n = 0, 1, \dots$ sono i coefficienti del quoziente di Cauchy delle due serie convergenti $\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n$ e $\sum_{n=0}^{\infty} b_n\beta^n$:

$$\beta \sum_{n=0}^{\infty} A_n\beta^n = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} a_n\beta^n}{\sum_{n=0}^{\infty} b_n\beta^n}$$

dove:

$$a_n = \frac{(-1)^{n+1}}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon} \langle \psi_0, [V(T-z)^{-1}]^{n+1}\psi_0\rangle \, dz \tag{11.2}$$

$$b_n = \frac{(-1)^{n+1}}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon} \langle \psi_0, (T-z)^{-1}[V(T-z)^{-1}]^{n}\psi_0\rangle \, dz \tag{11.3}$$

Osservazione

L'integrazione viene eseguita tramite il teorema dei residui. Ad esempio:

$$b_0 = \frac{-1}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon} \langle \psi_0, (T-z)^{-1}\psi_0\rangle \, dz = \frac{-1}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon} \langle \psi_0, (\lambda_0-z)^{-1}\psi_0\rangle \, dz = 1$$

$$a_0 = \frac{-1}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon} \langle \psi_0, V(T-z)^{-1}\psi_0\rangle \, dz = \frac{-1}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon} \langle (\lambda_0-z)^{-1}\psi_0, V\psi_0\rangle \, dz = \langle \psi_0, V\psi_0\rangle$$

Dimostrazione

Si ha:

$$\lambda(\beta) == \frac{\langle \psi_0, T(\beta)P(\beta)\psi_0\rangle}{\langle \psi_0, P(\beta)\psi_0\rangle} = \lambda_0 + \frac{\langle \psi_0, VP(\beta)\psi_0\rangle}{\langle \psi_0, P(\beta)\psi_0\rangle}$$

Consideriamo per cominciare il denominatore. Si ha:

$$\begin{aligned}\langle \psi_0, P(\beta)\psi_0\rangle &= -\frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon} \langle \psi_0, [T_0+\beta V - z]^{-1}\psi_0\rangle = \\ &= -\frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon} \langle \psi_0, \sum_{n=0}^{\infty} \beta^n (T_0-z)^{-1}[V(T_0-z)^{-1}]^n\psi_0\rangle \, dz\end{aligned}$$

L'integrazione termine a termine è lecita per la convergenza uniforme della serie su Γ_ϵ, dovuta alla stima $\beta V[T_0-z]^{-1}\| < 1$ uniformemente su Γ_ϵ per β sufficientemente piccolo provata in precedenza. Allora si ha

$$b_n = \frac{(-1)^{n+1}}{2\pi i}\int_{\Gamma_\epsilon} \langle \psi_0, (T-z)^{-1}[V(T-z)^{-1}]^{n}\psi_0\rangle \, dz$$

e analogamente si ricava la formula per a_n. Ciò conclude la dimostrazione.

Osservazione

Lao sviluppo in serie di β per l'autovalore $\lambda(\beta)$ si dice serie delle perturbazioni di Rayleigh-Schrödinger, e i coefficienti A_n coefficienti di Rayleigh-Schrödinger. Si noti che la serie può esistere termine a termine (senza essere convergente) anche se l'operatore $V[T_0-z]^{-1}$ non è limitato. È sufficiente che tutti i vettori $[V[T_0-z]^{-1}]^n\psi$ esistano per $z \in \Gamma_\epsilon$.

11.4 La serie formale delle perturbazioni nel caso non degenere

Consideriamo ancora la famiglia di operatori $H(\beta) = H_0 + \beta V$ nell'ipotesi che H_0 sia autoaggiunto con spettro discreto *semplice*. Si denotino E_n i suoi autovalori, e ψ_n i corrispondenti autovettori, $n = 0, 1, \ldots$. Vogliamo descrivere il metodo diretto (di Rayleigh-Schrödinger) per la costruzione della serie delle perturbazioni attorno a ogni autovalore E_n, che non fa uso dell'integrazione sul risolvente. Consideriamo per semplicità solo il caso non degenere, cioè la perturbazione dell'autovalore E_0 assunto semplice.

Dobbiamo risolvere l'equazione $H(\beta)\psi(\beta) = E(\beta)\psi(\beta)$. Cerchiamo $E(\beta)$ e $\psi(\beta)$ con il metodo dei coefficienti indeterminati. Poniamo cioè, come serie formali

$$E(\beta) = E_0 + A_1\beta + A_2\beta^2 + \ldots, \quad \psi(\beta) = \psi_0 + \beta\phi_1 + \beta^2\phi_2 + \ldots$$

e cerchiamo di detrminare ricorsivamente i numeri $A_n : n \geq 1$ e i vettori $\phi_n : n \geq 1$. Sostituendo in $H(\beta)\psi(\beta) = E(\beta)\psi(\beta)$ troviamo

$$\begin{aligned} H(\beta)\psi(\beta) = (T + \beta V)(\psi_0 + \beta\phi_1 + \beta^2\phi_2 + \ldots) = \\ = (E_0 + A_1\beta + A_2\beta^2 + \ldots)(\psi_0 + \beta\phi_1 + \beta^2\phi_2 + \ldots) \end{aligned}$$

Imponiamo ora, secondo il principio di identità dei polinomi, l'uguaglianza dei coefficienti di ogni potenza di β in ambo i membri. All'ordine 0 l'uguaglianza è vera per ipotesi. Poi:

Ordine 1: $T\phi_1 + V\psi_0 = E_0\phi_1 + A_1\psi_0$. Facendo il prodotto scalare di ambo i membri con ψ_0 troviamo

$$\langle\psi_0, T\psi_1\rangle + \langle\psi_0, V\psi_0\rangle = E_0\langle\psi_0, \phi_1\rangle + A_1 \Longrightarrow A_1 = \langle\psi_0, V\psi_0\rangle$$

Per trovare ϕ_1, consideriamone la serie di Fourier sugli autovettori ψ_n, per ipotesi completi: $\phi_1 = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^1\psi_n$. Allora, mettendo questa serie nella $T\phi_1 + V\psi_0 = E_0\phi_1 +$

$A_1\psi_0$:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n^1 E_n \psi_n + V\psi_0 = E_0 \sum_{n=0}^{\infty} a_n^1 \psi_n + A_1\psi_0$$

e prendendo ancora il prodotto scalare con ψ_0:

$$a_0^1 E_0 + \langle \psi_0, V\psi_0 \rangle = a_0^1 E_0 + A_1$$

che è un'identità. essa ci autorizza a prendere $a_0^1 = 0$. Facendo ora il prodotto scalare con ψ_m, $m \neq 0$, si trova:

$$a_m^1 E_m + \langle \psi_m, V\psi_0 \rangle = a_m^1 E_0 + A_1 \Longrightarrow a_m^1 = \frac{\langle \psi_m, V\psi_0 \rangle}{E_0 - E_m}$$

Ordine 2: $T\phi_2 + V\phi_1 = E_0\phi_2 + A_1\phi_1 + A_2\phi_0$. Facciamo ancora il prodotto scalare con ψ_0:

$$\begin{aligned} E_0\langle \phi_0, \phi_2 \rangle + \langle \psi_0, V\phi_1 \rangle = E_0\langle \phi_0, \phi_2 \rangle + A_1\langle \psi_0, \phi_1 \rangle + A_2 \Longrightarrow \\ A_2 = \langle \psi_0, V\phi_1 \rangle; \quad V\phi_1 = \sum_{n\neq 0} \frac{\langle \psi_m, V\phi_0 \rangle}{E_0 - E_m} \Longrightarrow \\ A_2 = \sum_{m\neq 0} \frac{\langle \psi_m, V\psi_0 \rangle la\psi_0, V\psi_m \rangle}{E_0 - E_m} = \sum_{m\neq 0} \frac{|\langle \psi_m, V\psi_0 \rangle|^2}{E_0 - E_m} \end{aligned}$$

Per calcolare ϕ_2, poniamo ancora $\phi_2 = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^2 \psi_n$, e facciamo ancora il prodotto scalare con ψ_0. Si trova anzitutto la nuova identità:

$$a_0^2 E_0 + \langle \psi_0, V\phi_1 \rangle = a_0^2 E_0 + A_1\langle \psi_0, \phi_1 \rangle + A_2$$

da cui $a_0^2 = 0$. Inoltre, facendo ancora il prodotto scalare con ψ_n, n$\neq$ 0:

$$\begin{aligned} a_m^2 E_m + \langle \psi_m, V\phi_1 \rangle = a_m^2 E_0 + A_1\langle \psi_m, \phi_1 \rangle \Longrightarrow \\ a_m^2 = \frac{\langle \psi_m, V\phi_1 \rangle}{E_0 - E_m} + \frac{A_1\langle \psi_m, \phi_1 \rangle}{E_0 - E_m} = \\ \sum_{k\neq m} \frac{\langle \psi_m, V\psi_k \rangle \langle \psi_k, V\psi_0 \rangle}{(E_0 - E_m)(E_k - E_m)} + \frac{\langle \psi_0, V\psi_0 \rangle \langle \psi_m, \phi_1 \rangle}{E_0 - E_m} \end{aligned}$$

È ora chiaro che, ricorsivamente, si ottiene all'ordine l:

$$A_l = \langle \psi_0, V\phi_{l-1} \rangle \quad a_n^l = \frac{\langle \psi_m, V\phi_{l-1} \rangle}{E_0 - E_m} + \frac{A_{l-1}\langle \psi_m, \phi_{l-1} \rangle}{E_0 - E_m}$$

12 Teoria della diffusione

Consideriamo ora il caso dell'operatore di Schrödinger in $L^2(\mathbb{R}^n)$ $H = T + V$ con $T = -\Delta$ e $|V| \to 0$ per $|x| \to \infty$. Vogliamo confrontare le evoluzioni unitarie e^{itH} e e^{itT}. Poiché $|V| \to 0$ per $|x| \to \infty$, ci aspettiamo che per $|t|$ grande (asintoticamente, cioè) le due evoluzioni siano praticamente la stessa. Ciò ci porterà a stabilire anche la stabilità dello spettro continuo e assolutamente continuo, secondo la caratterizzazione dello spettro in termini di evoluzione dovuta a Ruelle.

12.1 Localizzazione, delocalizzazione e spettro: il teorema di Ruelle

Lemma 12.1 *Consideriamo l'evoluzione unitaria dell'operatore $-\Delta$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$ (energia di una particella in moto libero in $\mathbb{R}^3$)*

$$e^{-itT}u(x) = \frac{1}{t^{3/2}}\int_{\mathbb{R}^3} e^{-i|x-y|^2/4t}u(y)\,dy,$$

Sia $R > 0$ arbitrario, $u \in D(T) = H^2(\mathbb{R}^3)$ e $(P_R u)(x) := \chi_R(x)u(x)$ la proiezione di u sul sottospazio delle funzioni che hanno supporto entro la sfera $\Omega_R := \{x : |x| < R\}$. Allora si ha

$$\lim_{|t|\to\infty} \|\chi_R\, e^{-itT}u(x)\|_{L^2} = 0, \qquad \forall\, R > 0 \tag{12.1}$$

Osservazione

La (12.1) equivale a

$$\lim_{|t|\to\infty} \|[1-\chi_R]\, e^{-itT}u(x)\|_{L^2} = 1, \qquad \forall\, R > 0 \tag{12.2}$$

Poiché $\int_{\Omega_R} |u(x)|^2\,dx = \|\chi_R u(x)\|^2_{L^2}$ è la probabilità che la particella quantistica si trovi in Ω_R all'istante $t = 0$, l'interpretazione fisica delle stime (12.1,12.2) è che l'evoluzione la farà *quasi certamente* (cioè con probabilità1) uscire da ogni sfera di raggio assegnato, e quindi la spedirà all'infinito, per *qualsiasi* possibile stato quantico iniziale $u(x)$. In questo caso sappiamo che lo spettro di T è puramente assolutamente continuo. Dunque $P_{ac}(T) = \mathcal{X}$ e possiamo dire, equivalentemente, che ogni stato appartenente a $R(P_{ac}(T))$ raggiungerà con certezza l'infinito (ne senso che uscirà quasi sicuramente da ogni sfera). Poiché un vettore $u(x)$ che abbia supporto in Ω_R si dice anche *localizzato*, mentre se il suo supporto contiene l'esterno di ogni sfera Ω_R si dice *delocalizzato*, potremo equivalentemente dire che l'evoluzione quantica della particella libera delocalizza ogni stato iniziale arbitrariamente localizzato nel sottospazio assolutamente continuo quando il tempo tende all'infinito. Ciò corrisponde chiaramente alla situazione classica: tutte le condizioni iniziali diverse da quella di velocità nulla all'istante iniziale raggiungono l'infinito quando il tempo tende all'infinito.

Dimostrazione

Si ha, eseguendo l'uno dopo l'altro i cambiamenti di variabile $y = x + vt$, $y - vt = p$, $y + vt = q$:

$$\begin{aligned}(\chi_R\, e^{-itT} u)(x) &:= u_R(t;x) = \frac{1}{t^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \chi_R(x)\, e^{-i|x-y|^2/4t} u(y)\, dy = \\ &= t^{3/2} \int_{\mathbb{R}^3} \chi_R(y - vt)\ e^{-it|v|^2/4} u(x + vt) \Longrightarrow \\ \|u_R(t;x)\|^2_{L^2} &\leq \frac{1}{t^{3/2}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \chi_R(p) |u(q)|^2\, dp dq \to 0, \quad |t| \to \infty\end{aligned}$$

Il teorema di Ruelle afferma che questo comportamento è del tutto generale, e inoltre che è possibile caratterizzare per questa via la natura di tutti i sottospazi spettrali di un dato operatore di Schrödinger dopo averne dimostrata l'autoaggiunzione.

Teorema 12.1 (Ruelle)

Sia H l'operatore di Schrödinger $T+V$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$ sotto l'ipotesi $V \to 0$ per $|x| \to \infty$. Sia χ_R come sopra. Allora

1. *$u \in P_p(H)$ se e solo se*

$$\sup_{R>0} \lim_{|t|\to\infty} \|\chi_R\, e^{-itT} u(x)\|_{L^2} = 1, \tag{12.3}$$

2. *$u \in P_c(H)$ se e solo se*

$$\lim_{T\to+\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \|\chi_R\, e^{-itT} u(x)\|_{L^2}\, dt = 0, \qquad \forall\, R > 0 \tag{12.4}$$

In particolare

1. *$u \in P_{ac}(H)$ se e solo se*

$$\lim_{|t|\to+\infty} \|\chi_R\, e^{-itT} u(x)\|_{L^2} = 0, \qquad \forall\, R > 0 \tag{12.5}$$

2. $u \in P_{sc}(H)$ *se e solo se eiste una successione* $\tau_n \uparrow \infty$ *per* $n \to \infty$ *tale che*

$$\lim_{|n|\to+\infty} \|\chi_R\, e^{-i\tau_n T} u(x)\|_{L^2} = 0, \qquad \forall\, R > 0 \tag{12.6}$$

ed una successione $\sigma_n \uparrow \infty$ *per* $n \to \infty$ *tale che*

$$\sup_{R>0} \lim_{|n|\to\infty} \|\chi_R\, e^{-i\sigma_n T} u(x)\|_{L^2} = 1, \tag{12.7}$$

Osservazione

La (12.3) esprime la *localizzazione* degli autovettori: l'evoluzione quantica non li porterà mai all'infinito. Per contro, le (12.4-12.7) esprimono in quale senso gli "autovettori" dello spettro continuo sono delocalizzati. La (12.4) afferma che la media temporale della probabilità di presenza in un qualsiasi compatto è nulla.

12.2 Definizioni fondamentali: gli operatori d'onda, la matrice S

Sia ancora $H = T + V$; $V \to 0$ per $|x| \to \infty$. Vogliamo confrontare le evoluzioni unitarie generate da T, che conosciamo esplicitamente (evoluzione libera) e quella generata da H. Poiché V tende a zero all'infinito, ci aspettiamo che per $|t|$ molto grandi le due evoluzioni debbano coincidere. Infatti per t molto grande il punto classico (cioè il punto che si muove sotto l'azione del potenziale classico V) deve trovarsi molto lontano dall'origine. Quindi, almeno per tutti i vettori dello spazio assolutamente continuo (perché sappiamo che gli autovettori sono localizzati) ci aspettiamo che le due evluzioni quantistiche debbano tendere l'una all'altra per $|t| \to \infty$.

In astratto, siano A e B due operatori autoaggiunti in $\mathcal{X}$. Si può allora pensare che l'evoluzione $e^{-iAt}\phi$ sia "asintoticamente simile" all'evoluzione $e^{-iBt}\phi$ per $t \to -\infty$ se $\forall\, \phi$ esiste un vettore ϕ_+ tale che

$$\|e^{-iBt}\phi_+ - e^{-iAt}\phi\| \to 0, \quad t \to -\infty \tag{12.8}$$

oppure, equivalentemente

$$\|e^{iAt}e^{-iBt}\phi_+ - \phi\| \to 0, \quad t \to -\infty \tag{12.9}$$

Definizioni equivalenti con un vettore ϕ_- per $t \to +\infty$.

Si pone dunque la questione del'esistenza del limite forte dell'operatore $e^{iAt}e^{-iBt}$ per $t \to \pm\infty$. Occorre a questo proposito scegliere i vettori $\phi_\pm$ nel sottospazio assolutamente continuo di B. Si consideri infatti il caso particolare $B = -\Delta + V$; se ϕ_+ è autovettore, allora il limite esiste se e solo se $\phi_\pm$ è autovettore di A corrispondente al medesimo autovalore.

Definizione 12.1 (Operatori d'onda e matrice S)
Siano A e B come sopra. Sia P_{ac} la proiezione sul sottospazio assolutamente continuo di B. Si pone:

$$\Omega^\pm(A,B) := s - \lim_{t\to\mp\infty} e^{iAt}e^{-iBt}P_{ac}(B) \tag{12.10}$$

quando il limite esiste. Allora

1. *Gli operatori $\Omega^\pm(A,B)$ (denotati anche $W^\pm(A,B)$ si dicono* operatori d'onda generalizzati. *Se $P_{ac} = I$, si dicono* operatori d'onda.

2. *Se $\Omega^\pm(A,B)$ esistono, si pone $X_+ = R(\Omega^+)$, $X_- = R(\Omega^-)$ e:*

$$S = (\Omega^-)^*\Omega^+ \tag{12.11}$$

L'operatore S (introdotto da Heisenberg nel 1931) si dice operatore di diffusione *(operatore di scattering, in inglese; i fisici lo chiamano matrice S);*

3. *Si dice che gli operatori d'onda sono completi se $R(\Omega^+) = R(\Omega^-) = R(P_{ac}(A))$.*

Osservazione
Se gli operatori d'onda sono completi, allora S è un operatore unitario su $\mathcal{X}_{ac} := R(P_{ac}(A)) = R(P_{ac}(A))$.

Definizione 12.2 (Isometria parziale)

1. *Un operatore $V \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ si dice* isometrico *se conserva le norme: $\|Vu\| = \|u\|$, $\forall\, u \in \mathcal{X}$; se V è una biiezione, allora è unitario;*

2. *Un operatore $V \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ si dice* parzialmente isometrico *se esiste un sotospazio chiuso $M \subset \mathcal{X}$ tale che $\|Vu\| = \|u\|$ se $u \in M$ e $Vu = 0$ se $u \perp M$. M si dice* insieme iniziale*; $VM := M'$* insieme finale. *M' è chiuso.*

Osservazione

C'è una definizione equivalente di isometria parziale. Sia P il proiettore ortogonale da $\mathcal{X}$ in M. Allora $\|Vu\| = \|Pu\|$ e inoltre

$$V^*V = P, \quad VV^*V = VP = V$$

da cui $V = VP$ perché $V(1-P) = 0$ essendo $(1-P)u \in M^\perp$. Concludendo: V^* è parzialmente isometrico con insieme iniziale M' e insieme finale M.

Proposizione 12.1 (Operatori d'onda e stabilità dello spettro continuo)
Nelle notazioni precedenti, supponiamo che gli operatori d'onda $\Omega^\pm(A,B)$ esistano. Allora:

1. $\Omega^\pm(A,B)$ *sono parzialmente isometrici con insieme iniziale* $\mathcal{X}_{ac}(B)$ *e insieme finale* $X_\pm \subset \mathcal{X}_{ac}(A)$*;*

2. $X_\pm$ *sono sottospazi invarianti rispetto ad* A*, ed inoltre vale la proprietà di interlacciamento:*

$$\Omega^\pm[D(B)] \subset D(A); \qquad A\Omega^\pm(A,B) = \Omega^\pm(A,B)B \tag{12.12}$$

3.

$$(\Omega^+)^*\Omega^- = P_{ac}(B), \qquad \Omega^+(\Omega^+)^= E_+ \subset P_{ac}(A) \tag{12.13}$$

dove E^+ *denota il proiettore ortogonale su* $\mathcal{X}^+$*;*

4. $\Omega^+ = \Omega^+ P_{ac}(B) = E_+\Omega^+ \subset P_{ac}(A)$*;*

5. $\Omega^+ = \Omega^+ P_{ac}(B) = E_+\Omega^= P_{ac}(B)\Omega^+$*;* $(\Omega^+)^* = P_{ac}(B)(\Omega^+)^* = (\Omega^+)^* E_+ = (\Omega^+)^* P_{ac}(A)$ *(*E_+ *commuta con* A*);*

6. $A\Omega^+ = AP_{ac}(A)\Omega^+ = \Omega^+ BP_{ac}B\Omega^+ B$*,* $B(\Omega^+)^*(\Omega^+)^*A$*.*
Asserzioni analoghe per Ω^-*.*

Osservazione

In particolare, se esiste ed è completo Ω^+ oppure Ω^-, allora $AP_{ac}(A)\Omega^+ = \Omega^+ BP_{ac}(B)B$ da cui $(\Omega^+)^*AP_{ac}(A)\Omega^+ = BP_{ac}(B)B$. Dunque le parti assolutamente continue di A e B sono equivalenti: $\sigma_{ac}(A) = \sigma_{ac}(B)$. In generale, dato che $X_\pm$ sono sottospazi invarianti rispetto ad A, si trova:

$$\sigma_{ac}(A|X_\pm) = \sigma_{ac}(B) \tag{12.14}$$

12.3 Il metodo di Cook. Applicazione all'operatore di Schrödinger

Il metodo più semplice per dimostrare esistenza e completezza degli operatori d'onda è quello classico di Cook.

Teorema 12.2 (Cook)
Siano A e B autoaggiunti, e supponiamo che esista un insieme $D \subset D(B) \cap P_{ac}(B)\mathcal{X} = D(B) \cap \mathcal{X}_{ac}(B)$ con le proprietà seguenti:

1. *D :eh denso in $P_{ac}(B)\mathcal{X}$;*

2. *$\forall\, u \in D$, esiste $s \in \mathbb{R}$ tale che*

   (a) $e^{-ibt}u \in D(A) \cap D(B)$, $|t| > s$;

   (b)
   $$\int_s^\infty [\|(B-A)e^{-itB}u\| + \|(B-A)e^{itB}u\|]\, dt < +\infty;$$

   (c) $\|(B-A)e^{-itB}u\|$ è continuo in t per $|t| \geq s$.

Allora gli operatori d'onda $\Omega^{\pm}(A,B)$ esistono.

Dimostrazione
Dimostriamo l'esistenza di Ω^+; quella di Ω^- sarà analoga. Sia:

$$W(t)u := e^{iAt}e^{-iBt}u, \qquad u \in D$$

Allora $W(t)$ è fortemente derivabile su (s,∞) perché $e^{-itB}u \in D(A) \cap D(B)$; in effetti
$$\frac{d}{dt}W(t)u = iee^{itA}(A-B)e^{-itB}u$$
e la derivata è: continua per ipotesi. Se ora integriamo

$$W(t_2)u - W(t_1)u = i\int_{t_1}^{t_2} e^{itA}(A-B)e^{-itB}u\, dt$$

da cui
$$\|W(t_2)u - W(t_1)u\| \leq \int_{t_1}^{t_2} \|(A-B)e^{-itB}u\|\, dt \to 0$$
per $t_1, t_2 \to \infty$, per l'ipotesi di integrabilità. Pertanto il limite forte di $W(t)u = e^{iAt}e^{-iBt}u$ per $t \to \infty$ esiste $\forall\, u \in$. D'altra parte D è denso in $\mathcal{X}_{ac}(B)$, e $\|W(t)\|$

uniformemente limitato rispetto a t. Dunque il limite esiste $\forall\, u \in \mathcal{X}_{ac}(B)$ e ciò conclude la dimostrazione.

Applichiamo subito questo teorema al caso che ci interessa, quello degli operatori di Schrödinger.

Teorema 12.3 (Ikebe)
Sia $B = T = -\Delta$, $D(T) = H^2(\mathbb{R}^3)$; sia $A = T + V = H$, dove V è l'operatore massimale di moltiplicazione per la funzione misurabile $V(x) : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$. Se esiste $\epsilon > 0$ tale che:

$$\int_{\mathbb{R}^3} (1 + |x|)^{1+\epsilon} |V(x)|^2 \, dx < +\infty \tag{12.15}$$

allora gli operatori d'onda $\Omega^{\pm}$ esistono. In particolare, $(H|X_{\pm})$ è unitariamente equivalente a T e pertanto $[0, +\infty[\subset \sigma_{ac}(H)$.

Osservazione
In questo caso sappiamo, dato che $V \to 0$ per $|x| \to \infty$, che $\sigma_{ess}(H) = [0, +\infty[$; d'altra parte $\sigma_{ac}(H) \subset \sigma_{ess}(H)$. Dunque possiamo concludere che $\sigma_{ac}(H) = \sigma_{ac}(T) = [0, +\infty[$. Pertanto lo spettro singolare continuo è vuoto, e lo spettro discreto può trovarsi solo nell'asse reale negativo.

Dimostrazione
Facciamo per cominciare l'ipotesi $V \in L^2$. Ciò implica che V è $T-$compatto; dunque $H = H^*$, $\sigma_{ess}(H) = \sigma_{ess}(T) = [0, +\infty[$. Sia $u(x) := e^{-|x-a|^2/2}$, $a \in \mathbb{R}^3$. Allora si ha:

$$u(x;t) := e^{-itB} u(x) = (1 + 2it)^{-3/2} e^{-|x-a|^2/(2+2it)}$$

Per dimostrare questa formula usiamo la trasformazione di Fourier. Si ha, facendo il cambiamento di variabile $x = y + a$:

$$\mathcal{F}u(\xi) = \int_{\mathbb{R}^3} e^{-|x-a|^2/2} e^{-i\langle x,\xi\rangle} \, dx = e^{-i\langle a,\xi\rangle} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-|y|^2/2} e^{-i\langle y,\xi\rangle} \, d\xi = e^{-|\xi|^2/2} e^{-i\langle a,\xi\rangle}$$
$$\Longrightarrow \mathcal{F}(e^{-itB}u)(\xi) = e^{-it|\xi|^2} e^{-|\xi|^2} e^{-i\langle a,\xi\rangle}$$

da cui la formula per $u(x,t)$ calcolando la trasformata di Fourier inversa. Vale quindi la stima

$$\|u(x,t)\|_{L^\infty} \leq \frac{1}{(1 + 4t^2)^{3/4}}$$

Pertanto:

$$\|(A - B)e^{-itB} u\|_{L^2} = \|V e^{-itT}\|_{L^2} \leq \frac{1}{(1 + 4t^2)^{3/4}} \|V\|_{L^2}$$

e l'ultima funzione di t è integrabile su $\mathbb{R}$. Si dimostra ora che l'insieme delle funzioni $\{u_a(x) : u_a(x) = e^{-|x-a|^2/2}; -\infty < a <= \infty\}$ è denso in L^2. Ciò equvale a dimostrare che l'insieme $\{e^{-|\xi|^2+i\langle\xi,a\rangle}\}$ è denso, e poiché $L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R}) \otimes L^2(\mathbb{R})$, che l'insieme $\{\hat{u}_a(\xi) = e^{-\xi^2+i\xi a}\}$ è denso in $L^2(\mathbb{R})$. Supponiamo che esista $v(\xi) \in L^2$, $v(\xi) \perp \{\hat{u}_a(\xi) \,\forall\, a \in \mathbb{R}$. Allora $\hat{u}(\xi) := e^{-\xi^2} v(\xi) \in L^1$ ha trasformata di Fourier nulla perché $\int_{\Re}^{-\xi^2} v(\xi) e^{ia\xi}\, d\xi = 0$. Dunque $\hat{u}(\xi) = 0$ e quindi $v(\xi) = 0$. Dunque gli operatori d'onda esistono se $V \in L^2$.

Per ottenere il risultato dell'enunciato, osserviamo che:

$$v(x,t) := (A-B)e^{-itB}u = Ve^{-itT}u =$$
$$(1+2it)^{-1-\epsilon/2} \frac{V(x)}{|x-a|^{(1-\epsilon)/2}} \cdot \frac{|x-a|^{(1-\epsilon)/2}}{(1+2it)^{(1-\epsilon)/2}} e^{-|x-a|^2/2(1+2it)}$$

Il prodotto dei due ultimi fattori è limitato in x inidpendentemente da t. Infatti

$$\left| \frac{|x-a|^{(1-\epsilon)/2}}{(1+2it)^{(1-\epsilon)/2}} e^{-|x-a|^2/2(1+2it)} \right| = \frac{|x-a|^{(1-\epsilon)/2}}{(1+4t^2)^{(1-\epsilon)/4}} e^{-|x-a|^2/2(1+4t^2)} = y^{1-\epsilon} e^{-y^4/2},$$
$$y := \frac{|x-a|^{1/2}}{(1+4t^2)^{1/4}}$$

e la funzione $y \mapsto y^{1-\epsilon} e^{-y^4/2}$ è limitata su $0 \le y \le +\infty$ se $0 \le \epsilon \le 1$. Inoltre:

$$\frac{|V(x)|}{|x-a|^{(1-\epsilon)/2}} \le \frac{|V(x)|}{1+|x|^{(1-\epsilon)/2}}, \quad |x-a| \ge 1$$

Pertanto

$$\int_{|x-a|\ge 1} \frac{|V(x)|}{|x-a|^2}\, dx \le \int_{|x-a|\ge 1} \frac{|V(x)|}{|x-a|^{1-\epsilon}}\, dx < +\infty$$

per ipotesi. Ne segue:

$$\int_{|x-a|\ge 1} |v(x,t)|^2\, dx \le K(1+4t^2)^{-1-\epsilon}$$

D'altra parte, come sopra:

$$\int_{|x-a|\le 1} |v(x,t)|^2\, dx \le (1+4t^2)^{-3/2} \int_{|x-a|\le 1} |V(x)|^2$$

Conludendo:

$$\|v(x,t)\|_{L^2} \le (1+4t^2)^{-1-\epsilon/4}$$

Quest'ultima funzione di t è integrabile su $\mathbb{R}_+$ e ciò conclude la dimostrazione.

Parte II

Costruzione della forma normale quantistica

13 Un breve riassunto della teoria degli operatori pseudodifferenziali semiclassici

Questo capitolo è essenzialmente una selezione, per lo più senza dimostrazioni, dei risultati più importanti sulla teoria degli operatori pseudodifferenziali che saranno strettamente necessari in seguito. Per maggiori dettagli si rinvia il lettore alla letteratura originale [BS, Ro, Mar, Fo]. I lettori a conoscenza dell'argomento possono saltare completamente questo capitolo.

13.1 Digressione tecnica: nucleo distribuzionale, integrali oscillanti

Siano $\mathcal{F}_\hbar$, $\mathcal{F}_\hbar^{-1}$ le trasformate di Fourier diretta e inversa in $\mathbb{R}^n$, rispettivamente:

$$(\mathcal{F}_\hbar u)\xi) := \hat{u}(\xi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-i\langle x,\xi\rangle/\hbar} u(x)\, dx, \quad u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \tag{13.1}$$

$$(\mathcal{F}_\hbar^{-1} v)(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle x,\xi\rangle/\hbar} \hat{v}(\xi)\, d\xi, \quad v \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \tag{13.2}$$

È ben noto che $\mathcal{F}_\hbar$ è un'isometria da $\mathcal{S}$ in sè, cosicché essa ammette estensione ad un operatore unitario in L^2. Scrivendo $\mathcal{F}_\hbar^{-1}\mathcal{F}_\hbar u(x) = u(x)$ per $u \in \mathcal{S}$, tramite l'espressione integrale (13.1,13.2) si trova

$$u(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \left(\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} u(y)\, dy \right) d\xi,$$

Ciò conduce formalmente alla ben nota rappresentazione

$$\delta(x-y) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} u(y) \tag{13.3}$$

Allo stesso modo

$$\delta^{(s)}(x-y) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} (i\xi)^s e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} u(y)$$

Questi sono gli esempi più semplici di integrali divergenti ai quali la tecnica dell'integrale oscillante assegna un significato ben definito. A sua volta, l'integrale oscillatorio è un aspetto particolare della teoria delle distribuzioni, e infatti (13.3) è anche l'esempio più semplice di *nucleo distribuzionale* di un operatore, secondo il famoso teorema che afferma che ogni operatore lineare è un operatore integrale sempreché si generalizzi la classe dei nuclei integrali alle distribuzioni:

Teorema 13.1 *(Il teorema nucleare di Schwartz) Se $A : C_0^\infty(\mathbb{R}^n) \to \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$ è lineare e continuo, allora esiste una unica distribuzione $K \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ tale che, $\forall\, u, v \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, si ha:*

$$\langle Au, v\rangle_{\mathcal{D}',\mathcal{D}} = \langle K, v \otimes u\rangle_{\mathcal{D}',\mathcal{D}}$$

Dimostrazione Si veda [Hö].

Si consideri pertanto la generalizzazione naturale di (13.3), cioè l'integrale

$$I(a) := \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} a(x,y,\xi)\, d\xi \tag{13.4}$$

(in seguito richiameremo l'ulteriore generalizzazione $I(S,a) := \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle S(x,y;\xi)/\hbar} a(x,y,\xi)\, d\xi$). Qui si assume che $a(x,y,\xi)$ e tutte le sue derivate parziali di ogni ordine non crescano più rapidamente di $|\xi|^m$ quando $|x|+|y|+|\xi| \to \infty$. Se $m < -n$ l'integrale è assolutamente convergente. Vogliamo definirlo (come nucleo distribuzionale) per $m \geq -n$. Per $u \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, $m < -n$ si definisca:

$$A_a u(x) = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} a(x,y,\xi) u(y)\, dy\, d\xi \tag{13.5}$$

La formula seguente si verifica immediatamente:

$$(1 - \hbar\langle \xi, \nabla_y\rangle) e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} = (1+\xi^2) e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar}$$

Pertanto, se definiamo l'operatore $L(\xi, \hbar\nabla_y)$ nel modo seguente:

$$L = \frac{1}{1+\xi^2}(1 - \hbar\langle \xi, \nabla_y\rangle) := L(\xi, \hbar\nabla_y) \tag{13.6}$$

abbiamo subito

$$L(e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar}) = e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} \Longrightarrow L^k(e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar}) = e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar}, k = 2, 3, \ldots \tag{13.7}$$

Inseriamo nella(13.5) ed eseguiamo k integrazioni per parti rispetto a y. Si trova:

$$A_a u(x) = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} (L^t(\xi, \hbar\nabla_y))^k (a(x,y,\xi)u(y))\, dy\, d\xi := I_k u(x) \tag{13.8}$$

Ora

$$(L^t(\xi, \hbar\nabla_y))^k (a(x,y,\xi)u(y)) := \left(\frac{1 + \hbar\langle \xi, \nabla_y\rangle}{1+\xi^2}\right)^k (au) = O(|\xi|^{m-k})$$

uniformemente per $|\xi| \to \infty$. Dunque $I_k u(x)$ converge assolutamente per $m - k < -n$, cioè $m < k - n$. Abbiamo guadagnato k potenze. Si noti inoltre che $I_{k+l} = I_k$ $\forall\, l > 0$. Dunque è naturale porre la seguente:

Definizione 13.1 *Sia a come sopra, e sia $u \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Per tutti gli $m \in \mathbb{R}$ si definisca*

$$A_a u(x) = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar}(L^t(\xi, \hbar\nabla_y))^k (a(x,y,\xi)u(y))\, dy\, d\xi \tag{13.9}$$

Qui k è ogni intero non-negativo tale che $k > m+n$.

Osservazioni

1. Si può dimostrare che A_a definisce un operatore continuo da $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ a $C^\infty(\mathbb{R}^n)$. Tenendo conto del teorema nucleare di Schwartz, l'integrale

$$I(a) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\langle (x-y,\xi\rangle/\hbar} a(x,y,\xi)\, d\xi := K_A(x,y) \tag{13.10}$$

appartiene a $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ ed è pertanto detto *nucleo distribuzionale* di A_a.

2. (13.10) rappresenta K_A come trasformata di Fourier (inversa) $\xi \to (x-y)$ della funzione $a(x,y;\xi)$. Usando luna formula di inversione troviamo immediatamente l'espressione del simbolo a in termini del nucleo integrale K_F:

$$a(x,y,\xi) = \int_{\mathbb{R}^n} K_F(x,y;u)e^{-i\langle \xi,u\rangle}\, du \tag{13.11}$$

13.2 Operatori pseudodifferenziali

In tutta generalità, l'operatore G definito dalluna formula di quantizzazione di Weyl di (10.2) è un operatore pseudodifferenziale. Un operatore pseudodifferenziale A in $L^(\mathbb{R}^n)$ è formalmente definito dall'azione seguente:

$$(Au)(x) = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} a(x,\xi,y)e^{i\langle (x-y),\xi\rangle}u(y)\, dy d\xi, \quad u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \tag{13.12}$$

Qui a, il *simbolo* di A, è una funzione in $C^\infty(\mathbb{R}^{3n})$ con crescita al più polinomiale. La tecnica dell'integrale oscillatorio dà un senso preciso all'integrale oscillatorio (13.12), e quindi alla teoria degli operatori pseudodifferenziali, rendendo possibile la realizzazione di operatori come A su domini densi specificati in L^2.

Osservazioni.

Gli operatori pseudodifferenziali spesso forniscono un'espressione esplicita per una vasta classe di operatori a priori definiti solo in modo astratto; per esempio, dal teorema spettrale. Se $g(\xi)$ è infatti una funzione regolare a valori complessi definita su $\mathbb{R}^n$, allora l'operatore $G(-i\hbar\nabla)$ definito dal teorema spettrale ha l'espressione:

$$(Gu)(x) = \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} g(\xi)e^{i\langle(x-y),\xi\rangle}u(y)\,dyd\xi = \\ \int_{\mathbb{R}^n} g(\xi)e^{i\langle\xi,x\rangle}\hat{u}(\xi)\,d\xi, \quad u\in D(G)$$

con $D(G) := \{u \in L^2(\mathbb{R}^n) : g(\xi)\hat{u}(\xi) \in L^2\}$. Casi particolari sono per esempio $g(\xi) := \sqrt{1+\|\xi\|^2}$, che realizza l'operatore $\sqrt{1-\hbar^2\Delta}$, e $g(\xi) := 1/(z-\|\xi\|^2)$, che realizza il risolvente $(z-\Delta)^{-1}$. In questo esempio infatti è una facile verifica diretta il fatto che

$$(1-\hbar^2\Delta)\circ Gu = G\circ(1-1-\hbar^2\Delta)u, \quad u\in C_0^\infty(\mathbb{R}^n).$$

Esistono diverse nozioni di calcolo operatoriale pseudodifferenziale; quella naturale in questo contesto è il calcolo pseudodifferenziale semiclassico di Shubin-Voros-Helffer-Robert (si veda ad esempio[Vo, He, Ro, Sh]; si veda anche [GLS]), richiamata brevemente qui di seguito, in cui gli sviluppi dei simboli in potenze di $\hbar$ ha il medesimo ruolo dello sviluppo in potenze decrescenti di omogeneità nella formulazione originale di Kohn e Nirenberg[KN].

Supponiamo che $a(x,y,\xi)\in C^\infty(\mathbb{R}^{3n})$ abbia crescita polinomiale assieme a tutte le sue derivate, cioè

$$|\partial^\alpha_{x,y,\xi}a(x,y,\xi)| \le C\lambda(x,y,\xi)^m, \quad C>0, \quad 0<m<+\infty, |\alpha|=0,1,\dots \tag{13.13}$$

$$\lambda(x,y,\xi) = (1+|x|^2+|y|^2+|\xi|^2)^{1/2} \tag{13.14}$$

Allora a si dice un simbolo temperato di peso λ e d'ordine m. λ si dice anche *funzione ordinante*. La potenza m è l'*ordine* dell'operatore pseudodifferenziale. Quando il simbolo è un polinomio in ξ l'operatore è differenziale e questa definizione d'ordine coincide con la consueta. La scelta di una funzione ordinante λ non è per nulla unica. La forma scelta qui per λ è la più conveniente per trattare con operatori di Schrödinger a crescita polinomiale all'infinito.

Poniamo ora:

$$Op_\hbar(a)u = (2\pi\hbar)^{-n}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} a(x,y,\xi)e^{i\langle(x-y),\xi\rangle/\hbar}u(y)\,dyd\xi \quad u\in\mathcal{S} \tag{13.15}$$

e si richiami la seguente

Definizione 13.2 *Sia $N \in \mathbb{N}$, e $a_j, j = 0, 1, \dots$ una successione di simboli temperati di peso λ. Allora ogni applicazione $A(\hbar) : \mathcal{S} \to L^2$ tale che esiste una successione di operatori limitati $R_N(\hbar)$ in L^2, $N \geq N_0$ con la proprietà*

$$A(\hbar) = \sum_{j=0}^{N} Op_h(a_j)\hbar^j + \hbar^{N+1} R_N(\hbar) \tag{13.16}$$

si dice operatore pseudodifferenziale semiclassico di peso λ. $a \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j a_j$ si dice simbolo formale di $A(\hbar)$, e a_0 simbolo principale.

Osservazioni

1. Simboli di questo tipo si dicono *simboli classici* , e gli operatore corrispondenti operatori pseudodifferenziali semiclassici *classici*. Per definizione questi operatori sono d'ordine m: questa definizione si riduce alla consueta per gli operatori differenziali se $a = \xi^m$ come si è già visto. In questo In questo caso m è l'ordine dell'operatore differenziale , da cui la nozione d'ordine per il caso pseudodifferenziale. Denotiamo questa classe di operatori S^m_λ, o semplicemente S_λ quando l'ordine non importa; ovviamente la forma della funzione ordinante non è ristretta alla particolare scelta (13.14).

2. Una definizione leggermente più generale di operatore pseudodifferenzialsemiclassico, e talvolta più conveniente, è rinunciare alla richiesta che il simbolo dipendente da $\hbar-$ abbia uno sviluppo asintotico in $\hbar$.

$$A(\hbar) := Op_h(a)u = (2\pi\hbar)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} a(x, y, \xi; \hbar) e^{i\langle (x-y), \xi \rangle / \hbar} u(y)\, dy d\xi \quad u \in \mathcal{S}$$

3. In ogni caso, il nucleo $K_A(x, y)$ definito dall'integrale $I(a)$, formula (13.10), è il nucleo distribuzionale dell'operatore pseudodifferenziale di simbolo a.

Si noti anzitutto che lo stesso operatore pseudodifferenziale può essere generato da differenti corrispondenze e differenti simboli. Inversamente, lo stesso simbolo può generare differenti operatori rispetto a differenti quantizzazioni, o corrispondenze. Corrispondenze diverse da quella di Weyl sono:

$$(Gu)(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} g^L(\xi, x) e^{i\langle \xi, (x-y) \rangle / \hbar} u(y)\, dy d\xi = \int_{\mathbb{R}^n} g(\xi, x) e^{i\langle \xi, x \rangle} \hat{u}(\xi) d\xi, \quad u \in \mathcal{S} \tag{13.17}$$

(quantizzazione a sinistra, o di Kohn-Nirenberg[KN]);

$$(Gu)(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} g^R(\xi,y) e^{i\langle \xi,(x-y)\rangle \hbar} u(y)\, dyd\xi \tag{13.18}$$

(quantizzazione a destra). Un teorema di unicità vale solo for il t-simbolo, e cioè

Teorema 13.2 *Sia a un simbolo temperato di peso λ, e sia $A(\hbar)$ l'operatore pseudodifferenziale definito come*

$$(A_\hbar u)(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} a(x,y,\xi) e^{i\langle \xi,(x-y)\rangle/\hbar} u(y)\, dyd\xi, \quad u \in \mathcal{S} \tag{13.19}$$

Allora:

(i) $A(\hbar)$ ammette un unico t simbolo λ temperato $b_t(x,\xi,\hbar)$, cioè $\forall 0 \le t \le 1$ $A(\hbar)$ si può scrivere sotto la forma

$$(A(\hbar)u)(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} b((1-t)x+ty,\xi;\hbar) e^{i\langle \xi,(x-y)\rangle/\hbar} u(y)\, dyd\xi, \quad u \in \mathcal{S} \tag{13.20}$$

con nucleo distribuzionale

$$K^t_A(x,y;\hbar) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n} b((1-t)x+ty,\xi;\hbar) e^{i\langle \xi,(x-y)\rangle/\hbar}\, d\xi \tag{13.21}$$

(ii) $b_t(x,\xi,\hbar)$ è dato dal seguente integrale oscillatorio:

$$b_t(x,\xi,\hbar) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} e^{i\langle u,\theta\rangle/\hbar} a(x+tu, x-(1-t)u, \theta+\xi)\, d\theta du \tag{13.22}$$

e ammette lo sviluppo seguente:

$$\begin{cases} b_t = a_0 + \hbar a_1 + \ldots + \hbar^N a_N \\ \\ a_j := \frac{(-1)^j}{j!} (D_u \cdot D_\xi)^j a(x+tu, x-(1-t)u, \xi)\Big|_{u=0} \end{cases} \tag{13.23}$$

In particolare

$$\begin{cases} a_0(x,\xi) = a(x,x,\xi) \\ \\ a_1(x,\xi) = (1-t)\partial_y D_\xi a_(x,x\xi) - t\partial_x D_\xi a_(x,x\xi) \end{cases} \tag{13.24}$$

(iii) Siano $0 \le t_1 \le 1$, $A(\hbar)u = Op_h(b_{t_1})u$. Allora $\forall\, 0 \le t_2 \le 1$ $A(\hbar)$ ammette un t_2 simbolo semiclassico:

$$\begin{cases} b_{t_2}(\hbar) = b_{t_2,0} + \hbar b_{t_2,1} + \ldots + \hbar^j b_{t_2,j} + \ldots \\ \\ b_{t_2,j}(x,\xi) = \frac{(t_1-t_2)^j}{j!} (\partial_x \cdot D_\xi)^j b_{t_1}(x,\xi) \end{cases} \tag{13.25}$$

Osservazioni.

1. La quantizzazione a sinistra, la quantizzazione a destra e la quantizzazione di Weyli si ritrovano facendo $t = 0$, $t = 1$ e $t = 1/2$ in (13.20), rispettivamente, cioè $a^L = b_0(x, \xi)$, $a^R = b_1(y, \xi)$, $a^W = b_{1/2}(x, \xi)$.

2. Come nella (13.11) si può invertire la trasformata di Fourier rispetto a ξ in (13.20) ed esprimere il t simbolo come funzione del nucleo distribuzionale (13.21). Si ha:

$$b_t(x, \xi; \hbar) = \int_{\mathbb{R}^n} K_A^t(x + (1-t)v, u - tv)e^{-i\langle v,\xi\rangle/\hbar}\, dv \tag{13.26}$$

3. Per la (13.23) il simbolo principale non dipende dalla quantizzazione. In altre parole, (10.2,13.17,13.18) sono equivalenti a meno di termini di ordine $\hbar$, cioè i simboli principali (si veda in seguito) sono gli stessi per ogni prescrizione di quantizzazione. Allo stesso modo, simboli che si possono esprimere come combinazioni lineari di simboli dipendenti da un solo insieme di variabili canoniche (cioè dipendenti solo da x o solo da ξ) generano gli stessi operatori rispetto a ogni prescrizione di quantizzazione.

4. Sia P l'operatore di Schrödinger consueto $= -\hbar^2\Delta + V(x)$. Allora il suo unico simbolo è ovviamente $p(x, \xi) = |\xi|^2 + V(x)$.

14 Teoria delle perturbazioni uniforme: costruzione formale

Nella parte rimanente di queste lezioni tratterò la teoria canonica delle perturbazioni uniforme in $\hbar$ e la sua applicazione allo stabilire una formula di quantizzazionee per gli autovalori di una classe di operatori di Schrödinger. Il metodo seguito è essenzialmente un adattamento del procedimento dello sviluppo di Lie introdotto in origine da Hori e DePrit (si veda la rassegna[Ca]), e perfezionato by Benettin, Galgani, Giorgilli e Strelczyn[BGGS],[Gi]. La presentazione costituisce una versione più estesa del lavoro originale [BGP].

14.1 Posizione del problema

In questo paragrafo si espone la costruzione formale della teoria delle perturbazioni. La teoria delle perturbazioni ha sempre a che fare con sistemi che consistono di una parte "libera" più una perturbazione. In meccanica analitica la parte "libera" è un sistema Hamiltoniano canonicamente integrabile. Un sistema Hamiltonian $\mathcal{H}(x,\xi)$ è canonicamente integrabile se esiste una trasformazione canonica $\mathcal{C}(x,\xi)$ fra le variabili canoniche $(x,\xi)\in\mathbb{R}^{2n}$ e le variabili azione-angolo $(A,\phi)\in R^n_+\times\mathbb{T}^n$ tale che $\mathcal{H}(C^{-1}(A,\phi)$ dipende solo dalle azioni A. Si denoti $\mathcal{K}(A)$ la Hamiltonian trasformata, e $\omega(A):=\nabla_A\mathcal{K}(A)$. Allora le equazioni di Hamilton nelle coordinate canoniche (A,ϕ) diventano:

$$\dot{A}=0,\qquad \dot{\phi}=\omega(A)$$

che comportano l'integrazione immediata $A=\text{const.},\phi=\omega(A)t+\phi_0$ (rotazione del toro di frequenze $\omega(A)$). Le azioni A_i sono ovviamente un insieme completo di integrali primi in involuzione: $\{A_i,A_j\}=\delta_{i,j}$.

Uno degli esempi più semplici di sistema integrabile è quello che considereremo per lo più, e cioè l'oscillatore armonico in n gradi di libertà. La sua hamiltoniana ha la ben nota espressione

$$p_0(x,:xi):=\frac{1}{2}(\|\xi\|^2+\|\omega x\|^2),\quad \|\omega x\|^2:=\omega_1^2x_1^2+\ldots+\omega_n^2x_n^2 \tag{14.1}$$

Si introducano le variabili azione-angolo $A_i>0,\ 0<\phi_i\le 2\pi$ tramite la seguente trasformazione:

$$\mathcal{C}:=\begin{cases} A_i=(\xi_i^2+\omega_i^2x_i^2)/2\omega_i \\ \\ \phi_i=-\arctan\xi_i/\omega_ix_i\end{cases}\qquad \mathcal{C}^{-1}:=\begin{cases}\xi_i=\sqrt{2\omega_iA_i}\cos\phi_i \\ \\ x_i=-\sqrt{2A_i/\omega_i}\sin\phi_i\end{cases} \tag{14.2}$$

$\mathcal{C}$ è biunivoca fra $\mathbb{R}^{2n}\setminus(0,0)$ e $\mathbb{R}^n_+\times\mathbb{T}^n$, ed è canonica perché si verifica facilmente che $\{A_i,\phi_j\}=\{\xi_i,x_j\}=\delta_{i,j}$. Inoltre

$$(p\circ\mathcal{C}^{-1})(A,\phi)=\langle\omega,A\rangle,\quad (f\circ\mathcal{C}^{-1})(A,\phi)=f(A,\phi) \tag{14.3}$$

(si noti l'abuso di notazione). Questa trasformazione canonica si può trovare determinando la sua funzione generatrice $S(A,q)$, cioè ponendo

$$\xi=\nabla_xS(A,x),\qquad \phi=\nabla_AS(A,x)$$

ed eseguendo le inversioni. A sua volta, $S(A,q)$ si trova risolvendo l'equazione di Hamilton-Jacobi

$$(\nabla_x S(A,x))^2 + \omega^2 x^2 = E$$

dove si deve determinare anche E come funzione di A. L'equazione di Hamilton-Jacobi si risolve per separazione delle variabili, cercando la soluzione sotto la forma $S(A,x) = S_1(A_1,x_1) + \ldots + S_n(A_n,x_n)$, $E = f_1(A_1) + \ldots + f_n(A_n)$.

L'oggetto della teoria canonica delle perturbazioni è rappresentato dalle hamiltoniane quasi-integrabili, che hanno la forma $s(A,\phi,\epsilon) = p_0(A) + \epsilon f(A,\phi;\epsilon)$; ϵ è di solito un parametro numerico che misura l' "intensità" della perturbazione non integrabile f. Sotto ipotesi opportune su p_0 e f la teoria canonica delle perturbazioni genera la forma normale di $s(A,\phi,\epsilon)$; cioè per ogni $N \in \mathbb{N}$ esiste una trasformazione canonica $\mathcal{T}_{\epsilon,N}$ che trasforma biunivocamente le variabili canoniche (A,ϕ) in un nuovo insieme di variabili canoniche (A_1,ϕ_1) in modo tale che

$$(p_0 + \epsilon f) \circ \mathcal{T}_{\epsilon,N}^{-1}(A_1,\phi_1) = \sum_{k=0}^{N} \zeta_k(A_1)\epsilon^k + \epsilon^{N+1}\mathcal{R}_{N+1}(A_1,\phi_1;\epsilon), \quad \zeta_0(A_1) = p_0(A_1) \tag{14.4}$$

Equivalentemente, l'esistenza della forma normale a meno di termini di ordine N significa che esiste una trasformazione canonica che rende il sistema integrabile a meno di un errore d'ordine ϵ^{N+1}. Se l'esistenza vale per ogni N il sistema perturbato è integrabile ogniqualvolta lo sviluppo in forma normale converge. Un famoso teorema di Poincaré[Pp] tuttavia afferma che genericamente questo non è il caso. Anche la teoria KAM tratta i sistemi quasi-integrabili , ma con un algoritmo diverso. Sotto certe condizioni questo ultimo algoritmo converge, mai tuttavia in insiemi aperti nello spazio delle azioni[15]. Il metodo del troncamento ottimale della forma normale introdotto da Nekhoroshev[Ne] rende possibile dimostrare stime di stabilità per i moti quasi periodici non perturbati per intervalli di tempo d'ordine e^{1/ϵ^a} dove l'esponente $0 < a < 1$ è collegato alla velocità di divergenza della forma normale. Applicheremo questo metodo per stimare il resto delluna formula di quantizzazione.

In meccanica quantistica la parte "libera" è, corrispondentemente, un operatore diagonale (cioè i suoi autovalori e autovettori sono esplicitamente noti), e il punto

[15]Esistono varie dimostrazioni delle varie formulazioni della teoria KAM dopo quelle originali di Kolmogorov, Arnold e Moser. Per una riformulazione più recente del metodo originale Kolmogorov , si veda ad esempio[BGGS]; per una riformulazione di quello di Arnold, si veda [Ga]

di partenza della teoria delle perturbazioni è un operatore (tipicamente l'operatore di Schrödinger che quantizza l'Hamiltoniana classica) che si può scrivere sotto la forma $S(\epsilon) = P_0 + \epsilon F$. Si può sempre assumere, senza reale perdita di generalità, $F = Op^W(f)$, e $P_0 = Op^W(p_0)$. Sotto ipotesi analoghe su P_0 e F la teoria delle perturbazioni quantistica (più precisamente, la teoria delle perturbazioni di Rayleigh-Schrödinger per gli autovalori degli operatori lineari) genera, per ogni $N \in \mathbb{N}$, una trasformazione unitaria $T_{\epsilon,N}$ in L^2 tale che

$$T_{\epsilon,N}(P_0 + \epsilon F)T_{\epsilon,N}^{-1} = \sum_{k=0}^{N} Z_k \epsilon^k + \epsilon^{N+1} R_{N+1} := H_{N,\epsilon} + \epsilon^{N+1} R_{N+1}, \quad Z_0 = P_0 \quad (14.5)$$

Inoltre, la proprietà $[Z_k, P_0] = 0$ vale per tutti i k cosicché l'operatore trasformato è diagonale sugli autovettori di P_0 a meno di un errore d'ordine ϵ^{N+1}. $H_{N,\epsilon}$ si può chiamare forma normale quantistica di S all'ordine N. La costruzione di $T_{\epsilon,N}$ e di $H_{N,\epsilon}$ è chiaramente equivalente alla costruzione del simbolo di Weyl di $\mathcal{Z}_k, \mathcal{T}_{\epsilon,N}$ di $Z_k, T_{\epsilon,N}$, con $\mathcal{Z}_k$ dipendenti da (x,ξ) solo tramite la trasformazione canonica $\mathcal{C}$. Si vedrà in seguito che, quando la parte non perturbata è l'oscillatore armonico, si può eseguire questa costruzione tramite applicazione diretta della teoria canonica delle perturbazioni semplicemente sostituendo le parentesi di Poisson con quelle di Moyal. La stessa canonica delle perturbazioni medesima è contenuta in questa costruzione come il caso particolare che si ottiene per $\hbar = 0$; in altre parole, la forma normale classica risulta nient'altro che il simbolo principale di quella quantisticao. Costruzione formale significa che tutti gli sviluppi in serie sono da considerare formali per tutto il paragrafo.

14.2 Lo sviluppo di Lie-Moyal

Se $H = H^*$, $W = W^*$ sono osservabili quantistici, poniamo $S := e^{iWt/\hbar} H e^{-iWt/\hbar}$. Allora S e H sono unitariamente equivalenti; inoltre si verifica facilmente che S ammette il seguente sviluppo formale (lo sviluppo del commutatore):

$$S_l = \sum_{l=0}^{\infty} S_l, \quad S_l := \frac{1}{il\hbar}[W, S_{l-1}], \quad l = 1, \ldots \quad S_0 := H \quad (14.6)$$

Ora poniamo:

$$\mathcal{H} := \sigma^W(H), \quad w := \sigma^W(W), \quad \Sigma := \sigma^W(S) = \sigma^W(e^{iWt/\hbar} H e^{-iWt/\hbar}) \quad (14.7)$$

e assumiamo la regolarità di tutti questi simboli.

Se $a := \sigma^W(A)$, $b := \sigma^W(b)$, sappiamo che $\sigma^W([A,B]/i\hbar) = \{a,b\}_M$. Quindi dalla (14.6) si ricava:

$$\begin{cases} \Sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \sigma_0 = \mathcal{H} \\ \\ \sigma_l = \frac{1}{l}\{w, \sigma_{l-1}\}_M, \quad l \geq 1 \end{cases} \tag{14.8}$$

Sia ora $\mathcal{L}_w$ la derivata di Lie nella direzione del campo vettoriale hamiltoniano generato dall'hamiltoniana w:

$$\mathcal{L}_w f = \{w, f\}$$

Allora abbiamo

$$\begin{cases} s := e^{\mathcal{L}_w}\mathcal{H} = \sum_{l=0}^{\infty} s_l, \quad s_0 = \mathcal{H} \\ \\ s_l = \frac{1}{l}\{w, s_{l-1}\}, \quad l \geq 1 \end{cases} \tag{14.9}$$

Dato che $\sigma^W(S_0) = \sigma^W(H) = s_0 = \mathcal{H}$, e $\sigma^W(W) = w$, per le (14.6,14.8) abbiamo

$$\sigma_p(S_l) = s_l, \qquad l \geq 0$$

Qui, ancora una volta, $\sigma_p(A)$ denota il simbolo principale dell'osservabile A. In parole: il simbolo principale dello sviluppo del commutatore quantistico è lo sviluppo di Lie classico.

14.3 Teoria delle perturbazioni

Si assuma H della forma:

$$H(\epsilon) = P_0 + \epsilon F \tag{14.10}$$

dove: $P_0 = P_0^*$, P_0 ha spettro discreto ed è diagonale (cioè i suoi autovalori e autovettori sono esplicitamente noti). Si assuma che P_0 e F siano operatori pseudodifferenziali semiclassici (in particolare, differenziali) e sia:

$$p_0 := \sigma^W(P_0), \qquad f := \sigma^W(F) \tag{14.11}$$

In corrispondenza, si assume che l'hamiltoniana p_0 sia (canonicamente) integrabile (cioè esiste una trasformazione canonica variabili azione-angolo tale che l'immagine di p_0 dipende solo dalle azioni; vedi sopra). Ora $H(\epsilon)$ sarà formalmente diagonalizzata sugli autovettori di P_0 se si può costruire un operatore autoaggiunto W tale che (notazioni come nei Paragrafi 2.1, 2.2 precedenti; $T = e^{iW}$)

$$[H_l, P_0] = 0, \quad \forall l \geq 1, \qquad H_0 := P_0.$$

Espresse sul simbolo di Weyl, queste condizioni significano che $H(\epsilon)$ sarà formalmente diagonalizzato se si può costruire w tale che

$$\{\mathcal{H}_0, \sigma_l\}_M = 0, \qquad \lambda \geq 1, \quad \mathcal{H}_0 := p_0$$

(si noti che, per evitare confusioni con l'operatore autoaggiunto W di simbolo di Weyl w, si omette l'apice W che denota quantizzazione di Weyl). Infatti quest'ultima condizione formalmente comporta $[S(\epsilon), P_0] = 0$. Si noti in particolare che, poiché tutti gli operatori in considerazione sono operatori pseudodifferenziali semiclassici, cioè i loro simboli hanno uno sviluppo completo in potenze di $\hbar$, le condizioni $\{\mathcal{H}_0, \sigma_l\}_M = 0$ implicano $\{\mathcal{H}_0, \sigma_l\} = 0$ $\forall l$, e cioè l'integrabilità formale della hamiltoniana trasformata $s = e^{\mathcal{L}_w}\mathcal{H}$. Riguardo questo aspetto, si ricordi che

$$s = e^{\mathcal{L}_w}\mathcal{H} = \mathcal{H}(\phi(\xi, x)) = \mathcal{H}(y(\xi, x), \eta(\xi, x)) \tag{14.12}$$

dove $\phi(\xi, x) = (y(\xi, x), \eta(\xi, x))$ è il flusso delle condizioni iniziali (ξ, x) rispetto al campo vettoriale hamiltoniano $(\nabla_\xi w, -\nabla_x w)$ al tempo 1. Dato che ϕ è una trasformazione completamente canonica, l'hamiltoniana $p_0 + \epsilon f$ è integrabile. Abbiamo infatti $\{s, p_0\} = 0$ e questo implica che s formalmente dipende solo dagli integrali primi di p_0 (le azioni) e da ϵ.

14.4 L'equazione omologica

Per costruire la trasformazione unitaria diagonalizzante cerchiamo allora il suo generatore W o, equivalentemente, il suo simbolo semiclassico w. In particolare, il simbolo principale di w genera la corrispondente trasformazione canonica classica integrante. Dato che la perturbazione è d'ordine ϵ, si comincia col cercare un simbolo w dello stesso ordine secondo il procedimento consueto della teoria canonica delle perturbazioni: in altre parole, la natura perturbativa del problema ci fa cercare un generatore prossimo al generatore della trasformazione identica. Poniamo pertanto $w = \epsilon w_1$ e cerchiamo di risolvere (cioè di diagonalizzare l'operatore) a meno di termini di ordine ϵ^2. Sviluppando Σ (eq.(14.8)) a meno di termini di ordine ϵ^2 si trova:

$$\Sigma = p_0 + \epsilon(\{w_1, p_0\}_M + f) + O(\epsilon^2) \tag{14.13}$$

Il sistema sarà pertanto diagonalizzato a meno di un errore d'ordine ϵ^2 se il termine d'ordine ϵ è diagonale sulla base di P_0, e cioè se

$$\{w_1, p_0\}_M + f = \mathcal{Z}^{(1)} \tag{14.14}$$

con la condizione aggiuntiva $\{\mathcal{Z}^{(1)}, p_0\}_M = 0$ che implica $[Z^{(1)}, P_0] = 0$. Qui come al solito $Z^{(1)} = Op^W(\mathcal{Z}^{(1)})$.

Osservazioni.

1. Per $\hbar = 0$ (14.13) si riduce alla consueta equazione omologica del primo ordine della teoria canonica delle perturbazioni

   $$\{w_1, p_0\} + f = \mathcal{Z}_0^{(1)}, \qquad \{\mathcal{Z}_0^{(1)}, p_0\} = 0.$$

   Qui $\mathcal{Z}_0^{(1)}$ è il simbolo principale di $\mathcal{Z}^{(1)}$;

2. Come al solito in teoria delle perturbazioni, le incognite in (14.13) sono due: la "funzione generatrice" w_1 e la "nuova hamiltoniana" $\mathcal{Z}^{(1)}$.

Se (14.13) ammette soluzione, allora il simbolo trasformato diventa

$$\mathcal{H}_\epsilon^{(1)} := p_0 + \epsilon\mathcal{Z}^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)}(\epsilon) \tag{14.15}$$

$$f^{(2)}(\epsilon) := \{w_1, f\}_M + \tfrac{1}{2}\{w_1, \{w_1, p_0\}\}_M + O(\epsilon) \tag{14.16}$$

Pertanto $H_\epsilon^{(1)} := Op^W(\mathcal{H}_\epsilon^{(1)})$ è diagonale a meno di termini di ordine ϵ^2.

Costruiamo ora il procedimento per ricorrenza per eliminare la parte non diagonale (la parte non integrabile, per $\hbar = 0$) a tutti gli ordini in teoria delle perturbazioni. In entrambi i casi la parte non diagonale è semplicemente la dipendenza da (x, ξ) dei simboli $\mathcal{Z}^{(k)}$ diversa dagli integrali primi di p_0. Cominciamo, per ragioni espositive, col fare i dettagli del calcolo del secondo ordine (cioè diagonalizzazione a meno di un errore d'ordine ϵ^3).

Poniamo $w = \epsilon w_1 + \epsilon^2 w_2$, dove si assume che w_1 sia stata determinata prima risolvendo (14.14), e w_2 è incognita. Sviluppando Σ in serie di potenze di ϵ fino al secondo ordine incluso (si noti che abbiamo posto $f := f^{(1)}$ per mantenere la notazione consistente) possiamo scrivere:

$$\Sigma = p_0 + \epsilon\mathcal{Z}^{(1)} + \epsilon^2(\{w_2, p_0\}_M + f^{(2)}) + O(\epsilon^3) \tag{14.17}$$

dove $f^{(2)}$ è data da (14.16). Dato che (14.14) vale questa equazione diventa:

$$\Sigma = p_0 + \epsilon(\{w_1, p_0\}_M + f^{(1)}) + \epsilon^2(\{w_2, p_0\}_M + f^{(2)}) + O(\epsilon^3) \tag{14.18}$$

da cui, imponendo la diagonalizzazione fino al secondo ordine incluso, si trova l'equazione omologica del secondo ordine

$$\{w_2, p_0\}_M + f^{(2)} = \mathcal{Z}^{(2)}, \qquad \{\mathcal{Z}^{(2)}, p_0\}_M = 0 \tag{14.19}$$

Se questa equazione è risolubile per w_2 e $\mathcal{Z}^{(2)}$ essa porge:

$$\mathcal{H}^{(2)}_\epsilon := p_0 + \epsilon\mathcal{Z}^{(1)} + \epsilon^2\mathcal{Z}^{(2)} + \epsilon^3 f^{(3)}(\epsilon) \tag{14.20}$$

e quindi la diagonalizzazione (integrabilità) a meno di termini di ordine ϵ^3.

È del tutto evidente che, scrivendo $w = \epsilon w_1 + \epsilon^2 w_2 + \ldots$ il coefficiente di ϵ^k nello sviluppo di Σ in serie di potenze di ϵ è $\{w_k, p_0\}_M + f^{(k)}$, dove $f^{(k)}$ è definita per ricorrenza in termini di $(p_0, f, w_1, \ldots, w_{k-1})$. Pertanto si trova l'equazione omologica della teoria delle perturbazioni

$$\{w_k, p_0\}_M + f^{(k)} = \mathcal{Z}^{(k)}, \quad \{\mathcal{Z}^{(k)}, p_0\}_M = 0, \quad k = 1, \ldots \tag{14.21}$$

Se queste equazioni sono risolubili, il simbolo w che ne risulta trasforma il simbolo $\mathcal{H}_\epsilon$ nella forma voluta, e cioè

$$\mathcal{H}^{(k)} = \mathcal{Z}^{(0)} + \epsilon\mathcal{Z}^{1)} + \ldots + \epsilon^k\mathcal{Z}^{(k)} + \epsilon^{k+1}\mathcal{R}^{(k+1)} \tag{14.22}$$

dove $\mathcal{Z}^{(0)} := p_0$ e $\{\mathcal{Z}^{(s)}, p_0\}_M = 0, s = 1, \ldots, k$. Questo completa la diagonalizzazione a meno di un errore d'ordine ϵ^{k+1}.

14.5 Espressioni esplicite per i termini di perturbazione all'ordine k e per il resto

La ricorsività del procedimento è del tutto evidente. In particolare, i simboli $w_k, f^{(k)}, \mathcal{Z}^{(k)}$ saranno semiclassici per tutti i k se w_1, $f^{(1)} = f$, $\mathcal{Z}^{(1)}$ lo sono. Scriviamo ora esplicitamente le espressioni che interessano ad ogni ordine k in teoria delle perturbazioni, incluso il resto d'ordine $k+1$. Poniamo:

$$w^{(k)} := \epsilon w_1 + \epsilon^2 w_2 + \ldots + \epsilon^k w_k, \qquad k = 1, 2, \ldots.$$

e inseriamo nelle (14.7,14.8,14.9). Allora, data la forma particolare di $\mathcal{H}_\epsilon$, $\mathcal{H}_\epsilon = p_0 + \epsilon f$, $f = f^{(1)}$, che rende la perturbazione un grado più elevato in ϵ, le formule seguenti si verificano facilmente sommando tutti i termini a fattore di ϵ^k:

$$\Sigma = \sum_{s=0}^{k} \epsilon^s \mathcal{H}_s + \epsilon^{k+1}\mathcal{R}^{(k+1)}, \qquad \mathcal{H}_0 = p_0 \tag{14.23}$$

dove

$$\mathcal{H}_s = \{w_s, p_0\}_M + f^{(s)} \tag{14.24}$$

$$\begin{aligned} f^{(s)} = & \sum_{r=2}^{s} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{j_1+\ldots+j_r=s \\ j_l \geq 1}} \{w_{j_1}, \{w_{j_2}, \ldots, \{w_{j_s}, p_0\}_M \ldots\}_M \\ & + \sum_{r=2}^{s-1} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{j_1+\ldots+j_r=s-1 \\ j_l \geq 1}} \{w_{j_1}, \{w_{j_2}, \ldots, \{w_{j_r}, f\}_M \ldots\}_M \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{(k+1)} = \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon^l \Big[& \sum_{r=2}^{k+1+l} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{j_1+\ldots+j_r=k+1+l \\ 1 \leq j_l \leq k}} \{w_{j_1}, \{w_{j_2}, \ldots, \{w_{j_r}, p_0\}_M \ldots\}_M \\ & + \sum_{r=2}^{k+l} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{j_1+\ldots+j_r=k+l \\ 1 \leq j_l \leq k}} \{w_{j_1}, \{w_{j_2}, \ldots, \{w_{j_r}, f\}_M \ldots\}_M \Big] \end{aligned}$$

14.6 Sulla soluzione dell'equazione omologica

Si consideri ancora una volta l'equazione omologica (14.19), riscritta omettendo l'indice k:

$$\{w, p_0\}_M + f = \mathcal{Z}, \qquad \{\mathcal{Z}, p_0\}_M = 0 \tag{14.25}$$

Dato che la parentesi di Moyal è formalmente un operatore differenziale di ordine infinito, in tutta generalità questa equazione è un'equazione alle derivate parziali di ordine infinito nell'incognita w. Esiste una scelta di p_0, tuttavia (e solo una), per cui (14.25) si riduce esattamente all'equazione alle derivate parziali del primo ordine della teoria canonica delle perturbazioni. Questo avviene quando p_0 è un polinomio quadratico. Dunque facciamo la seguente

Assunzione

p_0 è una funzione quadratica di $(\xi, x) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$.

Sotto questo ipotesi si ha chiaramente, per la (**??**), $\{p_0, g\}_M = \{p_0, g\}$ per ogni funzione regolare g. Allora (14.25) si riduce a:

$$\{w, p_0\} + f = \mathcal{Z}, \qquad \{\mathcal{Z}, p_0\} = 0. \tag{14.26}$$

La (14.26) è un'equazione puramente classica. Anche se f e $\mathcal{Z}$ dipendono da $\hbar$ come fanno i simboli semiclassici, li si possono considerare delle famiglie di osservabili classici dipendenti da $\hbar$; il punto è che la parte differenziale $\{w, p_0\}$ è la parentesi di Poisson. D'ora in poi ci restringiamo a simboli non perturbati di forma simile, con l'ipotesi aggiuntiva che p_0 sia una forma quadratica positiva definita e (senza perdita di generalità) diagonale nell $(x, \imath)$; e cioè da ora in poi p_0 avrà l'espressione

$$p_0(x, : xi) := \frac{1}{2}(\|\xi\|^2 + \|\omega x\|^2), \quad \|\omega x\|^2 := \omega_1^2 x_1^2 + \ldots + \omega_n^2 x_n^2 \tag{14.27}$$

p_0 è cosìl'hamiltoniana dell' oscillator armonico $n-$dimensionale. In altre parole, consieriamo solo ciò che in meccanica classica è noto come caso di Birkhoff, cioè le regolare perturbazioni delle piccole oscillazioni lineari attrono ad un minimo quadratico nondegenere del potenziale regolare.

Restringiamo ulteriormente le nostre considerazione al caso non risonante, cioè assumiamo indipendenza razional fra the positive numeros $\omega_i : i = 1, \ldots, n$ (le frequenze delle piccole oscillazioni)

$$\omega_1\nu_1 + \ldots + \omega_n\nu_n = 0, \nu \in \mathbb{Z}^n \Longrightarrow \nu \equiv 0.$$

Inoltre assumiamo la consueta condizione diofantina

$$\exists C > 0, \tau > n/2 \text{ such that } \quad |\langle \omega, \nu \rangle|^{-1} \leq C\|\nu\|^\tau \tag{14.28}$$

Si noti che anche queste condizioni are puramente classiche. In meccanica quantistica l'indipendenza razionale dele frequenze chiaramente implica la semplicità degli autovalori dell'oscillatore armonico.

Il modo abituale di risolvere l'equazione omologica è tramite sviluppo in serie di Fourier dopo la trasformazione in variabili azione-angolo. Anche se dovremo mettere in opera una sua variante, richiamiamo brevemente questo procedimento perché esso rappresenta l'algoritmo basilare della teoria canonica delle perturbazioni.

Si introducano le variabili azione-angolo (14.30). Allora $\{w, p_0\}(A, \phi) = \langle \omega, \partial w / \partial \phi \rangle$ e l'equazione omologica (14.27) diventa

$$\langle \omega, \frac{\partial w}{\partial \phi} \rangle = f(A, \phi) = \mathcal{Z}(A) \tag{14.29}$$

Questa equazione è un'equazione lineare alle derivate parziali a coefficienti costanti sul toro (cioè nello spazio delle v 2π-multiperiodiche). Dunque la si può risolvere direttamente tramite sviluppo in serie di Fourier. Si ponga:

$$w(A,\phi) = \sum_{\nu\in\mathbb{Z}^n} w_\nu(A)e^{i\langle\nu,\phi\rangle}, \quad f(A,\phi) = \sum_{\nu\in\mathbb{Z}^n} f_\nu(A)e^{i\langle\nu,\phi\rangle} \tag{14.30}$$

Inserendo questo sviluppo nella (14.29) e imponendo l'uguaglianza dei coefficienti di Fourier di ambo i membri otteniamo

$$i\langle\omega,\nu\rangle + f_\nu(A) = 0, \qquad \nu \neq 0$$

da cui la soluzione

$$w(A,\phi) = -i\sum_{\nu\neq 0} \frac{f_\nu(A)}{\langle\omega,\nu\rangle}e^{i\langle\nu,\phi\rangle} \tag{14.31}$$

$$\mathcal{Z}(A) = f_0(A) \tag{14.32}$$

Osservazioni

1. La serie di Fourier di equazione (14.31) converge e definisce una funzione olomorfa di (A,ϕ). Dato che infatti $f(\xi,x)$ è olomorfa, tale è $f(A,\phi)$. Pertanto $f_\nu(A)$ è olomorfa $\forall\nu$, e esiste $K>0$, indipendente da A sui compatti di $\mathbb{R}^n_+$, tale che $|f_\nu(A)| \leq e^{-K\|\nu\|}$. Per la condizione diofantina si può sempre trovare $\eta < K$ tale che
$$|\frac{f_\nu(A)}{\langle\omega,\nu\rangle}| \leq e^{-(K-\eta)\|\nu\|}$$
Questa stima implica la convergenza di (14.31) la natura olomorfa della sua somma $w(A,\phi)$.

2. Tornando alle variabili (ξ,x), per definizione di $\mathcal{C}$, eq. (14.29), $\mathcal{Z}(A)$ dipende solo da $(\xi_i^2+\omega_i^2x_i^2)/2$, $i=1,\ldots,n$, cioè dagli integrali primi di p_0.

3. Questa costruzione è lo stessa costruzione della teoria canonica classica delle perturbazioni per mezzo del metodo della serie di Lie. Ha luogo una coincidenza algebrica se si mettono le parentesi di Moyal al posto di quelle di Poisson (si osservi che $\{w,f_0\}\_M \neq \{w_1,f_0\}$): questo implica che il simbolo principale di Σ è la forma normale classica.

Non si può tuttavia applicare questo metodo così come sta al nostro problema di meccanica quantistica, perché quantizzazione e trasformazione canonica in variabili azione-angolo sono operazioni che non commutano (si ricordi che quantizzazione e trasformazione canonica sono operazioni che commutano se e solo se le trasformazioni canoniche sono lineari). Dunque dobbiamo mettere in opera una variante.

14.7 Integrazione dell'equazione omologica

La variante del consueto metodo d'integrazione tramite le variabili azione-angolo procede nel modo seguente: dato $\phi \in \mathbb{T}^n$, si ponga

$$\Psi : \mathbb{T}^n \times \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}^{2n}, \ (\phi, (\mathbf{x}, \xi)) \mapsto (\mathbf{x}', \xi') = \Psi_\phi(\mathbf{x}, \xi) \tag{14.33}$$

$$x'_k := \frac{\xi_k}{\omega_k} \sin \phi_k + x_k \cos \phi_k, \ \xi'_k := \xi_k \cos \phi_k - \omega_k x_k \sin \phi_k \tag{14.34}$$

Si osservi che

$$\Psi_{k,\omega t}(\mathbf{x}, \xi) = (\frac{\xi_k}{\omega_k} \sin \omega_k t + x_k \cos \omega_k t, \xi_k \cos \omega_k t - \omega_k x_k \sin \omega_k t), \ k = 1, \dots, n$$

Si osservi inoltre che $\Psi_k \omega t(\mathbf{x}, \xi)$ è il flusso del dato iniziale (ξ, x) rispetto al campo hamiltoniano $(-\nabla_x p_0, \nabla_\xi p_0)$, cioè il moto armonico con frequenze $\omega_k, k = 1, \dots, n$. Poniamo $z := (\xi, x)$ e

$$\tilde{g}_k(z) := \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{T}^n} g(\Psi_\phi(z)) e^{-i\langle k, \phi \rangle} \, d\phi, \quad k \in \mathbb{Z}^n \tag{14.35}$$

Basta assumere $g \in \mathbb{C}^1$ per avere, come ben noto

$$g(\Psi_\phi(z)) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \tilde{g}_k(z) e^{i\langle k, \phi \rangle} \Longrightarrow g(z) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \tilde{g}_k(z)$$

Si osservi inoltre che $g \equiv \tilde{g}_k$ per un qualche fisso k se e solo se

$$g(\Psi_\phi(z)) = e^{i\langle k, \phi \rangle} g(z) \tag{14.36}$$

La variante di cui sopra del consueto procedimento d'integrazione tramite le variabili azione-angolo è rappresentata dal seguente

Lemma 14.1 *Sotto l'ipotesi precedente su f, ω e p_0 l'equazione omologica*

$$\{w, p_0\} + f = \mathcal{Z}, \quad \{\mathcal{Z}, p_0\} = 0$$

ammette la soluzione seguente

$$w(\xi, x) = -i \sum_{k \neq 0} \frac{\tilde{f}_k(\xi, x)}{\langle \omega, k \rangle}, \quad \mathcal{Z} = \tilde{f}_0 \tag{14.37}$$

Dimostrazione Si ha:

$$\{p_0, w\}_M(z) = \{p_0, w\}(z) = \left.\frac{d}{dt}\right|_{t=0} w(\Psi_{\omega t}(z)) =$$

$$\left.\frac{d}{dt}\right|_{t=0} \sum_{k\neq 0} \frac{\tilde{f}_k(\Psi_{\omega t}(z))}{i\langle\omega, k\rangle} = \left.\frac{d}{dt}\right|_{t=0} \sum_{k\neq 0} \frac{\tilde{f}_k(z)}{i\langle\omega, k\rangle} e^{i\langle\omega t, k\rangle} = \sum_{k\neq 0} \tilde{f}_k(z) = f - \mathcal{Z}$$

e questo conclude la dimostrazione del Lemma.

Osservazione. Controlliamo che, come sopra, $\mathcal{Z} = f_0$ dipenda solo da $(\xi_i^2 + \omega_i^2 x_i^2)/2$, $i = 1, \ldots, n$. (14.33,14.34) e (14.29) infatti porgono

$$\Psi_\phi(\xi, x) = (\sqrt{2A/\omega}\cos 2\phi, -\sqrt{2A\omega}\sin 2\phi)$$

e la media su ϕ elimina la dipendenza da ϕ .

14.8 Riassunto: forme normali classiche e quantistiche

Riassumiamo la costruzione formale descritta fin qui. Data una famiglia di operatori di Schrödinger $H(\epsilon)$ generata dalla quantizzazione di Weyl della hamiltoniana classica $p_\epsilon := p_0(\xi, x) + \epsilon f(\xi, x)$, $H(\epsilon) = Op^W(p(\epsilon))$, dove p_0 è l'hamiltoniana degli oscillatori armonici non risonanti in n gradi di libertà, l'algoritmo della teoria canonica delle perturbazioni genera un simbolo $\Sigma(\xi, x; \hbar, \epsilon)$ tale che

1. La quantizzazione di Weyl di $\Sigma(\xi, x, \epsilon)$ definisce un operatore $S(\epsilon)$ unitariamente equivalente a $H(\epsilon)$ nel senso degli sviluppi in serie di potenze formali;

2. $\Sigma(\xi, x; \hbar, \epsilon)$ ammette lo sviluppo formale in serie di potenze di ϵ

$$\Sigma(\xi, x; \hbar, \epsilon) = p_0(\xi, x) + \sum_{s=1}^{\infty} \mathcal{Z}^{(s)}(\hbar)\epsilon^s \tag{14.38}$$

   tale che il coefficienti $\mathcal{Z}^{(k)}(\xi, x; \hbar)$ dipendono dalle variabili di fase (ξ, x) solo tramite le azioni A_i;

3. Il simbolo principale di $S(\epsilon)$, cioè il termine di ordine zero nello sviluppo di $\Sigma(\xi, x; \hbar, \epsilon)$ in potenze di $\hbar$, è la forma normale classica di $p_0 + \epsilon f$.

4. A rigore, la famiglia di operatori in considerazione è un operatore di Schrödinger ifse la perturbazione f è indipendente da ξ. Questo non fa alcuna differenza nella costruzione formale ma ne fa una grossa nelle stime come si vedrà in seguito.

È pertanto naturale porre la seguente

Definizione 14.1 *Il simbolo $\Sigma(\xi, x; \hbar, \epsilon)$ si dice forma normale quantistica di $p_\epsilon(\xi, x)$, e l'operatore $Op^W(\Sigma(\xi, x; \hbar, \epsilon))$ forma normale quantistica operatoriale di $H(\epsilon)$.*

Osservazioni.

1. Si denotino $\lambda_k(\hbar, \epsilon)$: $k = (k_1, \ldots, k_n)$; $k_l = 0, 1, \ldots$ gli autovalori di $H(\epsilon)$. Allora la forma normale quantistica genera immediatamente una formula di quantizzazione per gli autovalori $\lambda_k(\hbar, \epsilon)$:

$$\lambda_k(\hbar, \epsilon) = \langle (k + 1/2), \omega \rangle \hbar + \sum_{s=1}^{\infty} \mathcal{Z}^{(s)}((k_1 + 1/2)\hbar, \ldots, (k_n + 1/2)\hbar)\epsilon^s \qquad (14.39)$$

2. Ogni coefficiente $\mathcal{Z}^{(k)}(\xi, x; \hbar)$, $k = 1, \ldots$ è per costruzione un simbolo semiclassico, cioè ammette lo sviluppo

$$\mathcal{Z}^{(k)}(\xi, x; \hbar) = \sum_{l=0}^{L} \mathcal{Z}_l^{(k)}(\xi, x)\hbar^l + \hbar^{L+1}\mathcal{R}^{(k)}(\xi, x, \hbar) \qquad (14.40)$$

   dove $\mathcal{Z}_0^{(k)}(\xi, x) = \mathcal{Z}_0^{(k)}(A)$ è il termine di ordine k della forma normale classica.

3. Seguiamo qui la convenzione di denotare ϵ la "taglia" della perturbazione; cioè si richiede solo che f sia finita in qualche norma. Questo genera la forma normale come uno sviluppo in potenze di ϵ. Questa convenzione è talvolta utile nel tenere presente i diversi ordini. Una convenzione equivalente è prendere $\|f\|$ piccolo; allora il termine di ordine n dello sviluppo è quello d'ordine $\|f\|^n$.

14.9 Teoria delle perturbazioni quantistica non degenere

La costruzione precedente può sembrare scollegata alla consueta costruzione di Rayleigh-Schrödinger (presentata ad esempio in [RS],§XII.2-3) della teoria delle perturbazioni quantistica non- degenere attorno agli autovalori di P_0. Metteremo in opera qui una ben nota variante della teoria delle perturbazioni di Rayleigh-Schrödinger molto più vicina all'algoritmo classico, che inoltre tratta lo spettro perturbato globalmente anziché individualmente.

È ben noto che $P_0 = Op^W(p_0)$ è autoaggiunto in L^2 se definito su $H^2(\mathbb{R}^n) \cap L_2^2(\mathbb{R}^n)$, con azione

$$P_0 u = \frac{1}{2}(-\hbar^2 \Delta + \|\omega x\|^2)u, \quad u \in D(P_0)$$

Il risolvente di P_0 è compatto e i suoi autovalori sono

$$\lambda^0_\nu(\hbar,\epsilon) = \langle(\nu+1/2),\omega\rangle\hbar,\ \nu_j = 0,1,\ldots;\ j=1,\ldots,n$$

Questi autovalori sono tutti semplici per la condizione di non risonanza sulle frequenze ω.

Ora nelle ipotesi fatte $F = Op^W(f)$ è un operatore compatto in L^2, e quindi a fortiori relativamente compatto rispetto a P_0. Pertanto $H_\epsilon := P_0 + \epsilon F$ definito su $D(P_0)$ è autoaggiunto, ha risolvente compatto e gli autovalori $\lambda^0_\nu(\hbar) = \hbar\langle\nu+1/2,\omega\rangle$ di P_0 sono stabili come autovalori semplici $\lambda_\nu(\hbar,\epsilon)$ di H_ϵ per ϵ piccolo (che dipendono da ν). Allora, ponendo:

$$W^{(k)} := \epsilon W_1 + \epsilon^2 W_2 + \ldots + \epsilon^k W_k.$$

ancora una volta per la forma particolare di H_ϵ, $H_\epsilon = P_0+\epsilon F$, $F = F^{(1)}$, l'analogo quantistico (cioè operatoriale) di (14.23,14.24) è, come si verifica facilmente:

$$S = \sum_{s=0}^{k} \epsilon^s H_s + \epsilon^{k+1} R^{(k+1)}, \qquad H_0 = P_0 \tag{14.41}$$

dove

$$H_k = \frac{[W_k,H_0]}{i\hbar} + F^{(k)} \tag{14.42}$$

$$\begin{aligned} F^{(s)} = &\sum_{r=2}^{s} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{j_1+\ldots+j_r=s \\ j_l\ge 1}} \frac{[W_{j_1},[W_{j_2},\ldots,[W_{j_r},P_0]\ldots]}{(i\hbar)^r} \\ &+\sum_{r=2}^{s-1} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{j_1+\ldots+j_r=s-1 \\ j_l\ge 1}} \frac{[W_{j_1},[W_{j_2},\ldots,[W_{j_r},F]\ldots]}{(i\hbar)^r} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R^{(k+1)} = \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon^l \Big[&\sum_{r=2}^{k+1+l} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{j_1+\ldots+j_r=k+1+l \\ 1\le j_l\le k}} \frac{[W_{j_1},[W_{j_2},\ldots,\{W_{j_r},P_0]\ldots]}{(i\hbar)^l} \\ &+\sum_{r=2}^{k+l} \frac{1}{r!} \sum_{\substack{j_1+\ldots+j_r=k+l \\ 1\le j_l\le k}} \frac{[W_{j_1},[W_{j_2},\ldots,[W_{j_r},F]\ldots]\Big]}{(i\hbar)^l} \end{aligned}$$

Dunque l'equazione omologica quantistica di ordine $s-$ si scrive

$$\frac{[W_s,P_0]}{i\hbar} + F^{(s)} = Z^{(s)}, \quad [P_0,Z^{(s)}] = 0 \tag{14.43}$$

Il modo abituale di risolvere questa equazione è il seguente: prendere gli elementi di matrice di ambo i membri rispetto agli autovettori ψ_ν corrispondenti agli autovalori λ^0_ν. Allora, poiché $P_0\psi_\nu = (\nu + 1/2)\hbar\omega\psi_\nu$, si trova:

$$\frac{1}{i\hbar}\langle\psi_\mu, W_s\psi_\nu\rangle(\langle(\mu-\nu,\hbar\omega\rangle) + \langle\psi_\mu, F^{(s)}\psi_\nu\rangle = \langle\psi_\mu, Z^{(s)}\psi_\nu\rangle$$

Ora $Z^{(s)}$ deve essere diagonale sugli autovettori di P_0. Dunque:

$$\begin{aligned}\langle\psi_\mu, W_s\psi_\nu\rangle &= -i\hbar(1-\delta_{\mu,\nu})\frac{\langle\psi_\mu, F^{(s)}\psi_\nu\rangle}{\langle(\mu-\nu,\hbar\omega\rangle}\\ \langle\psi_\mu, Z^{(s)}\psi_\nu\rangle &= \langle\psi_\mu, F^{(s)}\psi_\nu\rangle\delta_{\mu,\nu}\end{aligned}$$

Pertanto lo sviluppo di Rayleigh-Schrödinger per gli autovalori perturbati $\lambda_\nu(\hbar,\epsilon)$ all'ordine $N, N = 1, \dots$ prende la forma

$$\lambda_\nu(\hbar,\epsilon) = \hbar\langle\nu + 1/2, \omega\rangle + \sum_{s=1}^{N}\epsilon^s\lambda^{(s)}_\nu(\hbar), \quad \lambda^{(s)}_\nu(\hbar) = \langle\psi_\nu, Z^{(s)}\psi_\nu\rangle \tag{14.44}$$

Si dimostra in [DGH] che quando f è a simbolo polinomiale in (x,ξ) questo procedimento puramente operatoriale e quello classico descritto sopra generano la stessa serie delle perturbazioni. Lo stesso risultatoera stato provato in precedenza [GP] quando la serie era generata dall'algoritmo di Poincaré-Lindstedt della teoria di Hamilton-Jacobi linearizzata. Questo ultimo procedimento si può mettere in opera scrivendo l'equazione di Schrödinger nella rappresentazione di Bargmann. Più precisamente, vale il seguente risultato

Proposizione 14.1 *Per $s = 1, 2, \dots$ gli operatori W_s e $Z^{(s)}$ ammettono simbolo semiclassico di Weyl w_s e $\mathcal{Z}^{(s)}$, rispettivamente; w_s e $\mathcal{Z}^{(s)}$ coincidono con i simboli definiti per ricorrenza dalla (14.21,14.22). Inoltre per tutti gli $s = 1, \dots$ vale la seguente rappresentazione esplicita:*

$$\lambda^{(s)}_\nu(\hbar) = \mathcal{Z}^{(s)}_0(A)|_{A=\nu\hbar} + \sum_{j=1}^{M(s-1)} Q^{(s)}_j(A)|_{A=\nu\hbar}\hbar^j \tag{14.45}$$

dove

$$Q^{(s)}_j(A) = \sum_{l=0}^{s}\sum_{|\alpha|=l} D^\alpha \mathcal{Z}^{(s)}_{j-s}(A) \tag{14.46}$$

Qui $D^{(j)}_p$, $p = 1, \dots, n; j = 0, 1, \dots$ è l'operatore differenziale che agisce sulle variabili d'azione definito nel modo seguente:

$$D^{(j)}_p = 2^{-j}\sum_{r=0}^{[j/2]} C^j_r C^r_p \frac{\partial^{(r+j)}}{\partial A^{(r+j)}_p} \tag{14.47}$$

I coefficienti C_r^j sono a loro volta definiti dalla ricorrenza:

$$C_0^j = 1, \quad C_j^{2j} = 1/(3^j j!)$$
$$C_r^j = \left[jC_r^{j-1} + \sum_{k=2r-2}^{j-2} 2^{j-k-1}(-1)^{j+k} \times \right.$$
$$\left. \times \sum_{q=r-1}^{[k/2]} C_q^k q!/[(r-1)!(q-r+1)!(j+r-k-q-1)!] \right] /(r+j)$$

14.10 Confronto con la consueta teoria delle perturbazioni di Rayleigh-Schrödinger

Sotto condizioni molto più generali che quelle richiamate sopra la teoria delle perturbazioni di Rayleigh-Schrödinger per ogni autovalore individuale di H_ϵ procede nel modo seguente: sia λ un autovalore di P_0, e $d(\lambda) := d$ la sua distanza di isolamento (la distanza dal complemento dello spettro; in questo caso $d = 1/2$). Sia inoltre $FD(P_0) \subset D(P_0)$, cioè F lascia $D(P_0)$ invariante. Si consideri nel piano complesso $\mathbb{C}$ la circonferenza $\Gamma := \{z \in \mathbb{C} \mid |z - \lambda| = 1/2\}$, e sia ψ_0 l'autovettore (normalizzato) corrispondente a E_0, $P_0\psi_0 = E_0\psi_0$. Siano $R(z,\epsilon) = [H_\epsilon - z]^{-1}$, $R(z,0) := [P_0 - z]^{-1}$ i risolventi di $H(\epsilon)$ e $P_0 = H_0$, rispettivamente. Sia:

$$\mathcal{P}_\epsilon = \frac{1}{2\pi i} \int_\Gamma [H_\epsilon - z]^{-1}\, dz, \quad \epsilon \geq 0$$

Come ben noto, $\mathcal{P}_\epsilon$ è l'operatore di proiezione sul sottospazio sotteso dalla parte dello spettro di $H(\epsilon)$ entro Γ, che for $\epsilon = 0$ è solo il punto λ_0 cosicché il codominio di $\mathcal{P}_0$ è esattamente ψ_0. Ora per ogni $u \in D(P_0)$ il risolvente $R(z,\epsilon) = [H_\epsilon - z]^{-1}$ ammette l'abituale sviluppo geometrico formale

$$[H_\epsilon - z]^{-1}u = [P_0 + \epsilon F - z]^{-1}u = [H_0 - z]^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} (-\epsilon)^k [F(H_0 - z)^{-1}]^k u \tag{14.48}$$

nel senso che ciascun termine dello sviluppo esiste. Integrando su Γ e invertendo la serie con l'integrale si trova lo sviluppo asintotico per l'operatore di proiezione $\mathcal{P}_\epsilon$:

$$\mathcal{P}_\epsilon u = \mathcal{P}_0 u + \sum_{k=1}^{\infty} (-\epsilon)^k \int_\Gamma [H_0 - z]^{-1}[F(H_0 - z)^{-1}]^k u \tag{14.49}$$

Formalmente $\mathcal{P}_\epsilon u$ è un autovettore di H_ϵ. Si denoti $E(\epsilon)$ il corrispondente autovalore (formale). Allora, ovviamente:

$$E(\epsilon) = \frac{\langle \mathcal{P}_\epsilon u, H_\epsilon \mathcal{P}_\epsilon u \rangle}{\langle u, \mathcal{P}_\epsilon u \rangle} \tag{14.50}$$

dove $E(0) = E_0$. Lo sviluppo delle perturbazioni di Rayleigh-Schrödinger per l'autovalore formale $E(\epsilon)$ si ottiene nel modo seguente: prima si inserisce la (14.49) con $u = \psi_0$ nel numeratore e nel denominatore della (14.50),poi si eseguono gli integrali di contorno che ne risultano, e finalmente si calcola il quoziente delle serie di potenze in ϵ cosìgenerate. Scrivendo, formalmente

$$E(\epsilon) = E(0) + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \epsilon^k \tag{14.51}$$

le seguenti formule abituali si verificano senza difìfcoltà:

$$\lambda_1 = \langle \psi_0, F\psi_0 \rangle, \quad \lambda_2 = \sum_{k \neq 0} \frac{\langle \psi_0, V\psi_k \rangle \langle \psi_k, V\psi_0 \rangle}{E_k - E_0}, \ldots$$

Sia ora F relativamente limitato rispetto a un H_0, cioè sia $D(H_0) \subset D(F)$ ed esistono costanti $a > 0$ e $b > 0$ tali che $\|Vu\| \leq b\|H_0 u\| + a\|u\| \; \forall u \in (H_0)$. Queste condizioni sono a fortiori vere in questo caso perché F è limitato. Allora $F(H_0 - z)^{-1}$ è limitato uniformemente per $z \in \Gamma$; questo implica la convergenza di (14.49) e ciò a sua volta implica che lo sviluppo di Rayleigh-Schrödinger (14.51) ha un raggio di convergenza non nullo all'autovalore $E(\epsilon)$. Il punto importante da tenere presente è che questo raggio di convergenza non è uniforme nell'indice degli autovalori (equivalentemente, nel numero quantico) e nemmeno $\hbar$.

15 La forma normale quantistica ed una formula di quantizzazione con stima del resto

In questo capitolo otterremo le stime che trasformano la soluzione formale descritta sopra in soluzione in senso matematico stretto. Ci limiteremo al caso analitico, e cioè lavoreremo sempre con simboli analitici. Per prima cosa introdurremo opportune norme sugli spazi di funzioni analitiche; poi ricaveremo la stima sui termini individuali dello sviluppo e sul resto nei corrispondenti spazi di funzioni olomorfe.

15.1 Spazi normati di funzioni analitiche

Data $g \in (C^1 \cap L^2)(\mathbb{R}^{2n})$, si richiami la definizione (14.35) di $\tilde{g}_k(z)$. In queste circostanze si ha:

$$g(\Psi_\phi(z)) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \tilde{g}_k(z) e^{i\langle k, \phi \rangle}, \qquad g(z) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \tilde{g}_k(z)$$

dove l'azione analitica $\Psi_\phi(z)$ di $\mathbb{T}^n$ su $\mathbb{R}^{2n}$ è stata definita in (14.33,14.34). Si ricordi che questo implica

$$g(z) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \tilde{g}_k(z)$$

Inoltre, esiste la trasformata di Fourier di $g(z)$, denotata $\hat{g}(s)$:

$$\hat{g}(s) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} g(z) e^{-i\langle s, z \rangle} \, dz \tag{15.1}$$

Si denoti inoltre $\hat{\tilde{g}}_k(s)$ la trasformata di Fourier di $\tilde{g}_k(z)$. $\hat{\tilde{g}}_k(s)$ esiste perché

$$\|g(z)\|^2_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \|\tilde{g}_k(z)\|^2_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} < +\infty$$

e questo implica

$$\|\tilde{g}_k(z)\|^2_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} < +\infty \; \forall \, k$$

Dati $\rho > 0$, $\sigma > 0$, si definiscano le norme:

$$\|g\|_{\rho,\sigma} := \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} e^{\rho|k|} \int_{\mathbb{R}^{2n}} |\hat{\tilde{g}}_k(s)| e^{\sigma|s|} \, ds \tag{15.2}$$

$$\|g\|_\sigma := \int_{\mathbb{R}^{2n}} |\hat{g}(s)| e^{\sigma|s|} \, ds \tag{15.3}$$

Questo consente di introdurre gli spazi $\mathcal{A}_{\rho,\sigma}$ e $\mathcal{A}_\sigma$ di funzioni olomorfe, definiti nel modo seguente

$$\mathcal{A}_{\rho,\sigma} := \{g : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{C} \mid \|g\|_{\rho,\sigma} < +\infty\} \tag{15.4}$$

$$\mathcal{A}_{\sigma} := \{g : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{C} \mid \|g\|_{\sigma} < +\infty\} \tag{15.5}$$

Osservazioni

1. Ovviamente:
$$\|g\|_{\rho,\sigma} = \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} e^{\rho|k|}\|\tilde{g}_k\|_\sigma$$

2. Se $f \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$ per un qualche $\rho > 0, \sigma > 0$ allora per il teorema di Paley-Wiener f è olomorfa in $\mathbb{R}^{2n}$ e ha un prolungamento olomorfo alla striscia $\{z \mid |\mathrm{Im} z_i| < a\} \subset \mathbb{C}^{2n}$, $a > 0$. Lo stesso succede se $f \in \mathcal{A}_\sigma$

3. Sia $f \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$, e si denoti $F = Op^W(f)$. Allora F è continuo in L^2, perché, per definizione stessa di quantizzazione di Weyl, cioè la formula (10.2)
$$\|F\|_{L^2\to L^2} \le \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{\mathbb{R}^{2n}} |\hat{f}(s)|\, ds \equiv \|\hat{f}\|_{L^1} \le \|f\|_{\rho,\sigma}$$
da cui
$$\|F\|_{L^2\to L^2} \le \|f\|_{\rho,\sigma} \tag{15.6}$$

15.2 Stima della soluzione dell'equazione omologica

Si consideri ancora l'equazione omologica (14.26) La stima fondamentale della soluzione, ottenuta nel paragrafo 2.6 precedente, è rappresentata dal risultato seguente:

Lemma 15.1 *Sia $f \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$ per un qualche $\rho > 0, \sigma > 0$. Allora l'equazione omologica*

$$\{w, p_0\} + f = \mathcal{Z}, \qquad \{\mathcal{Z}, p_0\} = 0 \tag{15.7}$$

ammette una soluzione unica $\mathcal{Z} \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$, $w \in \mathcal{A}_{\rho-d,\sigma}$, $\forall\, d > 0$. Inoltre $\mathcal{Z} \circ \Psi_\phi = \mathcal{Z}$ e valgono le stime seguenti:

$$\|\mathcal{Z}\|_{\rho,\sigma} \le \|f\|_{\rho,\sigma} \tag{15.8}$$

$$\|w\|_{\rho-d,\sigma} \le c_\psi\|f\|_{\rho,\sigma}/d^\tau, \quad c_\psi := \gamma^{-1}(\tau/e)^\tau \tag{15.9}$$

Dimostrazione Anzitutto si osservi che per la costruzione del Cap.2.7 $\mathcal{Z} \circ \Psi_\phi = \mathcal{Z}$ il che implica $\{\mathcal{Z}, p_0\} = 0$. Allora, per il Lemma 14.1 abbiamo:

$$\mathcal{Z} := \tilde{f}_0, \qquad w := \sum_{k \neq 0} \frac{\tilde{f}_k(z)}{\langle \omega, k \rangle} \tag{15.10}$$

La stima di $\mathcal{Z}$ è contenuta nell'ipotesi; per quanto riguarda la stima di w, ancora per il Lemma 14.1 e la condizione diofantina (14.28) possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} \|w\|_{\rho-d,\sigma} &= \sum_{k \neq 0} \frac{\|\tilde{f}_k\|_\sigma}{|\langle \omega, k \rangle|} e^{(\rho-d)|k|} \leq \\ \sup_{k \neq 0} \frac{e^{-d|k|}}{|\langle \omega, k \rangle|} \sum_{k \neq 0} \|\tilde{f}_k\|_{\rho,\sigma} &\leq \sum_{k \neq 0} \sup_{m \neq 0} e^{-dm} m^\tau \gamma^{-1} \|\tilde{f}_k\|_{\rho,\sigma} \\ &= \gamma^{-1} \|\tilde{f}_k\|_{\rho,\sigma} \left(\frac{\tau}{ed}\right)^\tau \end{aligned}$$

Per costruzione, $\mathcal{Z} = \tilde{f}_0$ ha la proprietà $\mathcal{Z} \circ \Psi_\phi = \mathcal{Z}$; equivalentemente, si può scrivere $\{\mathcal{Z}, p_0\} = \{\mathcal{Z}, p_0\}_M = 0$.

15.3 Stima della parentesi di Moyal

Il passo successivo è rappresentato dalla stima della parentesi di Moyal nella norma $\| \cdot \|_{\rho,\sigma}$. Questo punto è la sola differenza tecnica rilevante con la consueta teoria canonica delle perturbazioni dove è necessaria solo la stima della parentesi di Poisson. La stima fondamentale è la seguente:

Lemma 15.2 *Siano $g \in \mathcal{A}_\sigma$, $g' \in \mathcal{A}_{\sigma-\delta}$ funzioni regolari. Allora, $\forall\, 0 < \delta' < \sigma - \delta$:*

$$\|\{g, g'\}_M\|_{\sigma-\delta-\delta'} \leq \frac{1}{e^2 \delta'(\delta + \delta')} \|g\|_\sigma \|g'\|_{\sigma-\delta} \tag{15.11}$$

Dimostrazione

Si ricordi anzitutto che, facendo la trasformata di Fourier della convoluzione ritorta $f\#g - g\#f$, si verifica facilmente la seguente ben nota formula per la trasformata di Fourier della parentesi di Moyal (si veda ad esempio [Fo],§3.4):

$$(\{g, g'\}_M)^\wedge(s) = \frac{2}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^{2n}} \widehat{g}(s^1) \widehat{g'}(s - s^1) \sin\left[\hbar(s - s^1) \wedge s^1/2\right] ds^1 \tag{15.12}$$

dove, dati due vettori $s = (v, w)$ e $s^1 = (v^1, w^1)$, $s \wedge s^1 := \langle w, v_1 \rangle - \langle v, w_1 \rangle$.

Dato che $|s \wedge s^1| \le |s|\,|s^1|$, per definizione di $\mathcal{A}_\sigma$-norm e (15.12), si trova

$$\begin{aligned}
\|\{g,g'\}_M\|_{\sigma-\delta-\delta'} &= 2\int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{(\sigma-\delta-\delta')|s|}\,ds \int_{\mathbb{R}^{2n}} |\widehat{g}(s)\widehat{g}'(s-s^1)| \frac{|\sin(\hbar(s-s^1)\wedge s^1)/2|}{\hbar} ds^1 \\
&\le 2\int_{\mathbb{R}^{2n}} ds \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{(\sigma-\delta-\delta')(|s|+|s^1|)} |\widehat{g}(s)||\widehat{g}'(s^1)| \frac{|\sin(\hbar' s\wedge s^1)/2|}{\hbar'}\,ds^1 \\
&\le \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{(\sigma-\delta-\delta')|s|}|\widehat{g}(s)|\,ds \cdot \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{(\sigma-\delta-\delta')|s^1|}|\widehat{g}'(s^1)||s\wedge s^1|\,ds^1 \\
&\le \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{(\sigma-\delta-\delta')|s|}|\widehat{g}(s)|\,|s|\,ds \cdot \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{(\sigma-\delta-\delta')|s^1|}|\widehat{g}'(s^1)|\,|s^1|\,ds^1
\end{aligned}$$

da cui l'asserzione perché $e^{-\delta x}x \le 1/e\delta$, $\forall x > 0, \forall \delta > 0$. Questo conclude la dimostrazione del Lemma.

Il secondo passo preliminare per la stima in $\mathcal{A}_{\rho,\sigma}$ della parentesi di Moyal $\{g,g'\}_M$ è rappresentato dall'identificazione dei suoi coefficienti angolari. A questo scopo abbiamo:

Lemma 15.3 *$\forall\,\phi \in \mathbb{T}^n$, $\forall\, g : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}$, g regolari, esiste un operatore unitario $X_\phi : L^2 \to L^2$ con la proprietà*

$$Op^W(g\circ\Psi_\phi) = X_\phi Op^W(g) X_\phi^{-1} \tag{15.13}$$

Dimostrazione Per ogni fisso ϕ la mappa Ψ_ϕ definita dalla (14.33,14.34) è una biiezione lineare canonica di $\mathbb{R}^{2n}$. Allora (15.13) è la proprietà caratteristica della quantizzazione di Weyl richiamata nel §1 sopra. Questo prova il Lemma.

Verifichiamo ora che il coefficiente di Fourier spaziale di ordine k di un $\hbar$-simbolo pseudodifferenziale è ancora un $\hbar$-simbolo pseudodifferenziale.

Lemma 15.4 *Siano g e g' funzioni regolari tali che $g \equiv \tilde{g}_k$, $g' \equiv \tilde{g}'_l$ per un qualche fisso $k,l \in \mathbb{Z}^n$. Allora, denotando $h := \{g,g'\}_M$ si ha $h \equiv \tilde{h}_{k+l}$.*

Dimostrazione

Per il Lemma precedente possiamo scrivere

$$\begin{gathered}
Op^W(h\circ\Psi_\phi) = X_\phi Op^W(h) X_\phi^{-1} = \\
\tfrac{1}{i\hbar'}[X_\phi Op^W(g) X_\phi^{-1}, X_\phi Op^W(g') X_\phi^{-1}] = Op^W(\{g\circ\Psi_\phi, g'\circ\Psi_\phi\}_M)
\end{gathered}$$

Inoltre, per la bilinearità della parentesi di Moyal e (14.37):

$$h\circ\Psi_\phi = \{e^{i\langle k,\phi\rangle}g, e^{i\langle l,\phi\rangle}g'\}_M = e^{i\langle (k+l),\phi\rangle}\{g,g'\}_M = e^{i\langle (k+l,)\phi\rangle}h$$

□

Si possono ora stimare la parentesi di Moyal e i termini individuali dello sviluppo della trasformata di Lie quantistica.

Lemma 15.5 *Siano $g \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$ e $g' \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma-\delta}$. Allora, per ogni $\delta' < \sigma - \delta$ positivo:*

$$\|\{g, g'\}_M\|_{\rho,\sigma-\delta-\delta'} \leq \frac{1}{e^2\delta'(\delta+\delta')}\|g\|_{\rho,\sigma}\,\|g'\|_{\rho,\sigma-\delta} \tag{15.14}$$

Dimostrazione

Denotando una volta di più $h = \{g, g'\}_M$, per i Lemmi 15.4 e 15.2 possiamo scrivere

$$\begin{aligned}\|h\|_{\rho,\sigma-\delta-\delta'} &= \sum_{k\in\mathbb{Z}^n} \|\tilde{h}_k\|_{\sigma-\delta-\delta'}\, e^{\rho|k|} \leq \sum_{k,l\in\mathbb{Z}^n} e^{\rho|k+l|}\|\{\tilde{g}_k, \tilde{g'}_l\}_M\|_{\sigma-\delta-\delta'} \\ &\leq \sum_{k,l\in\mathbb{Z}^n} e^{\rho|k|+\rho|l|}\frac{\|\tilde{g}_k\|_\sigma\|\tilde{g'}_l\|_{\sigma-\delta}}{e^2\delta'(\delta+\delta')} = \frac{\|\tilde{g}\|_{\rho,\sigma}\|\tilde{g'}\|_{\sigma-\delta}}{e^2\delta'(\delta+\delta')}\end{aligned}$$

15.4 Le stime ricorrenti

Siamo ora in posizione di formulare e dimostrare le stime ricorrenti che ci permetteranno di maggiorare i termini individuali dello sviluppo perturbativo e il resto. Abbiamo:

Lemma 15.6 *Siano $g \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$, $w \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$. Si definisca*

$$g_r := \frac{1}{r}\{w, g_{r-1}\}_M,\ r \geq 1;\ g_0 := g \tag{15.15}$$

Allora $g_r \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma-\delta}$, $\forall 0 < \delta < \sigma$ e vale la stima seguente:

$$\|g_r\|_{\rho,\sigma-\delta} \leq (\delta^{-2}\|w\|_{\rho,\sigma})^r\|g\|_{\rho,\sigma} \tag{15.16}$$

Dimostrazione

Basta iterare (15.14) con $\delta = 0$, e porre alla conclusione $\delta' = \delta$.

L'ultima stima ricorrente riguarda le derivate di Lie-Moyal di p_0 di ordine più elevato, cioè la stima di $\{w, \{w, \ldots, \{w, p_0\}_M \ldots\}_M$. Questo caso deve essere trattato indipendentemente perché $p_0 \notin \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$. Abbiamo:

Lemma 15.7 *Sia $g \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$, e w la soluzione dell'equazione omologica (14.15). Si definisca la successione $\{p_{r,0} : r = 0, 1, \ldots\}$ nel modo seguente*

$$p_{0,0} := p_0; \qquad p_{r,0} := \frac{1}{r}\{w, p_{r-1,0}\}_M,\ r \geq 1 \tag{15.17}$$

Allora, per ogni $0 < d < \rho, 0 < \delta < \sigma$, $p_{r,0} \in \mathcal{A}_{\rho-d,\sigma-\delta}$ *e soddisfa la stima seguente*

$$\|p_{r,0}\|_{\rho-d,\sigma-\delta} \leq 2\left(\delta^{-2}\|w\|_{\rho-d,\sigma}\right)^{r-1}\|g\|_{\rho-d,\sigma}, \quad g := \mathcal{Z} - f, \quad k \geq 1 \tag{15.18}$$

Dimostrazione

Basta notare che, per la (14.15), $\{w, p_0\}_M = \mathcal{Z} - f$ da cui $\|p_{10}\|_\sigma \leq 2\|g\|_\sigma$. Pertanto si può applicare anche qui il ragionamento del Lemma 15.6. □

15.5 Stima dei termini individuali e del resto

Si può ora formulare e dimostrare il risultato tecnico principale.

Proposizione 15.1 *Siano* $\mathcal{H} = p_0 + epf$, $f \in \mathcal{A}_{\rho,\sigma}$, $\rho > 0$, $\sigma > 0$, *e sia* $H = Op^W(\mathcal{H})$. *Allora* $\forall k \geq 1$ *esiste un operatore unitario* T_k *in* L^2 *tale che il simbolo di Weyl di* $\mathcal{H}^{(k)}$ *di* $H^{(k)} := T_k H T_k^{-1}$ *ha la forma*

$$\mathcal{H}^{(k)} = p_0 + \epsilon\mathcal{Z}^{(k)} + \epsilon^{k+1}\mathcal{R}^{(k+1)} \tag{15.19}$$

dove:

$$\mathcal{Z}^{(k)} = \sum_{s=0}^{k-1} \epsilon^s \mathcal{Z}_s^{(k)} \tag{15.20}$$

Inoltre valgono le proprietà seguenti, con $d < \rho/(k+2)$, $\delta < \sigma/(k+2)$:

(i) $\mathcal{Z}_s^{(k)} \in \mathcal{A}_{\rho-sd,\sigma-s\delta}$, $\mathcal{R}^{(k+1)} \in \mathcal{A}_{\rho-(k+1)d,\sigma-(k+1)\delta}$;

(ii) $\{\mathcal{Z}_s^{(k)}, p_0\}_M = 0$, $\forall s = 0, 1, \ldots;\ k = 1, 2, \ldots$;

(iii) $\|\mathcal{Z}_s^{(k)}\|_{\rho-sd,\sigma-s\delta} \leq \mu_{(k)}^s, \quad s = 1, \ldots, k$;

(iv) $\|\mathcal{R}^{(k+1)}\|_{\rho-(k+1)d,\sigma-(k+1)\delta} \leq 4\mu_{(k)}^{(k+1)}$;

dove:

$$\mu_{(k)} := 8c_\psi \frac{E}{\delta^2 d^\tau}; \quad c_\psi := (\tau/e)^\tau \gamma^{-1}; \quad E = \|f\|_{\rho,\sigma} \tag{15.21}$$

Osservazioni

1. Tutte le stime sono indipendenti da $\hbar, 0 \leq \hbar \leq 1$, e A sui compattoi di $\mathbb{R}_+^n$. Per $\hbar = 0$ si ritrova la forma normale classica di Birkhoff troncata all'ordine k con stima del resto.

2. La stima del resto è d'ordine

$$\delta^{-2(k+1)}d^{k\tau} \sim (k+2)^{2k+2} \cdot (k+2)^{\tau(k+1)}$$

Il secondo fattore è la stima consueta del resto della forma normale di Birkhoff. La meccanica quantistica, cioè la parentesi di Moyal, aggiunge il primo fattore, ciè la divergenza addizionale $(k+2)^{2k+2}$.

3. Applicando la quantizzazione di Weyl al simbolo $\mathcal{H}^{(k)}$ si trova l'operatore autoaggiunto $H^{(k)}$ con autovalori $\hbar\langle(\nu+1/2),\omega\rangle + \epsilon\sum_{s=0}^{k-1}\epsilon^s\mathcal{Z}_s^{(k)}(\hbar\langle(\nu+1/2),\omega\rangle)$. Pertanto otteniamo la formula seguente di quantizzazione per gli autovalori $\lambda_\nu(\hbar,\epsilon)$ di H:

$$\lambda_\nu(\hbar,\epsilon) = \hbar\langle(\nu+1/2),\omega\rangle + \epsilon\sum_{s=0}^{k-1}\epsilon^s\mathcal{Z}_s^{(k)}(\hbar\langle(\nu+1/2),\omega\rangle) + \epsilon^{(k+1)}\|\mathcal{R}^{(k+1)}\| \tag{15.22}$$

dove $\|\mathcal{R}^{(k+1)}\|_{L^2\to L^2} \le 4\mu_{(k)}^{(k+1)}$. (15.22) è la forma normale quantistica all'ordine k con stima del resto. Ancora una volta, è implicita la notazione vettoriale nella formula precedente; cioè, $\nu + 1/2 := (\nu_1 + 1/2, \ldots, \nu_n + 1/2)$.

4. Se si tengono fissi ν e $\hbar$, le serie di potenze in ϵ che ne risultano coincidono con i consueti sviluppi perturbativi di Rayleigh-Schrödinger attorno agli autovalori individuali di H_0. Queste serie di potenze sono convergenti nelle ipotesi fatte , perché la perturbazione, essendo un operatore continuo in L_2, è a fortiori limitata rispetto a H_0. I raggi di convergenza tuttavia si annullano al limite classico $\nu\to\infty$, $\hbar\to 0$, $\nu\hbar\to 0$. La maggiorazione precedente rende conto di questo fenomeno.

Dimostrazione

Tenendo conto dei Lemmi 15.1,15.2, 15.15 per un ragionamento ricorrente immediato basato sulla formula esplicita (14.24) si trova la stima seguente:

$$\|f^{(s)}\|_{\rho-sd,\sigma-s\delta} \le \mu_{(s)}^s, \quad s=1,\ldots,k \tag{15.23}$$

da cui le proprietà (i) e (iii) per il Lemma 15.1. La proprietà (ii) è vera by costruzione. La sola proprietà lasciata da verificare è (iv). Si ponga:

$$\eta := \sup_{0\le l\le k} d_l^{-2}\delta_l^{-2}\|w_l\|_{\rho-ld,\sigma-l\delta}, \quad l=1,\ldots,k \tag{15.24}$$

Per la (15.23) e i Lemmi 15.2, 15.15, 15.16, 15.7 abbiamo

$$\eta \leq \mu_{(k)} \tag{15.25}$$

Dato che k è fisso, si può trovare $\overline{\epsilon}$ tale che $\epsilon\eta < 1/8$ for $\epsilon \leq \overline{\epsilon}$. Allora abbiamo, per $j_1 + \ldots + j_r = k+1+s$, $1 \leq j_l \leq k$:

$$\begin{aligned}\|\{w_{j_1}, \{w_{j_2} \ldots \{w_{j_r}, p_0\}_M \ldots\}_M\|_{\rho-(k+1)d,\sigma-(k+1)\delta} &\leq r![\sup_{0\leq l\leq k} d_l^{-2}\delta_l^{-2}\|w_l\|_{\rho-ld,\sigma-l\delta}]^{k+1+s} \\ &\leq r!\eta^{k+1+s} \leq r!\mu_{(k)}^{k+1+s}\end{aligned}$$

e

$$\|\{w_{j_1}, \{w_{j_2} \ldots \{w_{j_r}, f\}_M \ldots\}_M\|_{\rho-(k+1)d,\sigma-(k+1)\delta} \leq r!\eta^{k+s}$$

Quindi, per la (14.24), riscritta in modo che non richiede spiegazioni

$$\mathcal{R}^{(k+1)} = \mathcal{R}_{p_0}^{(k+1)} + \mathcal{R}_f^{(k+1)} \tag{15.26}$$

ricaviamo immediatamente la stima

$$\begin{aligned}\|\mathcal{R}_{p_0}^{(k+1)}\|_{\rho-(k+1)d,\sigma-(k+1)\delta} &\leq \sum_{s=0}^{\infty}\epsilon^s \sum_{r=2}^{k+1+s} \sum_{\substack{j_1+\ldots+j_r=k+s+1 \\ j_l\geq 1}} \eta^{k+1+s} \\ &\leq \mu_{(k)}^{k+1}\sum_{s=0}^{\infty}\epsilon^s 2^{2s}\eta^s \leq \mu_{(k)}^{k+1}\sum_{s=0}^{\infty} 4^s 8^{-s} \leq 4\mu_{(k)}^{k+1}\end{aligned}$$

e la stima analoga valida per $\|\mathcal{R}_f^{(k+1)}\|_{\rho-(k+1)d,\sigma-(k+1)\delta}$. Queste due stime concludono la dimostrazione della Proposizione.

15.6 Troncamento ottimale ed errori esponenzialmente piccoli

Dopo avere stabilito la formula (15.19), con la stima del resto enunciata nell'Asserzione (iv) della Proposizione 15.1, è possibile troncare lo sviluppo in modo ottimale (metodo di Nekhoroshev). Ciò significa che si può scegliere $k = k(\epsilon)$ in modo tale da minimizzare il resto.

Corollario 15.1 *Esiste $k = k(\epsilon)$ tale che la trasformazione unitaria $T_{k(\epsilon)} := T_\epsilon$ provoca un errore d'ordine $e^{-A/(\epsilon)^{1/(\tau+2)}}$ nelluna formula di quantizzazione (15.22), e cioè*

$$\epsilon^{(k(\epsilon)+1)}\|\mathcal{R}\|_{\rho/2,\sigma/2} \leq e^{-A/(\epsilon)^{1/(\tau+2)}} \tag{15.27}$$

Osservazioni.

1. Ancora una volta, la stima dell'errore (15.27) dipende solo da ϵ. Dunque in questo caso luna formula di quantizzazione (15.22) porge ogni autovalore finito di H a meno dell'errore (15.27), che inoltre non dipende dal numero quantico.

2. Le proprietà di decadimento nello spazio delle fasi del simbolo della perturbazione sono essenziali per l'applicabilità delluna formula di quantizzazione (15.22) a ogni sistema finito di autovalori di H. Si vedrà in seguito che quando la perturbazione non è limitata luna formula di quantizzazione porge solo gli autovalori "semieccitati". Per questa nozione, si veda la Definizione **??** qui di seguito.

3. Questo Corollario rappresenta la stima di Nekhoroshev quantistica annunciata. Essa contiene quella classico per $\hbar = 0$. In questo caso tuttavia, come si è richiamato nell'Osservazione 2 dopo la Proposizione 15.1, esiste una extra divergenza nell'ordine perturbativo che proviene dalla compensazione delle correzioni quantistiche. In altre parole, se consideriamo le equazioni di Hamilton generate dalla forma normale classicae troncata all'ordine $k(\epsilon)$ (cioè dal simbolo principale troncato all'ordine $k(\epsilon)$) la parte non integrabile, che è il resto, sarà d'ordine $e^{-A/(\epsilon)^{1/(\tau+2)}}$ per la (15.27). I moti rimarranno quasi periodici finchè il resto si può trascurare. Questo pertanto succederà per una durata temporale T d'ordine $T \sim e^{A/(\epsilon)^{1/(\tau+2)}}$, molto più breve della ben nota stima puramente classica $T \sim e^{A/(\epsilon)^{1/(\tau)}}$.

Dimostrazione Per la stima della divergenza rispetto a k dell'Asserzione (iv) della Proposizione 15.1 si può minimizzare la funzione $\epsilon^{k+1}\|\mathcal{R}\|_{\rho/2,\sigma/2}$ rispetto a k. Un calcolo immediato mostra che il minimizzante è

$$k(\epsilon) := \left(\frac{\epsilon_0\rho^\tau\sigma^2}{\epsilon}\right)^{1/(\tau+2)}$$

e che il valore del minimo è dato da (15.27) con

$$A := (\tau+2)(\epsilon_0\rho^\tau\sigma^2)^{1/(\tau+2)}$$

Questo conclude la dimostrazione del Corollario.

16 Un capitolo dimenticato della vecchia teoria dei quanti: formule di quantizzazione per i sistemi non integrabili

Si chiama vecchia teoria dei quanti (sinonimo di teoria di Bohr-Sommerfeld, o teoria semiclassica) l'insieme dei metodi in uso per calcolare gli spettri a righe (equivalentemente, spettri discreti) degli atomi e delle molecole prima del 1925, quando fu per la prima volta introdotta l'odierna meccanica quantistica. La meccanica quantistica riduce il problema al calcolo dello spettro discreto di una famiglia di operatori lineari autoaggiunti in uno spazio di Hilbert separabile; a sua volta, l'equazione di Schrödinger rese possibile la formulazione del problema come problema spettrale per un operatore differenziale, e questo reppresentò un ulteriore importante vantaggio. L'inclusione del problema spettrale della meccanica quantistica nella teoria spettrale degli operatori differenziali lineari ebbe subito un successo spettacolare, anche perché divenne molto più facile calcolare i livelli indviduali tramite approssimazioni numeriche. Questo successo relegò nell'oblio l'elegante procedimento della vecchia teoria dei quanti di ottenere le formule di quantizzazione tramite l'applicazione del postulato di quantizzazione delle azioni all'energia classica espressa come funzione delle azioni con il formalismo della meccanica analitica. Questo metodo in linea di principio era anche più potente e profondo perché permetteva di codificare l'intera informazione spettrale in una singola formula[16].

16.1 Il caso integrabile e la scelta delle variabili d'azione

La formulazione più generale e precisa delle cosiddette condizioni di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld è contenuta nella dissertazione di J.M.Burgers a Leyden nel 1918[17] [Bu].

Si consideri un'hamiltoniana $\mathcal{H}$ canonicamente integrabile tramite una trasfor-

[16]La meccanica quantistica fu oggetto di una sistematizzazione completa nei cinque anni fra il 1925, anno in cui apparve il primo lavoro di Heisenberg sulla meccanica delle matrici, e il 1930, data di uscita dei libri *Principles of Quantum Mechanics* di P.A.M.Dirac e *Mathematìschhe Grundlagen der Quantenmechanick* di J. von Neumann. L'equazione di Schrödinger apparve nel 1926. Il nome "Meccanica quantistica", traduzione inglese dell'originale tedesco "Quantenmechanik", è dovuto a Max Born, che lo coniò in analogia alla "Himmelsmechanik" (Meccanica celeste). Un ottimo riferimento per tuttciò è [VdW].

[17]Relatore: Paul Ehrenfest. Ci vollero cinque anni per sistematizzare anche la vecchia teoria dei quanti poiché il primo lavoro di Bohr uscì nel 1913.

mazione in variabili azione-angolo nel senso richiamato nel Capitolo 2.1. Per il teorema di Arnold-Liouville l'hamiltoniana trasformata $\mathcal{H}$ dipende solo dalle azioni A, $\mathcal{H} = \mathcal{H}(A)$. Il postulato di quantizzazione delle azioni significa ammettere che le azioni devono essere multipli naturali della costante di Planck h: $A_i = n_i h$. Ci sono pertanto l *numeri quantici* $n_1, \ldots, n_l \in \mathbb{N}^l$. I *livelli di energia* quantistici sono così per definizione

$$E_{n_1,\ldots,n_l} = \mathcal{H}(n_1 h, \ldots, n_l h) \tag{B.1}$$

Per la nota formula che esprime le variabili d'azione in termini di integrali della 1−forma canonica $\omega^1 = \sum_{i=1}^{l} \xi_i \, dx_i$ (B.1) è equivalente alle condizioni di Sommerfeld [18] (1916; esse furono indipendentemente formulate nello stesso anno da Max Planck e P.S.Epstein):

$$\oint \xi_i \, dx_i = n_i h \tag{B.2}$$

per tutti i sistemi completamente separabli (questi sono i sistemi per cui la corrispondente equazione di Hamilton-Jacobi ammette un integrale completo per separazione delle variabili); nel caso generale esse sono equivalenti alle condizioni di Einstein (1917)

$$\int_{\gamma_i} \sum_{i=1}^{l} \xi_i \, dx_i = n_i h \tag{B.3}$$

dove $\gamma_i : i = 1, \ldots, n$ è l'i−simo ciclo fondamentale dell'n-toro.[19] Burgers osservò in-

[18] La condizione di quantizzazione in un singolo grado di libertà

$$\oint p \, dq = n\hbar$$

fu formulata indipendentemente da A.Sommerfeld e P.Debye qualche mese prima, nell'autunno del 1915.

[19] Le formule (B.3) che esprimono le azioni in termini di integrali della 1−forma sui cicli fondamentali del toro sono alla base della prova del teorema di Liouville-Arnold (si veda [Ar], §50C). Il fatto che fossero state scoperte da Einstein molti anni prima andò completamente ignorato.

Si richiami a questo proposito che un sistema Hamiltoniano $\mathcal{H}(p,q)$ in n gradi di libertà che ammette n integrali primi globali $J_1, \ldots, J_n$ è completamente separabile se la corrispondente equazione di Hamilton-Jacobi:

$$\mathcal{H}(\nabla_q W(J_1, \ldots, J_n; q), q) = E(J_1, \ldots, J_n) \tag{B.4}$$

è integrabile per separazione completa delle variabili. Questo significa che tutte le sue soluzioni hanno la forma

$$W(J_1, \ldots, J_n; q), q) = W_1(J_1, q_1) + \ldots + W_n(J_n, q_n), \quad E = E_1(J_1) + \ldots + E_n(J_n) \tag{B.5}$$

cosicché l'equazione nonlineare alle derivate parziali (B.4) è ridotta a n equazioni differenziali ordinarie che si possono integrare per separazione delle variabili. Se le superfici $J_k(p,q) = const.$ sono compatte e senza bordo la trasformazione canonica nelle variabili azione-angolo è generata oltre che, anche se gli integrali (B.2,B.3) sono invarianti canonici (nel caso separabile e in quello generale, rispettivamente), il che fa sì che il postulato di quantizzazione delle azioni soddisfi la richiesta naturale di indipendenza dalle variabili canoniche, esiste un ulteriore ambiguità da eliminare. Le variabili d'azione non sono univocamente definite dalla trasformazione integrante. In altre parole, ci possono essere differenti insiemi di azioni per lo stesso sistema integrabile. Inoltre, ci potrebbero essere relazioni di risonanza fra le frequenze. Se esiste una relazione di risonanza il numero di azioni è (almeno localmente) minore del numero dei gradi di libertà, e potrebbe sorgere un'ambiguitànella scelta dei numeri quantici (si veda in seguito). Per eliminare l'ambiguità, Burgers osservò anzitutto che, per la formulazione stessa del postulato di quantizzazione delle azioni, le condizioni di quantizzazione $A_i = n_i h$ potevano essere soddisfatte solo da quelle variabili d'azione che soddisfano il requisito di unicità a meno di trasformazioni lineari omogeneee a coefficienti interi e determinante ± 1. Allora ci sono due casi da distinguere:

(i) Il caso non degenere, o non risonante. Questo significa, come sappiamo, che la relazione

$$\nu_1\omega_1(A) + \ldots + \nu_n\omega_l(A) = 0, \quad \nu_i \in \mathbb{Z}_i \tag{B.6}$$

ha solo la soluzione banale $\nu_1 = \ldots = \nu_l = 0$. In questo caso è sempre possibile soddisfare la condizione precedente sulle le azioni scegliendo come funzione generatrice per la trasformazione canonica in variabili azione- angolo una funzione $S(q, \phi)$ 2π-periodica in ϕ.

(ii) La relazione (B.6) ha soluzioni non banali. Questo può verificarsi per tutti gli A (risonanze intrinseche, o caso intrinsicamente degenere) o giusto per un qualche valore isolato delle azioni (risonanze accidentali, o degenerazione ac-

dalle equazioni

$$p_k = \frac{\partial W_k}{\partial q_k}, \qquad \phi_k = \frac{\partial W_k}{\partial J_k}$$

dopo le appropriate inversioni. Si osservi inoltre che la separabilità completa vale ancora se si sostituisce (B.5) con la richiesta apparentemente meno generale

$$W(J_1, \ldots, J_n; q), q) = W_1(J_1, \ldots, J_n; q_1) + W_2(J_n, \ldots, J_{n-1}; q_2) + \ldots + W_n(J_n; q_n),$$
$$E = E_1(J_1, \ldots, J_n) + \ldots + E_n(J_n).$$

La classificazione di tutti i sistemi hamiltoniani completamente separabili è uno dei problemi più classici della meccanica analitica.

cidentale)[20]. Ci potrebbero essere $1 \leq s \leq l$ relazioni razionali. Allora la risonanza si dice d'ordine s. In questo caso il procedimento è il seguente: anzitutto si eliminano canonicamente s azioni in modo tale da rendere l'hamiltoniana dipendente solo da un insieme di $l-s$ azioni (la trasformazione essendo globale nel caso instrinsico, e locale in quello accidentale). Poi si può dimostrare che quests $l-s$ azioni si possono determinare univocamente a meno di trasformazioni lineari omogeneee a coefficienti interi e determinante ± 1.

Come osservato da Born, tuttavia ([Bo], §16), ancora seguendo Burgers, la nonambiguità nella scelta delle variabili d'azione è solo uan condizione necessaria affinché le condizioni di quantizzazione $A_i = n_i h$ abbiano senso. Bisogna supplementarle con un requisito ulteriore: esse non devono subire variazioni rispetto a una lenta dipendenza dal tempo del sistema, perché nessun sistema meccanico concreto si può considerare completamente isolato dall'effetto di forze esterne. La scelta delle azioni ricordata sopra definirà allora condizioni di quantizzazione significative sempreché si possa dimostrare che esse sono *invarianti adiabatici*. Anche questo aspetto è stato chiarificato da Burgers, che ha provato che le variabili d'azione sono in realtà invarianti adiabatici, sempreché loro lenta variazione non dia origine a nuove risonanze.

Dopo avere chiarificato la questione della condizioni di quantizzazione per i sistemi integrabili, rivolgiamoci ora a quelli non-integrabili.

16.2 Il caso non integrabile: quantizzazione della forma normale

Sembra che sia stato Bohr la prima persona, nel 1918, a suggerire di applicare la teoria canonica delle perturbazioni al problema di calcolare i livelli di energia dei sistemi non integrabili. Questa idea di Bohr fu sistematicamente perseguita da Born e dalla sua scuola (Brody, Boguslavski, Heisenberg) e da Epstein. Il riferimento fondamentale è ancora il trattato di Born, che in questo aspetto è direttamente ispirato al trattato di Poincare[Po]. Il procedimento è un'applicazione diretta della teoria

[20] Esempio di sistema non degenere:gli oscillatori armonici $\mathcal{K}(A) = \omega_1 A_1 + \ldots \omega_n A_l$ con frequenze incommenusurabili $\omega_1, \ldots, \omega_n$. Esempio di un sistema intrinsicamente degenere: gli oscillatori armonici con frequenze commensurabili, oppure l'atomo di idrogeno (equivalentemente, il problema di Kepler a due corpi) $\mathcal{K}(A) = -\text{const}/(A_1 + A_2 + A_3)^2$. Esempio di un sistema accidentalmente degenere: il rotatore (pendolo) $\mathcal{K}(A) = (A_1^2 + \ldots + A_n^2)/2$. La degenerazione intrinsica e accidentale delle risonanze in meccanica classica comporta la degenerazione instrinsica e accidentale dei livelli quantistici corrispondenti.

canonica delle perturbazioni. Anzitutto si considerano solo hamiltoniane $H(x,\xi;\lambda)$ chedipendono analiticamente da un parametro λ:

$$H(x,\xi;\lambda) = H_0(x,\xi) + \lambda H_1(x,\xi) + \lambda^2 H_2(x,\xi) + \ldots$$

Qui si assume che la serie converga per (x,ξ) in qualche aperto di $\mathbb{R}^{2n}$ e che H_0 sia integrabile per separazione completa delle variabili. Se questo è il caso le variabili azione-angolo (J,θ) di H_0 si possono esplicitamente calcolare, e l'hamiltoniana $H(x,\xi;\lambda)$ si può canonicamente riscrivere nella forma seguente (si noti l'abuso di notazione)

$$H(J,\theta;\lambda) = H_0(J) + \lambda H_1(J,\theta) + \lambda^2 H_2(J,\theta) + \ldots$$

La teoria canonica delle perturbazioni parte da questa espressione, e in molti casi concreti si può assumere $H_l = 0$, $l \geq 2$. Sia nel caso non risonante (Poincaré-Lindstedt) che in quello risonante oe[21] (Poincaré-Bohlin) l'algoritmo della teoria canonica delle perturbazioni genera la forma normalee di $H(x,\xi;\lambda)$, e cioè l'hamiltoniana

$$\mathcal{K}(A) = \mathcal{K}_0(A) + \lambda\mathcal{K}_1(A) + \lambda^2\mathcal{K}_2(A) + \ldots, \quad \mathcal{K}_0(A) = H_0(A) \tag{B.7}$$

dove le variabili d'azione A sono definite senza ambiguità qualora quelle del sistema integrabile $\mathcal{K}_0(A)$ lo siano.[22]

Allora la prescrizione per calcolare i livelli di energia è semplicemente applicare le condizioni di quantizzazione $A_i = n_i h$ alla forma normale (B.7). Questo porge, con $n = (n_1, \ldots, n_l)$:

$$E_n(\hbar) = \mathcal{K}(n_1 h, \ldots, n_l h) = \mathcal{K}_0(n_1 h, \ldots, n_l h) + \lambda\mathcal{K}_1(n_1 h, \ldots, n_l h) + \ldots \tag{B.8}$$

Ovviamente sorge il problema della convergenza di questo procedimento. Born è ben consapevole della divergenza della serie (dovuta al famoso teorema di Poincaré

[21] In questo caso si deve fare l'ulteriore ipotesi che anche H_1, una volta riespresso come funzione delle $l-s$ variabili azione-angolo rilevanti, è integrabile per separazione completa delle variabili.

[22] Si noti che il requisito sull'hamiltoniana non perturbata è strettamente più forte dell'integrabilità. Come si è ricordato la separabilità completa riduce il problema essenzialmente ad un un singolo grado di libertà e quindi rende sempre possibile la costruzione esplicita delle variabili azione-angolo. Questa conoscenza esplicita è una condizione necessaria per cominciare qualsiasi calcolo perturbativo che possa dar luogo ad espressioni esplicite per i livelli di energia perturbati che servono per confrontare i risultati con i dati sperimentali. All'epoca non erano noti esempi di sistemi integrabili e non separabili per cui si potessero esplicitamente determinare le variabili azione-angolo. A mio parere[Gr] questo spiega perchè il lavoro di Einstein del 1917 sia stato completamente ignorato dai contemporanei: non aveva alcuna importanza per il calcolo effettivo delle righe spettrali.

che asserisce la non-esistenza di integrali uniformi diversi dall'hamiltoniana stessa), e semplicemente trasporta a questo caso la discussione di Poincaré([Po], Chapt.VIII) sulla natura asintotica della serie delle perturbazioni , asserendo, con Poincaré, che in ultima analisi quello che conta è il confronto con le osservazioni.

Un'applicazione notevole di questo procedimento da parte di Born e Brody agli oscillatori anarmonici dette ottimi risultati nello spiegare le deviazioni dalla legge di Hooke dell'elasticità lineare nella vecchia teoria dei quanti dello stato solido e per i coefficienti della dilatazione termica dei solidi; altri calcoli (P.S.Epstein) riprodussero con grande precisione le righe spettrali dell' effetto Zeeman normale.

Tuttavia l'applicazione all'atomo di elio costuituì il fallimento decisivo della vecchia teoria dei quanti stessa. In questo caso l'hamiltoniana è lo stessa del problema dei tre corpi della meccanica celeste. Denotando infatti e e Z le cariche dell'elettrone e del nucleo, rispettivamente, m la massa dell'elettrone , $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$, $\mathbf{r}_2 = (x_2, y_2, z_1)$ le coordinate dei due elettroni, $\mathbf{p}_1, \mathbf{p_2}$ gli impulsi coniugati corrispondenti, e assumendo il nucleo di massa infinita, l'hamiltoniana è

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2) - Ze\left(\frac{1}{\|\mathbf{r}_1\|} + \frac{1}{\|\mathbf{r}_2\|}\right) + \frac{e^2}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|}$$

Questa hamiltoniana è quasi integrabile; il termmine di perturbazione è la repulsion fra gli elettroni con $\lambda = e^2$, piccolo rispetto a Ze. Per $\lambda = 0$ si ritrova il sistema integrabile formato due due atomi di idrogeno indipendenti. Born e Heisenberg calcolarono la forma normale fino al secondo ordine incluso (B.7)[23]; applicando le regola di quantizzazione trovarono un marcato disaccordo con le osservazioni (per esempio, l'energia dello stato fondamentale dell' ortoelio e quella del paraelio erano sbagliate di un ordine di grandezza).

La conclusione di Born (scritta presumibilmente verso la fine del 1924) era che la vecchia teoria dei quanti poteva rendere conto, al meglio, degli spettri degli atomi con solo un elettrone. Per sistemi più complicati occorreva qualcosa di diverso. [24].

---

[23]Rendendo più espliciti molti calcoli già esistenti in meccanica celeste. Si noti che questo calcolo è molto impegnativo perché anche se l'espressione dell'hamiltoniana non perturbata come funzione delle variabili d'azione è esplicitamente nota, questo non è il caso per la trasformazione canonica che trasforma biunivocamente le coordinate polari nelle variabili azione-angolo. Pertanto la scrittura della perturbazione in termini di queste variabili è un classico compito molto complicato, e richiede gli sviluppi in piccola eccentricità.

[24]Born era ovviamente ben consapevole dell'inconsistenza interna della vecchia teoria dei quanti. Dopo avere osservato che essa condraddice l'evidenza sperimentale nel caso dell'atomo di elio, ag-

Come abbiamo già richiamato, ci vollero solo pochi mesi per intraprendere il nuovo passo audace (la scoperta della meccanica delle matrici da parte di Heisenberg risale al giugno 1925: si veda [VdW][25]). Può essere interessante notare che l'idea radicalmente nuova di Heisenberg fu l'introduzione di un accoppiamento fra i differenti modi di Fourier, che si muovono indipendentementel'uno dall'altro e quasi-periodicamente quando il sistema è integrabile, e rimangono indipendenti anche dopo l'imposizione delle condizioni di quantizzazione. Ci sono infiniti modi di Fourier, cosicché per realizzare questo accoppiamento fu costretto a introdurre una matrice infinita[26]. L'accoppiamento fra i differenti modi di Fourier quantizzati di un sistema integrabile equivaleva ad abbandonare l'idea della foliazione in tori invarianti e rappresentò il secondo, definitivo distacco dalla meccanica classica (il primo essendo la quantizzazione delle azioni).

Un altro punto da commentare è il perchè sia consueto oggi porre $A = (n+1/2)\hbar$ nelle regole di quantizzazione di Bohr-Sommefeld mentre la formulazione originale è invece $A = n\hbar$. Il fattore $\hbar/2$ è puramente quantistico, cioè proviene dalla soluzione dell'equazione di Schrödinger per l'oscillatore armonico come un fattore additivo ai livelli di Bohr-Sommerfeld $n\hbar$. Nel caso generale ad una dimensione esso è l'indice di Maslov [Mas] che rappresenta la prima correzione alle regole di quantizzazione semiclassiche. Equivalentemente, l'approssimazione WKB richiede la seguente regola di quantizzazione

$$\oint p\, dq = (n+1/2)\hbar.$$

giunge: *Dies ist nicht verwunderlich. Denn in Grund sind die benutzten Prinzipien nicht in sich konsequent. Während bei der Beschreibung der Wechselwirkung des Atoms mit der Strahlung in der BOHRschen Frequenzbedingung an die Stelle der klassichen Differentialgesetzes ein Differenzengesetz tritt, wird bei der Wechselwirkung mehrerer Elektronen bisher noch mit die klassichen Differentialgesetzen operiert. Die sistematische Verwandlung der klassischen Mechanik ins eine diskontuierliche Atommechanik ist das Ziel, dem die Quantentheorie zustrebt* Traduzione: Questo non è sorprendente. Infatti in fondo i principi utilizzati non sono consistenti. Mentre nella descrizione dell'interazione della'atomo con la radiazione si introduce con la condizione delle frequenze di Bohr una legge alle differenze finite al posto della legge differenziale classica, nel caso dell'interazione fra più elettroni si opera ancora con la legge differenziale classica. La mutazione sistematica della meccanica classica in una teoria discontinua è lo scopo verso il quale deve tendere la teoria quantistica

[25]Anche se la tesi di DeBroglie sulle onde di materia era apparsa già in 1924, questa idea rivoluzionaria fu trasformata in uno strumento quantitativo solo con l'equazione di Schrödinger nel 1926.

[26]In realtà fu Born a capire che le munipolazioni algebriche introdotte da Heisenberg per accoppiare i differenti modi di Fourier quantizzati altro non erano che la regola di moltiplicazione delle matrici.

Nel caso discusso in questo corso, e cioè la forma normale attrono a un minimo globale quadratico non degenere, in cui il problema non perturbato è l'oscillatore armonico, la quantizzazione WKB $E_n = (n + 1/2)\hbar$ è esatta e pertanto rappresenta la condizione di quantizzazione corretta da assumere.

Bibliography

[Ar] V.I.Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer-Verlag 1978

[Ba1] D.Bambusi, *Uniform Nekhoroshev estimates on quantum normal forms.* Nonlinearity **8** 93-105 (1995).

[Ba2] D.Bambusi, *Exponential Stability of Breathers in Hamiltonian Networks of Weakly Coupled Oscillators*,

[Bar] V.Bargmann, *On a Hilbert Space of Analytic Functions and an Associated Integral Transform*, Commun.Pure Applied Math. **14** (1961), 433–457

[BGP] D.Bambusi, S.Graffi, T.Paul, *Quantum Normal Forms and Quantization Formulae*, Commun.Math.Phys. **9** (1999), 433–457

[Bo] M.Born, *The Mechanics of the Atom* , Bell, London 1960, traduzione di *Vorlesungen über Atommechanik*, Springer-Verlag 1925

[Bu] J.M.Burgers, *Het Atoom vun Rutherford-Bohr*, Dèsertation, Universitet Leyden, Haarlem 1918

[BS] F.A.Berezin e M.S.Shubin, *The Schrödinger Equation*, Kluwer 1991

[BV] J.Bellissard, M.Vittot, *Heisenberg Picture and non Commutative Geometry of Classical Limit in Quantum Mechanics.* Ann. Inst. H. Poincaré, **52**, (1990), 175-235

[Ca] J.Cary, *The method of the Lie transformation*

[CDS] J.M.Combes, P.Duclos, R.Seiler, *The Born-Oppenheimer Approximation*, in NATO ASI Series B 72, Plenum, New York 1981, 363-391

[Ch] J.Chazarain, *Spectre d'un Hamiltonien quantique et mechanique classique* Commun.Part.Diff.Equations **5**, 1980

[DeP] J.DePrit, *Spectre d'un Hamiltonien quantique et mepuòicque classique* Commun.Part.Diff.Equations **5**, 1980

[DGH] M.Degli Esposti, S.Graffi, J.Herczynski, *Exact quantization of the classical lie algorithm* Ann.Phys.(N.Y.) **208**, (1991), 363-391

[Eg] YU.V.EGOROV, *Canonical transformations of pseudodifferenzial operators*, Truns.Moscow Math.Soc. **24** (1971), 1-24

[Ei] A.EINSTEIN, *Über die Quantelungsatz von Sommerfeld e Epstein* Verhelungen der Deutschen Physikalèchen Gesellschaften **208**, (1917), 363-391

[Fo] G.FOLLAND, *Harmonic analisi in spazio delle fasi*, Princeton University Press 1988

[BGGS] G.BENETTIN, L.GALGANI, A.GIORGILLI, J.M.STRELCZYN, *Harmonic analisi in spazio delle fasi*, Princeton University Press 1988

[Gi] A.GIORGILLI, *Rigorous results on the power expansions for the integrals of a hamiltonian system* Ann. Inst. H. Poincaré, **48** 423–439 (1988).

[Ga] G.GALLAVOTTI, *Harmonic analysis in phase space*, Princeton University Press 1988

[GLS] A.GROSSMANN, G.LOUPIAS, E.M.STEIN, *An algebra of pseudodifferenzial operators and quantum mechanics in phase space*, Ann.Inst.Fourier **18** (1968), 343-368

[GP] S.GRAFFI, T.PAUL, *The Schrödinger equation and canonical perturbation theory*, Commun.Math.Phys. **108** (1987), 25-40

[Gr] S.GRAFFI, *Le radici della quantizzazione*, Quaderni di Fèica Teorica dell'Università di Pavia, Pavia 1995

[He] B.HELFFER, *$h-$pseudodifferential operators and applications: an introduction*, Lectures at IMA: Quasiclassical methods (1995)

[Hö] L.HÖRMANDER, *The theory of linear partial differential operators*,Springer-Verlag

[Hor] M.HORI, *La teoria of linear partial operatore differenzialeeees*,Springer-Verlag

[HS] B.HELFFER, J.SIÖSTRAND, *Multiple wells in the semiclassical limit*, Commun.Partial Differential Equations **9** (1984), 337-408

[Ka] T.KATO, *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer-Verlag 1966-1976

[KN] J.J.KOHN, L.NIRENBERG, *An algebra of pseudodifferenzialoperators*, Comm.Pure Applied Math. **18** (1965) 269-305

[Ma] A.MARTINEZ, *Microlocal Exponential Estimates and Applications to Tunneling*,in NATO ASI Series C 490, Kluwer 1997, 349-378

[Mar] A.MARTINEZ, *An Introduction to Semiclassical Microlocal Analysis*, Dipartimento di Matematica, Universitá di Bologna, February 2000

[Mas] V.P.MASLOV, *Théorie des perturbations et méthodes asymptotiques*, Dunod, Parè 1972

[Mo] J.E.Moyal *Quantum mechanics as a statistical theory.* Proc. Cambdridge Phil.Soc. **45** (6) 99-14 (1949)

[Ne] N.N.Nekhoroshev *Exponential estimate of the stability time of near integrable Hamiltonian systems.* Russ. Math. Surveys. **32** (6) 1-65 (1977)

[Po] H.Poincaré , *Méthodes Nouvelles de la mécanique celeste*, Vol.I, CHapt.VIII. Gauthier-Villars, Parè 1892

[Pp] V.Popov, *Invariant tori effective stability and quasimodes with exponentially samll terms*, Ann.Insti.H.Poincaré

[Ro] D.Robert, *Autour de l'approximation semiclassique*, Birkhäuser, Basel 1987

[RS] M.Reed e B.Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Vol.IV*, Academic Press 1978

[Sh] M.A.Shubin, *Pseudodifferential operators and spectral theory*, Ann.Inst.H.Poincaré **38B** (1983), 295-307

[Si] B.Simon, *Semiclassical analysis of low-lying eigenvalues, I*, Ann.Inst.H.Poincaré **38B** (1983), 295-307

[So] A.Sommerfeld, *The constitution of the atom and the spectral lines* (English traslation of *Atombau e Spektrallinien*, Ann.Inst.H.Poincaré **38B** (1983), 295-307

[Sj] J.Siöstrand, *Semi-excited levels in non-degenerate potential wells*, Asymptotic Analysis **6** (1992), 29-43

[St] M.H.Stone, *Linear transformations in Hilbert space III: operational methods and group theory*, Proc.Nat.Acad.Sciences U.S.A. **16** (1930), 172-175

[VdW] B.L.Van der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics, Voll.I e II*, Dover, New York 1965

[VH] L.Van Hove, *Über die Eindeutigkeit der Schöderschen Operatoren*, Math.Ann. **104**, 570-578

[VN] J. Von Neumann, *Über die Eindeutigkeit der Schöderschen Operatoren*, Math.Ann. **104**, 570-578

[Vo] A.Voros, *An Algebra of Pseudodifferential Operators and the Asymptotics of Quantum Mechanics*, J.Funct.Anal. **29**, 104-132 (1978)

[We] H.Weyli, *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*, Dover, NeW York 1950; English translation of *Gruppentheorie und Quantemechanik*, 1927

[Wi] E.P.Wigner, *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium*, Phys.Rev. **40** (1932), 749-759