

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI BOLOGNA

FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE FISICHE NATURALI

Corso di laurea in Fisica

SULLA NOZIONE QUANTISTICA
DI ERGODICITÀ

Tesi di Laurea

Presentata da:

Marco Lenci

Relatore:

Chiar.mo Prof. Sandro Graffi

Sessione Estiva
Anno Accademico 1992/93

INDICE

0. INTRODUZIONE	3
1. NOZIONI PRELIMINARI DI TEORIA ERGODICA	8
2. DALLA QUANTIZZAZIONE DI BOHR-SOMMERFELD AGLI OPERATORI PSEUDO-DIFFERENZIALI	30
3. LE DEFINIZIONI DI VON NEUMANN	62
4. RICERCA DI UNA NUOVA DEFINIZIONE	66
5. IL LIMITE CLASSICO "SUL TORO"	71
6. LIMITE CLASSICO DELLA FORMULA DI VON NEUMANN	83
7. CONCLUSIONI E PROSPETTIVE	89
8. RINGRAZIAMENTI	95
9. BIBLIOGRAFIA	96

0. INTRODUZIONE

La crescente attenzione della comunità scientifica verso quelli che vengono definiti *fenomeni caotici* ha portato ad uno studio sempre più approfondito, nell'ambito della teoria dei sistemi dinamici, delle caratteristiche di quella classe di sistemi che meritano, sotto diverse forme e in diversi modi, l'appellativo di sistemi caotici.

Il termine *caos* fa parte di quella schiera di termini del linguaggio di un fisico che vengono comunemente adottati da molti, non senza abuso, e sui quali c'è un sostanziale accordo di significato. Nonostante questo, però, è difficile dare una definizione precisa di quello che si intende e dei campi della fisica e della matematica che sono oggetto di studio del fenomeno del caos. Si parla di caos nelle più svariate discipline: dalla fluidodinamica all'ingegneria strutturale passando per la chimica-fisica o per la teoria dei numeri, e non sempre si intravede un comun denominatore fra questi diversi studi se non per il fatto che si stanno trattando argomenti complessi sui quali si sa dire poco o nulla.

Per evitare questa dispersione di concetti, ci limiteremo al caso dei *sistemi deterministici caotici*, che sono l'astrazione operata dalla fisica matematica di quanto succede nella fisica, o meglio, nella meccanica. Per essere brevi, anche perché queste cose hanno subito una tale pubblicità da essere note a tutti, un sistema deterministico viene detto caotico quando, sebbene teoricamente possibile, non si riesce a seguire la sua evoluzione nel tempo; e questo per motivi intrinseci al sistema stesso e non imputabili alla imprecisione degli strumenti del fisico sperimentale o al fatto che un certo fenomeno si presenta sempre accoppiato ad altri fenomeni che ne impediscono lo studio isolato (rumore di fondo).

Esempi ben noti di questo tipo di sistema sono ad esempio l'attrattore strano di Lorenz, che compare in un sistema di tre equazioni differenziali non lineari del primo ordine, equazioni derivate nel campo della fluidodinamica; il biliardo, la cui evoluzione per tempi nemmeno troppo lunghi varia in maniera sensibilissima con le condizioni iniziali, o anche il moto su una superficie a curvatura dappertutto negativa (vedi [BV] per il caso particolare

della pseudosfera) che è, anche se non è possibile vederla in uno spazio euclideo tridimensionale, una superficie dove ogni punto è un punto di sella.

Da un punto di vista più teorico che applicativo gli sforzi si sono concentrati soprattutto sul riconoscimento dei diversi tipi di caoticità che un sistema può presentare e quindi sulla classificazione di un vastissimo insieme di sistemi, dai più astratti a quelli, viceversa, più direttamente legati all'esperienza fisica, secondo quelle caratteristiche.

La prima, per molti aspetti, di queste caratteristiche prende il nome di *ergodicità*. Essa, come vedremo meglio in seguito, è la propensione di un dato sistema a perdere memoria, evolvendo nel tempo, del proprio stato iniziale. La definizione di ergodicità, così come viene presentata attualmente, è dovuta a Boltzmann, che se ne servì per lo studio di sistemi fisici con un gran numero di gradi di libertà.

Curiosamente, ma nemmeno tanto, una gran mole delle nozioni che ora sono i fondamenti della recente teoria del caos provengono proprio dalla rilettura attenta di lavori classici di meccanica statistica. Infatti il vero motivo ispiratore della teoria dei sistemi caotici è l'aver capito che non è necessario prendere in considerazione sistemi deterministici complessi (molti gradi di libertà, oggettiva complessità delle leggi che ne regolano l'evoluzione) per poter parlare di "imprevedibilità"; bastano sistemi apparentemente semplici per mettere in crisi colui che incautamente abbia la pretesa di saper predire il loro stato per lunghi periodi di tempo. Di conseguenza si possono utilizzare, fatte salve le dovute differenze, strumenti analoghi per descrivere, ad esempio, un volume macroscopico di gas ideale o un biliardo di Sinai (vedi [S]).

Tale presa di coscienza ha costretto gli studiosi del caos a rivalorizzare quanto era già stato detto, dai maestri del passato, in campi apparentemente distanti; e questo al prezzo, alle volte, di non seguire altri argomenti più recenti o "di moda".

Questo è quanto è capitato a me che, pur non avendolo esplicitamente voluto, sono stato completamente assorbito, come dirò meglio in seguito, dallo studio di un lavoro di Von Neumann [VN] intitolato: "*Sulla condizione di ergodicità e sul teorema H nella nuova meccanica*", che è poi la meccanica

quantistica.

Ritornando al discorso generale, una disciplina di interesse molto recente è quella che va sotto il nome di *caos quantistico*. Si tratta, in poche parole, di tradurre nella meccanica quantistica le nozioni ormai acquisite della teoria del caos deterministico. Nulla di più complicato, visto che la meccanica dei quanti è per sua natura non-deterministica. Le linee di indagine possono essere schematizzate in due categorie diverse e quasi dicotomiche:

- 1) trovare nella dinamica quantistica quelle proprietà che possono essere pensate come controparte delle proprietà caotiche classiche,
- 2) partire dalla meccanica classica e studiare come certe "tracce" di caos si riflettano nel sistema quantistico associato ad un dato sistema classico.

Storicamente si è partiti dall'approccio 1) che è quello seguito da Von Neumann nel lavoro già citato o, per esempio, più recentemente, da [BL], ma poi ci si è accorti che il filone 2) era decisamente più fruttifero e che, probabilmente, per dirla in maniera molto profana, "il caos sta nella parte classica di un sistema". Tutti i lavori recenti citati nella bibliografia esprimono più o meno chiaramente questa convinzione ed è decisamente eloquente, come si trova scritto nella prefazione di [GVZ], che la scuola estiva di Les Houches del 1989 sia stata intitolata "Chaos and Quantum Physics" e non "Quantum Chaos". Sempre dagli atti di quei corsi riporto un significativo passaggio di Balazs.

"Nel 1925 Dirac fece la seguente osservazione.

"In un recente lavoro Heisenberg presenta una nuova teoria, che suggerisce che non sono le equazioni della meccanica classica ad essere in qualche modo errate, ma che le operazioni matematiche dalle quali si deducono i risultati fisici vanno modificate. Tutte le informazioni fornite dalla teoria classica possono perciò essere usate nella nuova teoria".

Questo suggerirebbe che dovremmo essere in grado di far uso, in qualche modo, dei risultati già ottenuti nella dinamica classica. Comunque, siamo fortemente impediti dal fatto che Dirac si riferisce alla somiglianza delle strutture algebriche della dinamica classica e di quella quantistica, e non alle somiglianze latenti nelle soluzioni. Tutti i risultati importanti della

dinamica classica sono affermazioni che si riferiscono a proprietà visibili nello spazio di fase che semplicemente non esiste in meccanica quantistica, e non c'è un unico o anche un miglior sostituto per esso.

Perciò non sappiamo come trasferire alla teoria quantistica le idee classiche così essenziali nel descrivere il comportamento caotico. La costante di Planck entra in tre differenti posti: nella non-commutatività degli osservabili, nella specificazione dello stato di un sistema, e nell'evoluzione temporale del sistema. Questo sconvolge completamente lo schema che era risultato così utile in dinamica classica. Una osservazione, comunque, può essere fatta immediatamente. Se il comportamento classicamente caotico si manifesta attraverso la crescente complessità del moto espresso attraverso la sempre più fine struttura del flusso di fase, allora non si avrà presenza di caos, poiché nessuna struttura classica, secondo le regole della teoria dei quanti, ha senso all'interno di una cella di fase.

[...]

Questo ci porta alla domanda più fondamentale che affronteremo: su che osservabili e con quali mezzi uno può in generale scoprire che al limite classico un sistema dinamico gode di certe proprietà? (Per esempio, siccome l'evoluzione temporale dello stato è quasiperiodica, il comportamento asintotico per tempi lunghi, di per sé, non accoppiato a qualche processo di limite, non è uno strumento utile per scoprire il comportamento caotico.)”

Il compito che mi è stato assegnato come tesi di laurea era quello di chiarire, nei limiti di quello che un laureando riesce a fare, cosa si deve intendere per *ergodicità quantistica*. Nel mio lavoro di ricerca ho ripercorso in piccolo le tappe che della storia della teoria del caos e della sua discendente, la teoria del caos quantistico.

Infatti, come si leggerà, ho provato dapprima a dare una caratterizzazione brutale di ergodicità quantistica, traducendola in modo diretto e senza troppe finzze formali dalla corrispondente nozione classica; mi sono poi accorto, tanto per sottolineare che ”tutto o quasi è già stato detto da qualche grande prima di te”, che quello che io riuscivo a dire era già contenuto nel già citato lavoro di Von Neumann. Allora mi sono messo a studiare quello che lui aveva scritto per capire dove la sua definizione di ergodicità fallisse:

ben presto, come si troverà chiarito più avanti, ho dovuto anch'io passare dall'approccio di tipo 1), visto sopra, all'approccio 2). La parte principale di questo scritto consiste proprio nello sviscerare le caratteristiche semiclassiche della formula di Von Neumann, allo scopo di capire quando e come questa si riconduce alla formula classica di Boltzmann.

1. NOZIONI PRELIMINARI DI TEORIA ERGODICA

Ci occupiamo in questo contesto di definire oggetti matematici adatti a fornire un modello ove verificare il comportamento caotico od imprevedibile di sistemi provenienti dalla fisica o da una sua astrazione. Questi oggetti matematici sono i sistemi dinamici e le caratteristiche che li rendono più o meno non predicibili vengono dette *proprietà statistiche o caotiche del sistema*¹. Le cose qui riportate sono da confrontarsi massimamente con quanto si trova nei primi capitoli di [AA], forse il migliore manuale in circolazione per lo studio della della teoria ergodica.

Definizione 1.1 (SISTEMA DINAMICO CLASSICO). *Sia M una varietà regolare; μ una misura di probabilità² definita su M ; $G^t : M \rightarrow M$ un gruppo ad un parametro di diffeomorfismi che conservano la misura. La terna (M, G^t, μ) viene detta sistema dinamico classico.*

Il gruppo è generalmente additivo nei confronti del suo parametro, cioè

$$G^{s+t} = G^s \circ G^t. \quad (1.1)$$

da cui

$$G^0 = \mathbb{I}, \quad G^{-t} = (G^t)^{-1}. \quad (1.2)$$

Il parametro t può essere un numero reale (*sistema dinamico continuo*) o intero (*sistema dinamico discreto*).

Se $t \in \mathbb{R}$, il gruppo è generalmente definito come il gruppo delle soluzioni di un'equazione differenziale autonoma (cioè avente campo vettoriale indipendente dal tempo) del tipo

$$\dot{x}_i = f_i(x_1, \dots, x_n); \quad i = 1, \dots, n = \dim M, \quad (1.3)$$

¹ La scelta fra i due aggettivi ("statistiche" o "caotiche"), di per sé non influente, è determinata in massima parte dal campo di interesse dello studioso che viene ad occuparsi di queste cose: i meccanici statistici useranno preferibilmente il primo aggettivo mentre i ricercatori in teoria dei sistemi dinamici il secondo.

² Misura di probabilità significa che $\mu(M)=1$.

dove le x_i sono coordinate locali su M e $f : M \rightarrow TM_x$ è un campo vettoriale tangente alla varietà.

Se $t \in \mathbb{Z}$, G^t è il gruppo discreto generato dal diffeomorfismo $G = G^1$. In questo caso si suole indicare il sistema semplicemente come (M, G, μ) ove G , conservando la misura μ , viene detto l' *automorfismo* del sistema dinamico.

L'esempio principale di sistema dinamico continuo, quello su cui si baserà l'intera nostra discussione, è il *flusso hamiltoniano* che nel caso più semplice viene definito su \mathbb{R}^{2n} avente coordinate $(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n) \equiv (\mathbf{q}, \mathbf{p})$. Se $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ è una funzione regolare su \mathbb{R}^{2n} , il sistema è definito dal gruppo di soluzioni delle equazioni di Hamilton:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \end{cases} \quad (1.4)$$

Il flusso hamiltoniano conserva la misura ordinaria (di Lebesgue) in \mathbb{R}^{2n} perchè la divergenza del suo campo vettoriale è nulla:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(-\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \right) = 0. \quad (1.5)$$

Questo permette di applicare il

Teorema 1.2 (LIOUVILLE). *Il gruppo delle soluzioni dell'equazione differenziale definita per $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$*

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

conserva la misura di Lebesgue se

$$\operatorname{div} \mathbf{f} = 0.$$

La dimostrazione di questo teorema si può trovare in qualsiasi manuale di meccanica razionale.

Il ruolo della varietà M della definizione 1.1 sarà svolto dalla superficie di livello della funzione di Hamilton (che rappresenta l'energia); la indicheremo con $M_E \equiv \{(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in \mathbb{R}^{2n}; H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E\}$. Naturalmente E va scelta

in maniera tale che la M_E sia regolare, cioè si deve avere $\mathbf{grad} H \neq 0$ su ogni punto della varietà. È poi ovvio che il flusso hamiltoniano sia un diffeomorfismo da M_E in sé, visto che H è una costante del moto. Dalle (1.4):

$$\dot{H} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \cdot \left(-\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \right) = 0. \quad (1.6)$$

Adesso, se vogliamo completare la definizione del sistema dinamico hamiltoniano, (M_E, G^t, μ) dobbiamo trovare la misura μ invariante per il flusso:

Corollario 1.3 . *La misura*

$$d\mu = \frac{d\sigma}{|\mathbf{grad} H|}$$

definita su M_E ($d\sigma$ è la misura di superficie indotta dalla misura di Lebesgue) è invariante per il flusso di Hamilton. ³

È importante notare, anche per capire bene ciò che scrisse Von Neumann, che se abbiamo, diciamo, $k > 1$ costanti del moto (integrali primi) I_1, \dots, I_k , il flusso è confinato su una varietà $(2n - k)$ -dimensionale del tipo $M_{a_1, \dots, a_n} \equiv \{(\mathbf{q}, \mathbf{p}); I_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = a_1, \text{ ecc.}\}$. In questo caso si può definire una misura invariante su M_{a_1, \dots, a_n} e usare quest'ultima varietà per definire il nostro sistema dinamico classico, oppure si può decidere che la varietà "di lavoro" resti comunque M_E : questa scelta è determinante, come vedremo, per stabilire le proprietà stocastiche di un determinato sistema hamiltoniano.

Prima di dare la definizioni di queste proprietà, così come le conosciamo ora, passiamo, per completezza, a dare una definizione più generale di sistema dinamico, che sia svincolata dal concetto di varietà regolare e di diffeomorfismo.

Definizione 1.4 (SISTEMA DINAMICO ASTRATTO). *Sia (M, μ) uno spazio di probabilità e sia G^t un gruppo di automorfismi (mod 0)* ⁴ *su*

³ Si deve notare che l'energia E , oltre al vincolo sulla regolarità della M_E , è soggetta ad un'altra restrizione. Infatti essa va presa in maniera tale che la M_E sia limitata, affinché la misura definita dal corollario 1.3 sia una misura di probabilità.

⁴ Questi oggetti sono definiti, per esempio, in [AA] Appendice 6, o, più diffusamente, in [Ma].

(M, μ) , che dipenda in maniera misurabile da t . (M, G^t, μ) viene detto sistema dinamico astratto.

È il caso di dare ora un teorema che non riguarda l'aspetto caotico dei sistemi dinamici, anzi ne sottolinea in qualche modo l'ordine. È però così importante che non può essere ignorato; inoltre verrà richiamato in seguito.

Teorema 1.5 (POINCARÉ). *Siano dati $A \subseteq B \subseteq M$ con $\mu(A) > 0$ tali che $G^\tau(A) \cap B = \emptyset$ per un certo $\tau > 0$ (queste relazioni vanno interpretate mod 0). Allora esiste $t > \tau$ tale che $G^t(A) \cap B \neq \emptyset$.*

Definiamo $A^n \equiv G^{n\tau}(A)$. Per assurdo neghiamo l'asserto. Avremo che $A^n \cap A = \emptyset \forall n$, da cui $A^n \cap A^m = \emptyset \forall n \neq m$. Ma $\bigcup_{n=0}^{\infty} A^n \subseteq M$ per cui $\sum_{n=0}^{\infty} \mu(A^n) = \sum_{n=0}^{\infty} \mu(A) \leq 1$ che implica $\mu(A) = 0$, negando così una delle ipotesi.

Questo è il teorema che in qualche modo si contrappone alle proprietà di disordine dei sistemi dinamici, infatti esso sostanzialmente afferma che il sistema ritornerà quantosivoglia vicino al suo stato iniziale. Questo per lungo tempo ha disorientato gli statistici che vi vedevano una impossibilità di rilassamento di un sistema ad un equilibrio: di fatto ora si sa che le due cose coesistono nel senso che il sistema ritorna alle sue condizioni iniziali dopo tempi (i cosiddetti tempi di ricorrenza di Poincaré) incomparabili rispetto ai tempi di osservazione sperimentali.

Siamo ora pronti per affrontare il nocciolo del problema: partiamo proprio dalla prima forma di imprevedibilità che un sistema dinamico può presentare: l'ergodicità, appunto.

Abbiamo detto nella prefazione che l'ergodicità è la proprietà di quei sistemi che tendono a "dimenticare" la loro configurazione iniziale. Ciò può essere spiegato più chiaramente in questo modo: indipendentemente dallo stato che il sistema presenta al tempo $t = 0$, esso tenderà ad approssimare tutti gli stati compatibili con i suoi integrali primi del moto. Abbiamo detto che questi concetti sorsero con la meccanica statistica di Boltzmann e dei suoi contemporanei: ebbene, ciò che a loro più interessava era conoscere, almeno come media temporale, l'evoluzione di un certo osservabile $f : M \rightarrow \mathbf{C}$ (cioè la funzione $f \circ G^t$). In un sistema che invada tutto lo spazio accessibile è lecito supporre che la media su t di $f \circ G^t$ sia costante e sia uguale alla

media su tutti gli stati. Formalizziamo tutto questo.

Definizione 1.6 (MEDIA TEMPORALE). *Sia dato un sistema dinamico (M, G^t, μ) o (M, G, μ) e sia $f : M \rightarrow \mathbf{C}$. La media temporale dell'osservabile f è definita, quando esiste, dalla funzione f^∞ scritta come*

$$f^\infty(x) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} f(G^m x)$$

nel caso discreto, e come

$$f^\infty(x) \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(G^t x) dt$$

nel caso continuo.

Definizione 1.7 (MEDIA SPAZIALE). *In un dato sistema dinamico la media spaziale dell'osservabile f , se esiste, è il seguente numero complesso:*

$$\bar{f} \equiv \int_M f(x) d\mu.$$

ricordando che $\mu(M) = 1$.

È allora importante sapere quando tali medie esistono. A tale scopo sono dati i due seguenti teoremi fondamentali della teoria ergodica (vedi [Ma]); per semplicità li enuncieremo solo nel caso continuo:

Teorema 1.8 (BIRKHOFF-KHINCHIN). *Sia dato un sistema dinamico astratto (M, G^t, μ) e $f \in L^1(M, \mu)$ sia una funzione a valori complessi. Allora f^∞ esiste quasi dappertutto secondo la misura μ .*

Teorema 1.9 (BIRKHOFF-KHINCHIN). *Nelle ipotesi del teorema precedente f^∞ è sommabile e la sua media spaziale è uguale a quella di f :*

$$\int_M f^\infty(x) d\mu = \int_M f(x) d\mu;$$

inoltre, ove sia definita, è invariante:

$$f^\infty(G^t x) = f^\infty(x) \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

I due teoremi precedenti sono dimostrati, ad esempio, in [Ma].

Definizione 1.10 (ERGODICITÀ). *Un sistema dinamico astratto è ergodico quando la media temporale di ogni osservabile $f \in L^1(M, \mu)$ è costante quasi dappertutto.*

È ovvio, per il teorema 1.9, che tale proposizione è equivalente alla ⁵

$$\tilde{\forall} x \in M \quad f^\infty(x) = \bar{f}, \quad (1.7)$$

che traduce, come volevamo, la definizione di sistema ergodico come quel sistema per cui la media temporale di qualsiasi osservabile è uguale alla sua media spaziale.

Esempio. Sia $M = \mathbb{T}^n \equiv \mathbb{R}^n / (2\pi\mathbb{Z})^n$, λ l'ordinaria misura di Lebesgue e G^t il flusso di traslazioni definito, per $\mathbf{x} \in \mathbb{T}^n$, da $G^t \mathbf{x} \equiv \mathbf{x} + \omega t \pmod{2\pi}$, con $\omega \in \mathbb{R}^n$. Abbiamo appena definito un sistema dinamico classico (fig.1). Si dimostra che questo sistema è ergodico se e solo se le frequenze contenute nel vettore ω sono linearmente indipendenti in \mathbb{Z} , cioè se $m_1, \dots, m_n \in \mathbb{Z}$,

$$\sum_{i=1}^n m_i \omega_i = 0 \implies m_1 = \dots = m_n = 0. \quad (1.8)$$

Sia data infatti un funzione $f \in C^2(\mathbb{T}^n)$: questo garantisce che la serie $f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}} e^{i\mathbf{m} \cdot \mathbf{x}}$ converge uniformemente, per cui possiamo scambiare i limiti al momento di fare la media temporale:

$$\begin{aligned} f^\infty(\mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{m}} a_{\mathbf{m}} e^{i\mathbf{m} \cdot \mathbf{x}} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{i\mathbf{m} \cdot \omega t} dt = \\ &= a_{\mathbf{0}} = \text{costante} \iff \forall \mathbf{m} \in \mathbb{Z}^n \quad \mathbf{m} \cdot \omega \neq 0. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Questo risultato può essere facilmente generalizzato, come la definizione 1.10 richiederebbe, a tutte le funzioni in $L^1(\mathbb{T}^n)$.

Allo stesso modo si dimostra che la mappa di traslazione sul toro $G(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{x} + \omega \pmod{2\pi}$ (che può essere pensata come la discretizzazione

⁵ Il simbolo $\tilde{\forall}$ significa: "per quasi tutti".

del sistema sopra descritto) è ergodica sotto condizioni analoghe: cioè se e solo se $\mathbf{m} \cdot \omega \in 2\pi\mathbb{Z} \Rightarrow \mathbf{m} = \mathbf{0}$. Per questi sistemi vale il

Teorema 1.11 (JACOBI). *I sistemi (\mathbb{T}^n, G^t, μ) e (\mathbb{T}^1, G, μ) definiti sopra sono ergodici se e solo se ogni orbita è dappertutto densa.*

Vedi [AA], Appendice 1 per una dimostrazione in un caso particolare.

Diamo ora qualche proprietà dei sistemi ergodici:

Teorema 1.12. *Un sistema è ergodico se e solo se è indecomponibile, cioè se ogni insieme misurabile invariante ha misura 0 o 1.*

Infatti, supponiamo che si possa scrivere $M = M_1 \cup M_2$ con $M_1 \cap M_2 = \emptyset$, con $G^t M_i = M_i$ ($i = 1, 2$) (il tutto va inteso mod 0). Prendendo come funzione sommabile f la funzione caratteristica di M_1 ,

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \in M_1, \\ 0 & \text{se } x \in M_2. \end{cases} \quad (1.10)$$

Si vede che $f^\infty = f$ che non è una funzione costante q.d. Viceversa, se il sistema non è ergodico, si può trovare una funzione $f \in L^1(M, \mu)$ a valori reali (scegliendo eventualmente $\Re f$ o $\Im f$) tale che la sua media temporale non sia costante. Si ponga

$$M_a \equiv \{x \in M; f^\infty(x) \leq a\}, \quad M'_a \equiv M \setminus M_a. \quad (1.11)$$

Deve esistere un $a \in \mathbb{R}$ tale che $\mu(M_a), \mu(M'_a) \in]0, 1[$; infatti se così non fosse, visto che $\mu(M_a)$ è crescente con a , si avrebbe un a' per cui

$$\begin{aligned} \mu(M_a) &= 0 & \forall a < a' \\ \mu(M_a) &= 1 & \forall a > a', \end{aligned} \quad (1.12)$$

il che significa che $f^\infty(x) = a'$ q.d., contrariamente all'ipotesi assunta. A questo punto, per il secondo teorema di Birkhoff (teorema 1.9), l'invarianza della f^∞ causa l'invarianza dei due insiemi che ripartiscono M : $G^t M_a = M_a$ e $G^t M'_a = M'_a$, il che completa la dimostrazione del teorema.

Corollario 1.13. *Un sistema è ergodico se e solo se ogni funzione invariante è costante quasi dappertutto.*

Proviamolo. Per ogni funzione invariante f la media temporale è uguale alla funzione stessa; se il sistema è ergodico, $f = f^\infty = \text{costante}$ q.d. Al contrario se il sistema non è ergodico è decomponibile: la funzione caratteristica di uno dei due insiemi invarianti è invariante ma non è q.d. costante.

Andremo ora a definire un'altra interessante caratterizzazione di caoticità. Ci sono dei sistemi, vedi il cosiddetto "gatto di Arnold" (fig.2), che hanno la caratteristica di deformare, tramite stiramenti e ripiegamenti, un dato insieme che si prendesse come insieme iniziale. Un po' come succede a tutti quando, tramite il movimento del cucchiaino, mescoliamo del latte con del caffè nella nostra tazza. Sono anche stati eseguiti esperimenti meno banali per studiare questo tipo di fenomeno con diverse sostanze.

Da un punto di vista dinamico quello che succede è che un certo insieme $A \in M$ viene deformato, nella sua evoluzione $A \mapsto A^t$ in modo da ritrovarsi sparso, sempre più uniformemente, su tutto l'insieme ambiente M . La caratterizzazione matematica di questa proprietà sarà questa: dati due insiemi A e B , la percentuale di A^t , per t molto grandi, nell'insieme B sarà circa uguale alla percentuale di A^t in tutto M .

Definizione 1.14 (MIXING). *Un sistema dinamico è mescolante (mixing) quando, per ogni coppia di insiemi misurabili A e B ,*

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu(G^t(A) \cap B) = \mu(A) \mu(B).$$

Corollario 1.15. *Un sistema mixing è ergodico.*

Sia infatti A un insieme invariante: sarà $A^t \cap A = A$. Dalla definizione data sopra, prendendo $B \equiv A$ si vede che $\mu(A) = 0$ oppure 1. Si può applicare perciò il teorema 1.12.

Non è vero il contrario: se per esempio abbiamo una isometria G su una varietà riemanniana M , le immagini A^n di un insieme A sufficientemente piccolo dovranno riempire M , ma essendo congruenti con A , per certi n lo intersecheranno e per certi altri no. Non sarà possibile soddisfare la definizione 1.14. Le traslazioni sul toro sono appunto sistemi di questo genere.

Esempio. Il gatto di Arnold è definito dalla terna (T^2, G, λ) , dove $T^2 \equiv \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2$ è il toro modulo 1, G è l'automorfismo

$$G(\mathbf{x}) \equiv \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \mathbf{x} \pmod{1}, \quad (1.13)$$

e λ la misura di Lebesgue. Proveremo più avanti che esso è mixing.

C'è in verità un altro concetto fra l'ergodicità ed il mixing che ora, per completezza, definiremo:

Definizione 1.16 (MIXING DEBOLE). *Un sistema dinamico è debolmente mescolante quando, per ogni coppia di insiemi misurabili A e B ,*

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\mu(A^t \cap B) - \mu(A) \mu(B)| dt = 0,$$

nel caso continuo, e

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} |\mu(A^m \cap B) - \mu(A) \mu(B)| = 0,$$

nel caso discreto.

È importante saper riconoscere le analogie fra sistemi apparentemente diversi in maniera tale da riuscire a dare una classificazione il più possibile sintetica. Questo suggerisce di dare la seguente

Definizione 1.17 (ISOMORFISMO). *Due sistemi dinamici astratti continui (M, G^t, μ) e (M_1, G_1^t, μ_1) si dicono isomorfi quando esiste un isomorfismo $T : M \rightarrow M_1 \pmod{0}$ tale che*

$$G_1^t = T \circ G^t \circ T^{-1};$$

la definizione è analoga nel caso discreto.

Deve, in pratica essere commutativo il grafico in fig.3.

Si vede banalmente che i concetti di ergodicità, mixing debole e forte, sono invarianti per isomorfismo.

Possiamo dare un'altra caratterizzazione, più elegante di quelle sinora viste, delle proprietà statistiche: si tratta della teoria di Koopman su $L^2(M, \mu)$.

Definizione 1.18 (OPERATORE DI KOOPMAN). *In un sistema dinamico discreto (M, G, μ) si definisce l'operatore unitario di Koopman da $L^2(M, \mu)$ in sé secondo la*

$$(Uf)(x) \equiv f(G(x)).$$

In un sistema continuo (M, G^t, μ) si definisce il gruppo unitario di operatori di Koopman come

$$(U^t f)(x) \equiv f(G^t(x)).$$

Si vede che U è unitario: la linearità è ovvia; è isometrico perché G è un automorfismo e allora $\int |f(G(x))|^2 d\mu = \int |f(x)|^2 d\mu$ (questo garantisce anche l'iniettività); per la suriettività si noti che ogni $f \in L^2(M, \mu)$ si può scrivere come Ug se $g(x) = f(G^{-1}(x))$.

Teorema 1.19. *Un sistema discreto è ergodico se e solo se 1 è un autovalore semplice di U . Un sistema continuo è ergodico se e solo se 0 è un autovalore semplice del generatore ⁶ del gruppo U^t .*

Proviamo il teorema nel caso continuo, che è quello che ci interessa più da vicino. $f \in L^2(M, \mu)$ è una autofunzione relativa all'autovalore 0 del generatore del gruppo di Koopman se e solo se $dU^t/dt|_{t=0}f = 0$ che equivale, per le proprietà di gruppo degli U^t , a $dU^t/dt|_t f = 0 \forall t$, cioè $U^t f = U^0 f = f \forall t$. Il che vuol dire che f appartiene a quell'autospazio se e solo se è invariante. Per il corollario 1.13 il sistema è ergodico se e solo se ciascuna di queste funzioni è q.d. costante, cioè è un multiplo della funzione $\mathbf{1}(x) = 1 \forall x$, cioè tale autospazio ha dimensione 1.

Teorema 1.20. *Un sistema dinamico è mixing se e solo se*

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle U^t f, g \rangle_{L^2} = \langle f, \mathbf{1} \rangle_{L^2} \langle \mathbf{1}, g \rangle_{L^2}$$

⁶ Si può trovare, ad esempio, in [W] la definizione rigorosa di generatore di un gruppo unitario fortemente continuo, insieme alle sue proprietà spettrali; il gruppo di Koopman è fortemente continuo per il teorema della convergenza dominata di Lebesgue (non entriamo nei dettagli della dimostrazione).

per ogni $f, g \in L^2(M, \mu)$.

Dimostrare una delle due implicazioni è banale: si prendano f e g come le funzioni caratteristiche di due insiemi misurabili A e B . La condizione scritta sopra si riconduce a quella della definizione 1.14. Viceversa, se vale la condizione di sopra per funzioni caratteristiche vale anche per funzioni semplici, che ne sono combinazioni lineari, ma le funzioni semplici sono dense in L^2 e la dimostrazione si chiude.

Siamo ora in grado di dare un'altra caratterizzazione degli aspetti comuni di due sistemi, basandoci appunto sull'operatore (o sul gruppo) di Koopman.

Definizione 1.21 (EQUIVALENZA SPETTRALE). *Due sistemi dinamici discreti (M, G, μ) e (M_1, G_1, μ_1) si dicono equivalenti spettralmente se sono unitariamente equivalenti i rispettivi operatori di Koopman. Analoga definizione vale per i sistemi continui.*

È ovvio che due sistemi isomorfi (definizione 1.17) sono equivalenti da un punto di vista spettrale: $U_1 = FUF^{-1}$, con $F : L^2(M, \mu) \rightarrow L^2(M_1, \mu_1)$ definito da $(Ff)(x_1) \equiv (f \circ T^{-1})(x_1) \forall x_1 \in M_1$. Si veda il diagramma in fig.4. Gli invarianti di due sistemi spettralmente equivalenti, cioè gli invarianti di U , vengono detti *invarianti spettrali*. Esempi di queste quantità sono lo spettro di U e le rispettive molteplicità spettrali.

Teorema 1.22. *Sia dato un sistema discreto ergodico con U operatore di Koopman. Allora:*

- 1) *Il valore assoluto di ogni autofunzione di U è q.d. costante.*
- 2) *Ogni autovalore è semplice*
- 3) *Lo spettro puntuale $\sigma_p(U)$ (cioè l'insieme degli autovalori) è un sottogruppo del cerchio $\{z \in \mathbf{C}; |z| = 1\}$.*
- 4) *Se il sistema è anche mixing, l'unico autovalore è 1.*

Sia data una autofunzione f dell'autovalore λ (siccome l'operatore è unitario, necessariamente $|\lambda| = 1$). Per cui

$$f(G(x)) = \lambda f(x) \quad \tilde{\forall} x \quad \implies \quad |f(G(x))| = |f(x)| \quad \tilde{\forall} x. \quad (1.14)$$

Perciò $|f|$ è invariante e, per l'ergodicità (Corollario 1.13), costante. Questo prova 1).

Da quanto detto sopra segue in particolare che $f \neq 0$ q.d. per cui, se g è un'altra autofunzione con valore proprio λ , si potrà definire q.d. la funzione g/f sulla quale U si comporta in questa maniera:

$$U \left(\frac{g}{f} \right) = \frac{\lambda g}{\lambda f} = \frac{g}{f}. \quad (1.15)$$

Per il teorema 1.19 g/f è un multiplo di $\mathbf{1}$, cioè g è un multiplo di f , che è quanto afferma 2).

Se $\lambda, \mu \in \sigma_p(U)$ aventi, rispettivamente, funzioni proprie f, h , possiamo scrivere

$$U \left(\frac{h}{f} \right) = \frac{\mu h}{\lambda f} = \mu \lambda^{-1} \frac{h}{f}, \quad (1.16)$$

cioè $\mu \lambda^{-1} \in \sigma_p(U)$. Da qui si ricavano una per una le proprietà che definiscono un gruppo.

Per provare 4) prendiamo una autofunzione f di autovalore λ e poniamo $g \equiv f$ nella formula del teorema 1.20. Otteniamo

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \langle U^m f, f \rangle_{L^2} = \langle f, \mathbf{1} \rangle_{L^2} \langle \mathbf{1}, f \rangle_{L^2}, \quad (1.17)$$

che equivale a dire che

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \lambda^m = \text{costante}. \quad (1.18)$$

Allora $\lambda = 1$ e la dimostrazione del teorema 1.22 si conclude.

Per capire in concreto questi tipi di proprietà può essere utile vedere un caso particolare:

Esempio. In (\mathbb{T}, G, λ) sia $G(x) \equiv x + 2\pi\omega \pmod{2\pi}$. Dalla teoria di Fourier sappiamo che una base di $L^2(\mathbb{T}, \lambda)$ sono le funzioni $\phi_n(x) \equiv e^{inx}$ sulle quali l'operatore U agisce come

$$(U\phi_n)(x) \equiv e^{in(x+2\pi\omega)} = e^{2\pi in\omega} \phi_n(x). \quad (1.19)$$

Le ϕ_n sono una base di autofunzioni di U . Il teorema 1.19 ci dice che questo sistema è ergodico se e solo se 1 è un autovalore semplice, il che

accade se e solo se $n\omega \notin \mathbb{Z}$ quando $p \neq 0$ che è come dire se e solo se $\omega \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$. Abbiamo così ritrovato il risultato che già conoscevamo. È interessante osservare che in effetti, come dimostrato prima, l'irrazionalità di ω (in altre parole l'ergodicità) implica che lo spettro sia semplice.

Possiamo anche ritrovare la proprietà di non mescolanza di questo sistema, infatti

$$\langle U^m \phi_n, \phi_n \rangle_{L^2} = e^{imn\omega}. \quad (1.20)$$

Se $n \neq 0$ non esiste il limite $m \rightarrow \infty$ e quindi non rientriamo nel caso del teorema 1.20.

Questo sistema ci suggerisce la seguente

Definizione 1.23 (SPETTRO DISCRETO). *Un sistema dinamico ha spettro discreto quando esiste in $L^2(M, \mu)$ una base di autofunzioni di U .*

Questa definizione non avrebbe molto interesse se non fosse per il teorema che ora enuncieremo e la cui dimostrazione può essere trovata in [Ha].

Teorema 1.24 (VON NEUMANN, HALMOS). *Due sistemi dinamici con spettro discreto sono isomorfi se e solo se gli autovalori dei rispettivi operatori di Koopman coincidono.*

Ogni sottogruppo numerabile del cerchio è lo spettro di un sistema dinamico astratto con spettro discreto.

È importante non dimenticare l'aggettivo "astratto" nell'enunciato appena dato. Non è stato dimostrato che tale sistema possa anche essere scelto classico.

Le nozioni finora viste riguardo alla teoria sviluppata da Koopman ci consentono di vedere un'altra interessante proprietà stocastica dei sistemi, direttamente legata alle caratteristiche dell'operatore indotto dall'evoluzione.

Definizione 1.25 (SPETTRO DI LEBESGUE). *Sia dato il sistema dinamico astratto discreto (M, G, μ) avente operatore di Koopman U . Tale sistema è detto avere spettro di Lebesgue L^I se esiste una base ortonormale in $L^2(M, \mu)$ formata dalla funzione costante $\mathbf{1}$ e dalle $f_{i,j}$ ($i \in I, j \in \mathbb{Z}$) tali che*

$$U f_{i,j} = f_{i,j+1} \quad \forall i \in I, \forall j \in \mathbb{Z}.$$

Analogamente, il sistema continuo (M, G^t, μ) avente gruppo unitario di Koopman U^t ha spettro di Lebesgue L^I se, per ogni $t \neq 0$, U^t ha spettro L^I .

Si può provare che la cardinalità di I è univocamente determinata. Essa viene chiamata *molteplicità dello spettro di Lebesgue*. Allora, per esempio, si parlerà di spettro di Lebesgue semplice, o finito, o numerabile.

Teorema 1.26. *Un sistema avente spettro di Lebesgue è mixing.*

Guardiamo la formula del teorema 1.20, scrivendo

$$\begin{aligned} f &= f_{\perp} + a\mathbf{1}, \\ g &= g_{\perp} + b\mathbf{1}, \end{aligned} \tag{1.21}$$

da cui

$$\begin{aligned} \langle U^m f, g \rangle &= \langle U^m f_{\perp}, g_{\perp} \rangle + b \langle U^m f_{\perp}, \mathbf{1} \rangle + \bar{a} \langle U^m \mathbf{1}, g_{\perp} \rangle + \bar{a}b \langle U^m \mathbf{1}, \mathbf{1} \rangle = \\ &= \langle U^m f_{\perp}, g_{\perp} \rangle + \langle f, \mathbf{1} \rangle \langle \mathbf{1}, g \rangle. \end{aligned} \tag{1.22}$$

Questo perchè il secondo e terzo prodotto scalare sono nulli, mentre l'ultimo vale ovviamente 1. Rimane allora da dimostrare che $\forall f_{\perp}, g_{\perp} \perp \mathbf{1}$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \langle U^m f_{\perp}, g_{\perp} \rangle = 0. \tag{1.23}$$

Basterà allora verificare la condizione appena scritta su una qualsiasi coppia in $\{f_{i,j}\}$. È presto visto che

$$\langle U^m f_{i,j}, f_{p,q} \rangle = \langle f_{i,j+m}, f_{p,q} \rangle = \delta_{i,p} \delta_{j+m,q} \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0. \tag{1.24}$$

Un tipico sistema che presenta uno spettro di Lebesgue è il gatto di Arnold definito in precedenza. Una base ortonormale di T^2 è l'insieme

$$\mathcal{B} \equiv \{\phi_{\mathbf{n}}; \phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = e^{2\pi i(n_1 x_1 + n_2 x_2)}, \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2\}. \tag{1.25}$$

Viene naturale identificare \mathcal{B} con \mathbb{Z}^2 . Su ogni vettore di base l'operatore di Koopman agisce come $U\phi_{n_1, n_2} = \phi_{n_1+n_2, n_1+2n_2}$. per cui viene indotto un isomorfismo su $\mathcal{B} \cong \mathbb{Z}^2$ rappresentato dalla matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}. \tag{1.26}$$

Siamo in grado di provare che $\mathbf{1} \cong (0, 0)$ è l'unica orbita chiusa di A . Infatti A ha due autovalori λ_1, λ_2 tali che $0 < \lambda_1 < 1 < \lambda_2$: perciò A opera una dilatazione nella direzione di λ_1 ed una contrazione nella direzione di λ_2 . L'unico punto di \mathbb{R}^2 che può ritornare su se stesso (e lo fa con periodo 1) è l'origine $(0, 0)$.

Se ne conclude che $A : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{B}$ ripartisce naturalmente $\mathcal{B} \setminus \mathbf{1}$ in $\bigcup_{i \in I} C_i$ dove le C_i sono le orbite aperte e, di conseguenza, numerabili. Per ogni i prendiamo ora un elemento di C_i e chiamiamolo $f_{i,0}$. Definiamo poi $f_{i,n} \equiv U^n f_{i,0} \forall n \in \mathbb{Z}$. È chiaro, per definizione di orbita, che

$$C_i \equiv \{f_{i,n}; n \in \mathbb{Z}\}. \quad (1.27)$$

Abbiamo così costruito una struttura di spettro di Lebesgue. Questo, incidentalmente, prova anche che il gatto di Arnold è mixing, come fortemente suggerito dalla fig.2.

Finita la carrellata di nozioni preliminari e di esempi vogliamo ora specializzarci al caso dei sistemi dinamici di Hamilton; fra questi parleremo più diffusamente dei sistemi *integrabili*. Qua saremo volutamente coincisi in quanto le seguenti nozioni si intendono ben note.

Definizione 1.27 (SISTEMA INTEGRABILE). *Un sistema classico hamiltoniano n -dimensionale avente hamiltoniana $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ viene detto integrabile se esistono delle funzioni $F_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \dots, F_n(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ tali che:*

- 1) $\{F_i, H\} = 0 \quad \forall i = 1, \dots, n$ (costanti del moto)
- 2) $\{F_i, F_j\} = 0 \quad \forall i \neq j$ (in involuzione)
- 3) $\frac{\partial F_i}{\partial F_j} = 0. \quad \forall i \neq j$ (indipendenti)

Teorema 1.28 (LIOUVILLE). *In un sistema integrabile si considerino le ipersuperfici di livello*

$$M_f \equiv \{(\mathbf{q}, \mathbf{p}); F_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = f_i \quad (i = 1, \dots, n)\}.$$

Allora:

1) M_f è una varietà regolare invariante rispetto al flusso di fase con funzione di Hamilton $H = F_1$.

2) Le equazioni di Hamilton si integrano per quadrature.

3) Se le varietà M_f sono compatte, connesse e senza bordo, allora esse sono diffeomorfe a \mathbb{T}^n e esiste una trasformazione canonica $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \mapsto (\varphi, \mathbf{I}) \in \mathbb{T}^n \times (\mathbb{R}^+)^n$, dove le variabili $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ (dette variabili angolari) descrivono M_f e le variabili I_1, \dots, I_n (variabili di azione) sono tali che gli integrali primi F_i dipendano solo da esse. In particolare l'hamiltoniana nelle nuove coordinate si scrive, con il consueto abuso di notazione

$$H = H(\mathbf{I}) \equiv H(I_1, \dots, I_n).$$

Questo sistema si dice alle volte *canonicamente integrabile*.

In questo caso le equazioni di Hamilton (1.4) diventano

$$\begin{cases} \dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{I}} \equiv \omega(\mathbf{I}) \\ \dot{\mathbf{I}} = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0. \end{cases} \quad (1.28)$$

Per cui l'evoluzione del sistema diventa, usando notazioni vettoriali,

$$\begin{cases} \mathbf{I}(t) = \mathbf{I}(0) \\ \varphi(t) = \varphi(0) + \omega(\mathbf{I})t \pmod{2\pi}. \end{cases} \quad (1.29)$$

Si vede quindi che il sistema hamiltoniano (M_E, U^t, μ) dove M_E è la varietà equienergetica, U^t l'evoluzione hamiltoniana definita dalle (1.4) e μ la misura di ipersuperficie del corollario 1.3, è isomorfo, nel senso della definizione 1.17, al sistema $(\mathcal{M}_E \times \mathbb{T}^n, G^t, \nu)$ dove abbiamo definito $\mathcal{M}_E \equiv \{\mathbf{I} \in (\mathbb{R}^+)^n; H(\mathbf{I}) = E\}$; $G^t(\mathbf{I}, \varphi) \equiv (\mathbf{I}, \varphi + \omega(\mathbf{I})t \pmod{2\pi})$ e dove ν è l'opportuna misura invariante che si riconduce a quella di Lebesgue su ogni toro invariante.

Esempi. Il classico esempio di sistema integrabile a moto limitato, nonché quello che catalizzerà la nostra attenzione per la sua importanza e semplicità, è l'oscillatore armonico. Si tratta del sistema avente hamiltoniana

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2). \quad (1.30)$$

Le (1.4) diventano, in questo caso,

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} = -\omega^2 \mathbf{q}, \end{cases} \quad (1.31)$$

che si risolvono come, per $i = 1, \dots, n$,

$$\begin{cases} q_i(t) = a_i \cos(\omega_i t + \alpha_i) \\ p_i(t) = -a_i \omega_i \sin(\omega_i t + \alpha_i), \end{cases} \quad (1.32)$$

dove le condizioni iniziali sono contenute nella variabili $a_i \in \mathbb{R}$, $\alpha_i \in \mathbb{T}$, secondo le formule $q_i^0 = a_i \cos \alpha_i$, $p_i^0/\omega_i = -a_i \sin \alpha_i$. Si vede quindi che le proiezioni della traiettoria di fase sui piani coordinati (q_i, p_i) sono ellissi percorse in senso orario centrate nell'origine.

In questo caso l'hamiltoniana viene già data come somma di più hamiltoniane ciascuna dipendente solo da una coppia di variabili coniugate, per cui il problema non è nient'altro che una sovrapposizione di problemi monodimensionali: in altre parole la separabilità del problema si ha a vista. Uno dei motivi per cui questo sistema è fondamentale è che in prima approssimazione (piccole oscillazioni ⁷) tutti i sistemi separabili si riconducono ad esso; infatti l'oscillatore armonico è l'unico ad avere le equazioni di Hamilton lineari. Si può scrivere esplicitamente la trasformazione canonica in variabili azione-angolo:

$$\begin{cases} I_i = \frac{1}{2\omega_i} (p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2) \\ \varphi_i = \arctan \frac{\omega_i p_i}{q_i}. \end{cases} \quad (1.33)$$

L'hamiltoniana, nelle nuove variabili, diventa

$$H(\mathbf{I}) = \omega \cdot \mathbf{I} = \sum_{i=1}^n \omega_i I_i. \quad (1.34)$$

⁷ Questo è il nome che viene dato all'approssimazione per cui le equazioni di Hamilton vengono linearizzate, cioè viene scartata al membro destro la parte non lineare, nel caso di moto legato.

Questa formula ci mostra un altro buon motivo per considerare l'oscillatore armonico un sistema veramente particolare: quello che abbiamo, infatti, è che le frequenze angolari del moto sul toro, cioè le ω_i ($i = 1, \dots, n$), non variano con l'azione. Tradotto nello spazio (\mathbf{q}, \mathbf{p}) , questo discorso è equivalente a dire che le traiettorie ellittiche vengono percorse tutte con lo stesso periodo e che quindi due punti in due ellissi diverse manterranno nel loro moto sempre la stessa fase relativa. Questa è la ben nota proprietà di *isocronia* dell'oscillatore armonico.

Un altro esempio interessante, anche per la facilità con la quale si tratta in meccanica quantistica, è quello della scatola di potenziale:

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{p_i^2}{2m} + V_i(q_i) \right) \quad (1.35)$$

dove

$$V_i(q_i) = \begin{cases} 0 & \text{per } -\ell_i/2 \leq q_i \leq \ell_i/2 \\ \infty & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (1.36)$$

Quel potenziale va inteso come una approssimazione di un potenziale regolare, altrimenti le equazioni di Hamilton non genererebbero più un gruppo di diffeomorfismi e non potremmo più parlare di sistema dinamico classico. Fatta questa precisazione, che, oltretutto, ci giustifica per non aver scritto le forma della trasformazione canonica, riscriviamo l'hamiltoniana in funzione delle azioni:

$$H(\mathbf{I}) = \frac{\pi^2}{2m} \sum_{i=1}^n \frac{I_i^2}{\ell_i^2}. \quad (1.37)$$

Come ultimo esempio citiamo il problema di Keplero per energie negative (altrimenti non avremmo moti legati): sia I_3 il generatore infinitesimo delle rotazioni attorno all'asse z , I_2 il generatore delle rotazioni attorno alla linea dei nodi e I_1 l'azione del moto radiale. Allora

$$H(I_1, I_2, I_3) = -\frac{K}{(I_1 + I_2 + I_3)^2}, \quad (1.38)$$

dove K è una costante che dipende dalle masse e dalla costante gravitazionale.

Ritornando al caso generale, si sa che:

Proposizione 1.29. *Ogni sistema hamiltoniano monodimensionale⁸ è integrabile. Se inoltre è legato (avente cioè moto limitato nello spazio delle fasi) è canonicamente integrabile.*

Questo ci dice che ogni sistema monodimensionale legato è ergodico, perché la varietà equienergetica è rappresentata da un unico toro ($H(I) = E$ ha una sola soluzione in una dimensione)⁹. Su di esso la traslazione è ergodica.

Vediamo, altrettanto banalmente, che ogni sistema n -dimensionale ($n > 1$) canonicamente integrabile non lo è; infatti la \mathbf{I} è una funzione invariante ma non è costante sulla varietà equienergetica $\mathcal{M}_E \times \mathbb{T}^n$ che è composta da più tori invarianti; questo indipendentemente dal fatto che il flusso su questi tori sia ergodico o meno. Come avevamo accennato in precedenza, è fondamentale la scelta della varietà di lavoro per la classificazione della proprietà di ergodicità, per esempio, di un determinato sistema. Questo è proprio uno dei problemi che verranno fuori in seguito studiando la definizione di Von Neumann sull'oscillatore armonico.

⁸ Per essere pignoli, ogni sistema monodimensionale autonomo, cioè con hamiltoniana indipendente dal tempo.

⁹ Si suppone la funzione $H(I)$ crescente.

2. DALLA QUANTIZZAZIONE DI BOHR-SOMMERFELD AGLI OPERATORI PSEUDO-DIFFERENZIALI

Tutte le volte che si pone il problema in fisica di vedere un concetto di meccanica classica nell'ambito della teoria dei quanti, si ha a che fare con la *quantizzazione*. In parole semplici, e imprecise ¹, è questo il problema di selezionare i valori **discreti** che una determinata grandezza fisica può assumere in virtù delle restrizioni, teoriche e sperimentali, che la teoria dei quanti impone.

Oltre al motivo generico di cui sopra per tornare a rivedere argomenti che sembrano, a torto, ormai scontati, c'è anche una ragione più tecnica: noi abbiamo bisogno, come vedremo in seguito, di conoscere i livelli energetici dei sistemi che prendiamo in considerazione. Ora, nella generalità dei casi, questo è un compito improbo: ne sia prova il fatto che in tutti i casi non banali i ricercatori sono costretti a ricorrere all'uso dei calcolatori (vedi [BV], [BGS1] o [CMG]). Esiste però una regola di quantizzazione, risalente agli albori della "teoria dei quanti", assai semplice, che va sotto il nome di *regola di Bohr-Sommerfeld*, la quale, quando applicabile, rende la vita molto più comoda; e difatti noi la useremo pesantemente. Da qui la necessità di capire, secondo i moderni postulati della meccanica quantistica, in che ambiti e fino a che punto essa è valida.

Oltre a questo c'è da dire che il concetto di ergodicità ha a che fare grandemente con il concetto di osservabile: se, come abbiamo dichiarato, dobbiamo studiare la corrispondenza fra la nozione classica e quella quantistica di ergodicità, non possiamo ignorare come si imposta il problema della corrispondenza fra osservabile classico ed osservabile quantistico.

Ci faremo accompagnare, in questo percorso, dal recentissimo lavoro di [Gr] che ci permetterà, oltretutto, di avere una visione di insieme globale

¹ Allo stato attuale delle cose il termine "quantizzazione", almeno nel gergo degli addetti ai lavori, sta ad indicare, come vedremo meglio in seguito, la funzione che associa ad un osservabile classico a valori reali un operatore autoaggiunto agente sullo spazio di Hilbert degli stati.

della struttura teorica della meccanica dei quanti che, contrariamente a quanto può sembrare ad un approccio superficiale, non è così solidamente conosciuta.

Incominceremo con un breve richiamo della teoria di Bohr-Sommerfeld per sistemi integrabili (vedi sezione 1) e quasi-integrabili. Enunciamo subito la

REGOLA DI QUANTIZZAZIONE DI BOHR-SOMMERFELD. *I livelli di energia di un sistema canonicamente integrabile si ottengono restringendo i valori delle azioni ai multipli interi positivi di \hbar . In formula, se $H = H(\mathbf{I})$*

$$E_{\mathbf{n}}^{BS} = H(\mathbf{n}\hbar). \quad (2.1)$$

Riprendiamo gli esempi della sezione 1 per vedere come quali sono i loro livelli energetici "alla Bohr-Sommerfeld". Per l'oscillatore armonico abbiamo, dalla (1.34),

$$E_{\mathbf{n}}^{BS} = \hbar \sum_{i=1}^n \omega_i n_i = \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}\hbar. \quad (2.2)$$

È da notare che i veri livelli energetici dell'oscillatore armonico differiscono da questi per un termine $n\hbar/2$ dove n è al solito il numero di gradi di libertà del problema. Questo corrisponde ad una quantizzazione delle azioni secondo la $I_i = (n_i + \alpha_i)\hbar$, dove gli α_i vengono detti indici di Maslov che, nel caso di sovrapposizione di moti unidimensionali, valgono $1/2$. Occorre, per chiarezza storica, precisare che la condizione di quantizzazione originale di Planck è la (2.1); gli indici di Maslov escono solo come prodotti della correzione WKB. Ad ogni modo, per grandi numeri quantici ², essi possono essere trascurati.

Esempi in cui la quantizzazione di Bohr-Sommerfeld è esatta sono gli altri due che avevamo visto precedentemente: la scatola di potenziale (1.37),

$$E_{\mathbf{n}}^{BS} = \frac{\pi^2}{2m} \sum_{i=1}^n \frac{(n_i\hbar)^2}{\ell_i^2}, \quad (2.3)$$

² E quindi al limite classico che definiremo in seguito.

ed il problema di Keplero (1.38)

$$E_{\mathbf{n}}^{BS} = -\frac{K}{(n_1 + n_2 + n_3)^2 \hbar^2} = -\frac{K}{n^2 \hbar^2}, \quad (2.4)$$

dove n viene detto numero quantico principale.

Le condizioni di quantizzazione sono fra loro indipendenti, e quindi in numero pari al numero dei gradi di libertà del sistema, qualora non intercorra alcuna relazione di risonanza fra le frequenze del sistema stesso per nessun valore delle azioni, cioè qualora le componenti del gradiente $\omega = (\partial H / \partial \mathbf{I})(\mathbf{I})$ siano razionalmente indipendenti. In caso contrario le condizioni di quantizzazione sono meno del numero dei gradi di libertà, e il sistema è degenere. La degenerazione si dice *intrinseca* se si verifica per tutti i valori delle azioni, e *accidentale* se invece vale solo per alcuni. L'oscillatore armonico risonante presenta degenerazione intrinseca, così come il potenziale kepleriano, dove l'unica quantizzazione indipendente è quella del numero quantico principale. Un esempio di degenerazione accidentale è invece fornito dalla scatola di potenziale per la quale

$$\omega(\mathbf{I}) = \frac{\pi^2}{m} \left(\frac{I_1}{\ell_1^2}, \dots, \frac{I_n}{\ell_n^2} \right); \quad (2.5)$$

le componenti di questo vettore possono essere razionalmente dipendenti o indipendenti a seconda di come viene scelto \mathbf{I} .

Veniamo alla questione, che è quella che ci interessa più direttamente, della possibilità di una quantizzazione alla Bohr-Sommerfeld per i sistemi non integrabili. Qui la regola, nota in modo del tutto improprio come regola EKB (Einstein-Brillouin-Keller), è dovuta in realtà a Born e alla sua scuola, come sviluppo di idee originali di Bohr. Essa è applicabile per i sistemi quasi-integrabili, che sono l'oggetto della teoria canonica delle perturbazioni che qui non richiameremo. Ci limitiamo a dire che l'hamiltoniana di questi sistemi si deve poter scrivere come perturbazione di una hamiltoniana integrabile, cioè in questa maniera:

$$H(\mathbf{I}, \varphi, \varepsilon) = H_0(\mathbf{I}) + \varepsilon V(\mathbf{I}, \varphi), \quad (2.6)$$

dove, al solito, ε è un parametro "piccolo". Un esempio tipico di sistema di questo tipo è costituito dal problema dei tre corpi della meccanica celeste quando si consideri una delle tre masse molto più piccola delle altre due.

Poichè il sistema è integrabile quando l'hamiltoniana dipende solo dalle azioni, lo scopo della teoria canonica delle perturbazioni è quello di eliminare il più possibile la dipendenza dagli angoli nella (2.6), tramite la costruzione di una famiglia di trasformazioni canoniche, che dipenderà da ε , il cui effetto sarà quello di portare la dipendenza dagli angoli dall'ordine 1 in ε , come nella (2.6), ad un ordine quanto più elevato si può: se risulterà possibile rimuoverla a tutti gli ordini $p \in \mathbb{N}$ diremo che la teoria canonica delle perturbazioni esiste appunto a tutti gli ordini. Questo caso si verifica ³ qualora le componenti del vettore frequenza $\omega = (\partial H / \partial \mathbf{I})(\mathbf{I})$ soddisfino non solo la condizione di razionale indipendenza, ma anche la cosiddetta *condizione diofantina*

$$|k_1\omega_1 + \dots + k_n\omega_n|^{-1} \leq C(k_1^2 + \dots + k_n^2)^\gamma, \quad (2.7)$$

dove C e $\gamma > d/2$ sono costanti positive (dipendenti da \mathbf{I}) e d è la dimensionalità del problema. Questa condizione deve essere imposta per controllare che i cosiddetti *piccoli denominatori*, cioè il primo membro della (2.7), non diventino "troppo piccoli", cioè non tendano a zero troppo rapidamente. Se ciò avvenisse non si potrebbe costruire la teoria canonica delle perturbazioni, poiché gli algoritmi che la generano richiedono comunque l'integrazione di una equazione differenziale lineare a coefficienti costanti sul toro per serie di Fourier; ora, nei coefficienti di tale serie di Fourier compare il primo membro della (2.7), e quindi non si potrebbe affermare nulla sulla convergenza della serie in assenza di una condizione come quella da noi imposta.

Tornando a noi, se vale la condizione diofantina, si ha:

Teorema 2.1. *Per ogni $p \in \mathbb{N}$ esiste una trasformazione canonica $(\mathbf{I}, \varphi) \mapsto (\mathbf{A}, \alpha)$, che dipenderà da ε , tale che nelle nuove variabili (anch'esse*

³ Formalmente, come si dirà fra poco.

azione-angolo) l'hamiltoniana assume la forma

$$K_\varepsilon = H_0(\mathbf{A}) + \sum_{k=1}^p N_k(\mathbf{A})\varepsilon^k + \varepsilon^{p+1}R_{p+1}(\mathbf{A}, \alpha).$$

A questo punto per i sistemi quasi integrabili ottenuti come perturbazione di sistemi integrabili **non risonanti** vale senz'altro la seguente

REGOLA DI QUANTIZZAZIONE:

$$E_{\mathbf{n}}^{BS}(\varepsilon) = H_0(\mathbf{n}\hbar) + \sum_{k=1}^{\infty} N_k(\mathbf{n}\hbar)\varepsilon^k. \quad (2.8)$$

È bene notare subito che la formula appena data è puramente formale se non viene prima discussa opportunamente.

Innanzitutto, a parte casi particolari rappresentati dagli oscillatori armonici, in cui le frequenze non dipendono dalle azioni, o da perturbazioni $V(\mathbf{I}, \varphi)$ il cui sviluppo di Fourier abbia solo un numero finito di termini, la condizione diofantina non può essere imposta facendo variare le azioni \mathbf{I} o equivalentemente le frequenze $\omega(\mathbf{I})$, in insiemi aperti. Basti pensare che in due gradi di libertà la condizione diofantina significa che il rapporto fra le due frequenze deve essere un numero irrazionale approssimato "non troppo bene" dai razionali, mentre arbitrariamente vicino ad ogni irrazionale c'è appunto un razionale. Dunque, affinché la restizione delle azioni ai multipli interi di \hbar sia possibile, dovremo restringerci ad uno dei due casi menzionati prima.

Anche se la serie canonica esiste a tutti gli ordini, essa sarà divergente, salvo casi particolari altamente non generici. Questo è quanto viene affermato da un celebre teorema di Poincaré che stabilisce, sotto ipotesi non restrittive, che una hamiltoniana quasi-integrabile $H(\mathbf{I}, \varphi, \varepsilon)$ che si riduca ad un problema integrabile per $\varepsilon = 0$ e che sia olomorfa in tutte le variabili $(\mathbf{I}, \varphi, \varepsilon)$ non ammette altro integrale primo *olomorfo* in $(\mathbf{I}, \varphi, \varepsilon)$ oltre all'hamiltoniana. Se la teoria canonica delle perturbazioni convergesse, esisterebbero n integrali primi: le nuove azioni.

Dunque, anche considerando rimossa la restrizione sulla scelta delle azioni, non è chiaro il significato della somma. La prescrizione da seguire è quella di interpretare la (2.8) come uno sviluppo asintotico, scegliendo come criterio per arrestare la somma in ultima analisi il confronto con i dati sperimentali. Oggi non si fa certo nulla di diverso con gli sviluppi perturbativi dell'elettrodinamica quantistica.

Rimanendo in quest'ordine di idee, è possibile dimostrare, tramite opportuni troncamenti della serie canonica che tutti i moti periodici dell'hamiltoniana imperturbata $H_0(\mathbf{I})$ rimangono stabili su scale di tempo esponenzialmente lunghe ⁴ : tipicamente dell'ordine $\exp \varepsilon^{-a}$ per qualche $a > 0$. Questi risultati lasciano però aperto il problema assai profondo di sapere se i moti imperturbati rimangono stabili, una volta "accesa" la perturbazione, per l'eternità, cioè se il moto si mantenga quasi-periodico per ogni tempo. A questa domanda ha dato una risposta essenzialmente positiva la teoria KAM ⁵ , almeno per ε piccolo. Essa permette di costruire, tramite un procedimento diverso dalla teoria canonica delle perturbazioni, ma ad essa collegato (il cosiddetto metodo superconvergente) una trasformazione canonica che coniuga l'hamiltoniana di partenza H_ε con una nuova hamiltoniana, denotata con $K^\infty(\mathbf{I})$, che dipende solo dalle azioni.

Il fatto cruciale, però, è che l'insieme di definizione di questa trasformazione, pur avendo misura che tende a diventare quella dell'intero spazio per $\varepsilon \rightarrow 0$, non può essere aperto, analogamente a quanto si diceva in precedenza; si sa anzi che in generale sarà un insieme del tipo dell'insieme di Cantor, e quindi dato un vettore di azioni \mathbf{I} , non è possibile sapere a priori se apparterrà o meno al dominio della trasformazione canonica KAM.

Non andiamo oltre, perché non è questa la sede, a vedere come estendere la regola di Bohr-Sommerfeld ai sistemi quasi-integrabili risonanti. Ci accontentiamo (poi vedremo che questo ci basta) dell'exkursus che abbiamo appena dato e ci appestiamo a trattare della *quantizzazione canonica*.

⁴ Per le referenze su questo e sugli argomenti immediatamente a seguire, rimandiamo a [Gr].

⁵ Si tratta delle iniziali di Kolmogorov, Arnold, Moser. La parte che a noi più interessa, comunque, per il problema della quantizzazione, è quella sviluppata da Arnold.

È ben noto che la fisica, tanto tramite analisi concettuali, quanto tramite evidenze concrete sulla natura ondulatoria della materia, conduce a fondare la descrizione quantistica dei sistemi microscopici ad un numero finito di gradi di libertà su alcuni postulati di natura strettamente matematica. Non occorre qui riportare per esteso tutti gli assiomi su cui poggia la formulazione matematica della meccanica quantistica. Basterà ricordare i seguenti

POSTULATI:

”Gli stati (puri) di un sistema quantistico corrispondente ad un dato sistema hamiltoniano classico sono vettori di norma unitaria in uno spazio di Hilbert complesso separabile che verrà chiamato spazio degli stati e verrà denotato con \mathcal{H} .”

”Le variabili dinamiche classiche, cioè le funzioni reali delle coordinate canoniche, sono in corrispondenza univoca con gli operatori lineari autoaggiunti che agiscono nello spazio degli stati.”

”Se ad una variabile dinamica f è univocamente associato l’operatore autoaggiunto \hat{f} , la cui misura spettrale ⁶ è denotata con $E_f(\lambda)$, allora la distribuzione cumulativa di probabilità del risultato di una misura di f sullo stato ψ vale $\langle \psi, E_f(\lambda)\psi \rangle = \|E_f(\lambda)\psi\|^2$.”

Per esempio, dall’ultimo dei tre postulati segue che l’aspettazione matematica del risultato (o valor medio sullo stato ψ) è data da

$$\langle \hat{f} \rangle \equiv \langle \psi, \hat{f}\psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\langle \psi, E_f(\lambda)\psi \rangle. \quad (2.9)$$

I postulati sopra esposti non specificano come trovare lo spazio \mathcal{H} degli stati e come costruire la corrispondenza di cui al secondo punto. Su questo problema, nei corsi di Istituzioni di Fisica Teorica, generalmente si taglia corto e si presenta la situazione così come sviluppata da Schrödinger che, basandosi sul concetto di onda di materia di De Broglie, arrivò a scrivere

⁶ Da qui in poi, per tutto il proseguio della sezione, verranno richiamati concetti di teoria spettrale degli operatori autoaggiunti. Rimando a [W] per una visione completa di tale teoria.

la sua arcinota equazione

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2 \Delta}{2m} + V \right) \psi \equiv \hat{H} \psi, \quad (2.10)$$

valida nel caso in cui l'hamiltoniana classica avesse la forma $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = |\mathbf{p}|^2/2m + V(\mathbf{q})$ ⁷. Questo lo portò a identificare gli stati come i vettori unitari $\psi(\mathbf{q}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ ("funzioni d'onda normalizzate") e a considerare come naturali controparti delle variabili canoniche \mathbf{q} e \mathbf{p} gli operatori $\hat{\mathbf{q}}$, operatore di moltiplicazione che agisce come $(\hat{\mathbf{q}}\psi)(\mathbf{q}) = \mathbf{q}\psi(\mathbf{q})$, e $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{q}}$. È immediato calcolare il commutatore fra questi due operatori (usiamo ora notazioni monodimensionali):

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \{q_i, p_j\} = i\hbar \delta_{ij}, \quad (2.11)$$

dove, come al solito, $\{q_i, p_j\}$ denota la parentesi di Poisson classica delle coordinate canoniche (q, p) .

La corrispondenza fra variabili dinamiche ed operatori può essere dunque costruita nel modo seguente: sia $A(q, p)$ una variabile dinamica, cioè una funzione *decente* delle coordinate canoniche. Allora l'operatore su L^2 ad essa corrispondente ha l'espressione (differenziale) $A(\hat{q}, \hat{p})$.

Prima di poter procedere, però, come abbiamo già fatto prima, dobbiamo soffermarci a discutere e puntualizzare ciò che abbiamo scritto solo formalmente. Per prima cosa, visto che \hat{q} e \hat{p} non commutano, mentre lo fanno ovviamente q e p , dobbiamo scegliere in che modo va realizzata la corrispondenza scritta sopra nel caso di una osservabile classica in cui compaiano termini misti in q e p . Si è soliti usare la seguente regola, dovuta a Weyl: si scrive dapprima il termine misto in una forma che faccia apparire le q e le p in modo simmetrico e poi si scrive, nel modo precedente, l'operatore differenziale formale che le corrisponde. Ad esempio, l'operatore differenziale associato alla variabile dinamica qp sarà $(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})/2$.

⁷ Da qui in avanti il valore m verrà gestito nella maniera più comoda possibile: esso assumerà il valore $1/2$ o 1 a seconda dei contesti in cui ci troveremo.

Il secondo punto di discussione, apparentemente poco rilevante dal punto di vista fisico, è questo: il procedimento testè introdotto associa alle variabili dinamiche reali d'gli operatori solo *formalmente* autoaggiunti in L^2 . L'effettiva autoaggiunzione va verificata caso per caso e questo costituisce un problema matematico non banale. Per esempio, l'hamiltoniana che abbiamo scritto prima $\hat{H} = -\hbar^2 \Delta + V(q)$ ha un significato solo formale se non si specifica il dominio $D(\hat{H}) \subset L^2$ su cui essa deve agire.⁸ L'individuazione del dominio in L^2 su cui definire \hat{H} in modo che coincida col proprio aggiunto, o almeno che abbia un'unica estensione autoaggiunta (in questo caso si parla di *autoaggiunzione essenziale*) è precisamente il punto di verifica non banale perché dipende in maniera delicata dalle proprietà del potenziale V e quindi, in ultima analisi, dalla natura fisica del problema. Proprio per questo non ci si deve aspettare che una qualsiasi espressione differenziale formale del tipo $\hat{H} = -\hbar^2 \Delta + V$ possa essere realizzata in uno ed un solo modo come operatore autoaggiunto in L^2 . Questo, per esempio, non è vero quando V è il potenziale di una forza che classicamente sarebbe in grado di spingere il punto all'infinito in un tempo finito, come il potenziale del repulsore quartico.

Quello che abbiamo scritto costituisce la rappresentazione di Schrödinger (o "delle q ") delle regole di commutazione canoniche, la quale individua uno spazio di Hilbert, lo spazio $L^2(\mathbb{R}^3)$ appunto, e degli operatori differenziali \hat{q} e \hat{p} che soddisfano le (2.11) a partire dalle quali si può associare in maniera univoca un operatore formalmente autoaggiunto in L^2 ad ogni osservabile classica, tramite la regola di Schrödinger-Weyl.

Viene naturale ora domandarsi se tale rappresentazione sia o no unica:

⁸ È bene tenere presente che la specificazione del dominio non è una sottigliezza matematica del tutto ininfluenza sulla fisica. Al contrario, operatori definiti dalla medesima espressione differenziale ma su domini differenti, possono avere proprietà drammaticamente differenti. Ad esempio l'operatore $\hat{p} = -i\hbar \partial_q$ non è autoaggiunto in $L^2(0,1)$, e il suo spettro coincide con l'intero piano complesso, se lo si considera definito su tutte le funzioni derivabili nulle agli estremi (fisicamente, la buca di potenziale), ma lo è, e il suo spettro consiste dei punti $2\pi n$ (n intero), se invece lo si considera definito sulle funzioni derivabili che assumono lo stesso valore agli estremi (fisicamente, la situazione del rotatore).

possiamo scegliere altri spazi di Hilbert e altri operatori, magari più comodi da gestire, su cui impostare la nostra formalizzazione della meccanica quantistica. La risposta è ovviamente: sì. C'è sicuramente un altro modo di rappresentare le regole di commutazione canoniche: la rappresentazione delle p , che consiste nell'usare funzioni d'onda $\phi(\mathbf{p}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$, scambiando i ruoli degli operatori \hat{q} e \hat{p} che diventano, rispettivamente, $\hat{q} = -i\hbar\partial_p$ e $\hat{p} = p$. Questo corrisponde ad operare su L^2 una trasformazione di Fourier e ad adoperare il suo trasformato, che è sempre un L^2 e che viene chiamato spazio duale. Un'altra rappresentazione importante è quella delle matrici di Jordan sullo spazio ℓ^2 , che è stata la prima realizzazione concreta delle (2.11). Non stiamo qui a richiamare la loro forma, ma si può facilmente vedere che considerando l'isomorfismo $L^2 \cong \ell^2$, che si ottiene associando ad una funzione d'onda i coefficienti del suo sviluppo su una data base ortonormale di L^2 stesso, si può vedere che quelle matrici sono unitariamente equivalenti ai consueti operatori differenziali introdotti prima.

Se, come è naturale, consideriamo due rappresentazioni equivalenti praticamente la stessa rappresentazione, il problema, formalizzando un po' il linguaggio, diventa naturalmente il seguente:

PROBLEMA DELLA CLASSIFICAZIONE DELLE RAPPRESENTAZIONI IRRIDUCIBILI DELLE REGOLE DI COMMUTAZIONE CANONICHE.

Dato un sistema di coordinate canoniche classiche (η, ξ) (tali quindi che $\{\eta, \xi\} = 1$), trovare tutte le rappresentazioni irriducibili del regole di commutazione canoniche, cioè classificare a meno di equivalenze unitarie tutti gli spazi di Hilbert complessi separabili e tutti gli operatori autoaggiunti $\hat{\eta}, \hat{\xi}$ che ivi agiscono in maniera tale che risulti

$$[\hat{\eta}, \hat{\xi}] = i\hbar\{\eta, \xi\}.$$

Nel caso di un numero finito di gradi di libertà questo problema è stato risolto da un celebre teorema di Von Neumann del 1928 che afferma che **non** vi sono altre rappresentazioni irriducibili oltre a quella di Schrödinger.

Vale decisamente la pena di fare qualche riflessione sul profondo significato di questo teorema, di cui peraltro non richiameremo l'enunciato esatto.

Esso è una delle molte varianti in cui può presentarsi il "mistero della quantizzazione", perché sostanzialmente implica che si può definire la meccanica quantistica a partire dalla meccanica classica solo scrivendo quest'ultima nelle coordinate canoniche "cartesiane", o "rettangolari", $(\eta, \xi) = (q, p)$. In gergo, solo queste coordinate possono essere quantizzate. Consideriamo infatti, in luogo delle (q, p) , delle variabili azione-angolo $(\varphi, I) \equiv (\eta, \xi)$. Dal punto di vista della meccanica classica questa scelta di variabili è del tutto ininfluyente perché si può sempre passare dalle une alle altre con una trasformazione canonica, che lascia immutate le parentesi di Poisson. Tuttavia questa libertà classica è soffocata in meccanica quantistica dal teorema di Von Neumann. Infatti, procedendo canonicamente, essendo φ la coordinata, definita mod 2π , lo spazio di Hilbert dovrebbe essere $L^2(\mathbb{T})$, e gli operatori canonici sarebbero $\hat{\eta} = \varphi$, $\hat{\xi} = -i\hbar\partial_\varphi$. Una simile quantizzazione è però proibita: è ovvio infatti ⁹ che non esiste alcuna trasformazione unitaria che colleghi la terna $L^2(\mathbb{T}), \hat{\eta}, \hat{\xi}$ con la terna $L^2(\mathbb{R}), \hat{q}, \hat{p}$. Un esempio ulteriore, molto interessante proprio in questo contesto, chiarisce ancor meglio la situazione. Consideriamo l'oscillatore quartico, cioè l'hamiltoniana $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = p^2 + q^4$. È facile dimostrare che in variabili azione-angolo essa si scrive, sempre effettuando un abuso di notazione, come $H_c(I) = C I^{4/3}$, dove C è una costante e

$$I = \frac{1}{\pi} \int_{-\sqrt[4]{E}}^{\sqrt[4]{E}} \sqrt{E - q^4} dq. \quad (2.12)$$

Se fosse possibile la quantizzazione in variabili azione-angolo precedentemente descritta i livelli energetici sarebbero $C(n\hbar)^{4/3}$, $n \in \mathbb{N}$ perché si avrebbe $[H(I)]^\wedge = C(-i\hbar\partial_\varphi)^{4/3}$ che agisce su $L^2(\mathbb{T})$ ¹⁰. È noto però che tale successione non dà i livelli della "vera" hamiltoniana

$$[H(q, p)]^\wedge = -\hbar^2 \frac{d^2}{dq^2} + q^4 \quad (2.13)$$

⁹ Basti osservare che lo spettro di $\hat{\xi}$ è l'insieme degli interi, mentre quello di \hat{p} è tutto l'asse reale.

¹⁰ Qui si considera in qualche modo risolto il problema di dover considerare solo gli autovalori positivi di $(-i\hbar\partial_\varphi)^{4/3}$.

che agisce su $L^2(\mathbb{R})$. Anzi, sappiamo che la successione precedente non è altro che quella dei livelli di Bohr-Sommerfeld del problema. Questo esempio mostra in maniera molto diretta la difficoltà intrinseca del problema della relazione fra i livelli energetici che scaturiscono dalla regola di Bohr-Sommerfeld, e quelli esatti, soluzione dell'equazione di Schrödinger stazionaria: la formula di Bohr-Sommerfeld richiede le variabili azione-angolo, mentre la quantizzazione canonica richiede le coordinate cartesiane, questo ad aumentare quel "mistero della quantizzazione" al quale si accennava in precedenza. La scelta delle coordinate, libera prima della quantizzazione, non lo è più dopo.

Questa limitazione a priori sulla scelta delle coordinate canoniche, necessaria per poter costruire il procedimento di quantizzazione canonica ha delle conseguenze forse ancora più serie. La prima è l'impossibilità, in generale, di poter quantizzare *canonicamente* i sistemi meccanici soggetti a vincoli bilateri perfetti. Infatti, le coordinate lagrangiane di simili sistemi, e di conseguenza quelle canoniche, non saranno mai equivalenti a coordinate cartesiane globalmente definite. È bene sottolineare che si parla qui di quantizzazione *canonica*. Esistono beninteso altri modi di "quantizzare" che possono essere applicati a casi più generali, e che si riconducono a quello canonico quando vale anche quest'ultimo. Ad esempio si può postulare, se il sistema da quantizzare consiste nel moto su una varietà Riemanniana, che l'energia cinetica quantizzata sia il corrispondente operatore di Laplace-Beltrami, mentre il potenziale quantizzato è il solito operatore di moltiplicazione (vedi [BV], [BGS1]). Lo svantaggio di questo e di simili metodi sta nel fatto che non definiscono la quantizzazione di ogni variabile dinamica classica, ma semplicemente associano al sistema classico, per così dire, un oggetto quantistico primario. Dedurre da questo la quantizzazione di tutte le variabili dinamiche, lungi dall'essere semplice, può dar luogo a serie ambiguità.

Abbiamo finora visto tre possibili rappresentazioni delle regole di commutazione canoniche e abbiamo detto, con Von Neumann, che esse sono unitariamente equivalenti fra loro. Ne vogliamo esaminare brevemente un'altra, anzi la sola altra rappresentazione in termini di "funzioni d'onda"

esplicitamente nota, quella di Fock-Bargmann. Essa, oltre ad essere importante in generale da un punto di vista teorico, merita attenzione in questo scritto perché conduce ad una formulazione diretta di quelli che vengono chiamati *stati coerenti*, importanti perché hanno la proprietà notevole di "riprodursi" nell'evoluzione dell'oscillatore armonico.

Consideriamo per semplicità il caso di un singolo grado di libertà. Date le consuete coordinate canoniche $(q, p) \in \mathbb{R}$ effettuiamo questa trasformazione lineare

$$\begin{cases} \xi \equiv z = \sqrt{\frac{\omega}{2}}q + \frac{ip}{\sqrt{2\omega}}, \\ \eta \equiv \bar{z} = \sqrt{\frac{\omega}{2}}q - \frac{ip}{\sqrt{2\omega}}. \end{cases} \quad (2.14)$$

Con l'abituale identificazione $\mathbb{R}^2 \cong \mathbb{C}$, questa trasformazione corrisponde ad una rotazione di assi di un angolo $\pi/4$ nel piano complesso. Si vede subito che la parentesi di Poisson di queste che ora verranno prese come nuove variabili vale $\{\xi, \eta\} = -i$. Dunque si tratta di una trasformazione canonica perché il modulo del suo determinante jacobiano è 1. La comparsa della $-i$ nella forma simplettica è dovuta al fatto che la trasformazione è complessa: essa induce anche una comparsa della $-i$ nel gradiente simplettico: in altre parole nelle nuove coordinate le equazioni di Hamilton si scrivono così:

$$\begin{cases} \dot{\xi} = -i \frac{\partial H(\xi, \eta)}{\partial \eta}, \\ \dot{\eta} = i \frac{\partial H(\xi, \eta)}{\partial \xi}. \end{cases} \quad (2.15)$$

Queste nuove variabili, lo vedremo ampiamente in seguito, sono particolarmente comode per descrivere l'oscillatore armonico, la cui hamiltoniana $H_0 = (p^2 + \omega^2 q^2)/2$ diventa $H_0 = \omega \xi \eta = \omega z \bar{z}$, cosicché le equazioni di Hamilton forniscono immediatamente il flusso di fase: $z \mapsto z e^{-i\omega t}$, $\bar{z} \mapsto \bar{z} e^{i\omega t}$. Si tratta perciò di una rotazione uniforme nel piano complesso, questo a sottolineare la ben nota proprietà di isocronia dell'oscillatore armonico.

Osserviamo ora che la quantizzazione canonica delle variabili ξ, η dà luogo ai noti operatori di raising e di lowering sugli stati dell'oscillatore

armonico:

$$\begin{cases} \hat{\xi} \equiv \hat{a} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \hat{q} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2\omega}}, \\ \hat{\eta} \equiv \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \hat{q} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2\omega}}. \end{cases} \quad (2.16)$$

Viene spontaneo domandarsi se tale "rotazione di $\pi/4$ " sia possibile anche in meccanica quantistica, cioè se si possa trovare uno spazio di Hilbert su cui $\hat{\xi}$ agisca come pura derivazione e $\hat{\eta}$ come pura moltiplicazione. Effettivamente, come osservò Fock, le regole di commutazione canoniche sono soddisfatte se si prende $\hat{\xi} = \hbar\partial_\eta = \hbar\partial_z$, $\hat{\eta} = \eta = z$. Il problema sarebbe quindi "solo" quello di trovare uno spazio in cui tutto questo avvenga in maniera "pulita": l'idea portante, di Bargmann, è che se vogliamo trovare uno spazio di funzioni d'onda dipendenti solo da una coordinata canonica (esattamente come le funzioni d'onda della rappresentazione di Schrödinger dipendono dalla sola q) dobbiamo prendere delle $\Psi(z, \bar{z})$ che dipendano solo da z , in altre parole che siano olomorfe intere di z . Questo ci conduce alla seguente

Definizione 2.2 (SPAZIO DI BARGMANN-FOCK). *Si definisce spazio di Bargmann-Fock il seguente*

$$\mathcal{F} \equiv \{ \Psi(z) \text{ olomorfa in } z; \|\Psi\|_{\mathcal{F}}^2 < \infty \}.$$

corredato di prodotto scalare

$$\langle \Psi, \Phi \rangle_{\mathcal{F}} \equiv \frac{\omega}{\pi\hbar} \int \overline{\Psi(z)} \Phi(z) \exp \left\{ -\frac{\omega}{\hbar} |z|^2 \right\} d^2z$$

e di norma

$$\|\Psi\|_{\mathcal{F}} \equiv \sqrt{\langle \Psi, \Psi \rangle_{\mathcal{F}}}.$$

Tale definizione è subito utilizzata nel teorema che stabilisce, come vuole Von Neumann, la corrispondenza unitaria fra la rappresentazione di Schrödinger e quella di Bargmann-Fock.

Teorema 2.3 (BARGMANN). *Si consideri per ogni $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ la trasformata integrale*

$$\Psi(z) = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \int \exp \left\{ -\frac{\omega}{\hbar} \left(\frac{z^2}{2} + \frac{q^2}{2} - \sqrt{2}zq \right) \right\} \psi(q) dq.$$

Allora l'operatore $U : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{F}$ definito da $\psi \mapsto \Psi \equiv U\psi$ è unitario. Inoltre le immagini unitarie degli operatori canonici e degli operatori raising e lowering sono date dai seguenti operatori massimali ¹¹ in \mathcal{F} :

$$\begin{aligned}(U\hat{q}U^{-1}\Psi)(z) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(z + (\hbar/\omega)\partial_z)\Psi(z), \\(U\hat{p}U^{-1}\Psi)(z) &= \frac{i}{\sqrt{2}}(\omega z - \hbar\partial_z)\Psi(z), \\(U\hat{a}^+U^{-1}\Psi)(z) &= \sqrt{\omega}z\Psi(z), \\(U\hat{a}U^{-1}\Psi)(z) &= \frac{\hbar}{\sqrt{\omega}}\partial_z\Psi(z).\end{aligned}$$

L'immagine unitaria dell'hamiltoniana dell'oscillatore armonico, come prima definita, è data, in \mathcal{F} , da

$$U\hat{H}_0U^{-1} \equiv \hat{S}_0 = \hbar\omega z\partial_z + \frac{\hbar\omega}{2}$$

definito sul dominio massimale.

Sono queste ultime formule che realizzano quella "rotazione di $\pi/4$ " che cercavamo in precedenza: come si voleva, abbiamo trovato una rappresentazione in cui l'operatore (con abuso di notazione usiamo nello spazio di Fock lo stesso nome che avevamo usato per le controimmagini in $L^2(\mathbb{R})$) $\hat{\xi}$ agisce come moltiplicazione e $\hat{\eta}$ come derivazione (si confronti l'ultimo teorema con le (2.16)).

Per completare le prescrizioni di quantizzazione dobbiamo ricordare, al solito, la regola di Weyl. Un algoritmo che permette di applicarla con facilità è il prodotto simmetrico di Berezin-Shubin.

Definizione 2.4 (PRODOTTO SIMMETRICO). *Si definisce prodotto simmetrico delle potenze m -esima ed n -esima di due operatori non commutanti A e B il coefficiente di $\binom{m+n}{n}x^m y^n$ nello sviluppo di $(Ax + By)^{m+n}$, con $x, y \in \mathbb{R}$. Esso verrà denotato con $\Pi_s(A^m B^n)$.*

¹¹ Massimali significa che vengono definiti sul dominio massimo per cui ha senso definire una certa operazione in \mathcal{F} ; per esempio $D(\partial_z) = \{\Psi \in \mathcal{F}; (d\Psi/dz) \in \mathcal{F}\}$.

Se è allora dato l'osservabile classico intero

$$f(\xi, \eta) = \sum_{m,n} f_{mn} \xi^m \eta^n, \quad (2.17)$$

la sua quantizzazione canonica (di Weyl) è definita come

$$\hat{f} = \sum_{m,n} f_{mn} \Pi_s(\hat{\xi}^m \hat{\eta}^n), \quad (2.18)$$

dove è importante precisare che l'operatore formale $\Pi_s(\hat{\xi}^m \hat{\eta}^n)$ va inteso definito sul dominio massimale.

Definito il procedimento per associare univocamente un operatore formalmente autoaggiunto in \mathcal{F} ad ogni osservabile classico olomorfo intero, discutiamo ora un altro aspetto della quantizzazione che assume una forma particolarmente illuminante, soprattutto per lo studio dell'evoluzione quantistica, in questa rappresentazione di Bargmann.

Consideriamo in \mathcal{F} l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo per l'oscillatore armonico. Se trascuriamo nella hamiltoniana S_0 la costante additiva $\hbar\omega/2$, che comunque non avrebbe altro effetto se non quello di fissare la condizione iniziale a $t = 1/2$ anziché a $t = 0$, possiamo scrivere l'equazione

$$\hbar\omega z \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial z} = i\hbar \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial t}, \quad (2.19)$$

che, assegnata una condizione iniziale $\Psi_0 \in \mathcal{F}$, verrà risolta evidentemente dalla formula

$$\Psi(z, t) = \Psi_0(ze^{-i\omega t}). \quad (2.20)$$

Definendo, al solito, come propagatore al tempo t quell'operatore, necessariamente unitario, che associa ad ogni stato considerato come stato iniziale, la corrispondente soluzione dell'equazione di Schrödinger al tempo t , le ultime due formule affermano che nello spazio di Bargmann-Fock il propagatore dell'oscillatore armonico ha la forma

$$(U(t)\Psi_0)(z) = \Psi_0(ze^{-i\omega t}). \quad (2.21)$$

È questa una formula di notevole interesse per quanto riguarda la quantizzazione; abbiamo infatti visto che nelle coordinate (z, \bar{z}) l'evoluzione dell'oscillatore armonico è data da $z \mapsto ze^{-i\omega t}$. Quello che accade è che l'evoluzione quantistica ha una corrispondenza banale con quella classica, o, per meglio dire, è determinata esattamente per ogni arbitrario tempo t , da essa. Difatti, ad ogni t , possiamo quantizzare esattamente come se fossimo all'istante $t = 0$, ottenendo l'evoluto quantistico scaturito dalla quantizzazione $t = 0$. In parole molto più povere è commutativo il diagramma in fig.5, che ci mostra chiaramente come l'evoluzione commuti con la quantizzazione, *per l'oscillatore armonico*.

Questa proprietà è ben lungi dall'essere valida in generale; anzi, nel caso di potenziali che crescono all'infinito, questa è una proprietà dell'oscillatore armonico al pari della sua isocronia, che rappresenta la ragione profonda della sua validità. Essa infatti implica che la funzione di evoluzione classica della variabile z sia una rotazione *uniforme*; dunque tale trasformazione, ovviamente canonica come risultato della teoria di Hamilton-Jacobi, è lineare. Orbene, è noto il risultato attribuito a Van Hove, e comunque ridimostrato ampiamente da Bargmann:

Teorema 2.5. *Le sole trasformazioni canoniche che lasciano invariante la quantizzazione, cioè che forniscono rappresentazioni fra loro unitariamente equivalenti delle regole di commutazione canoniche, sono quelle lineari (reali o complesse).*

Torniamo ora al propagatore dell'oscillatore armonico, e facciamo vedere come la proprietà di premutabilità fra evoluzione e quantizzazione, che conserva la *coerenza* degli stati, permetta di rappresentare $U(t)$ sotto una forma più consueta, cioè come operatore integrale il cui nucleo sarà formato da oggetti che meriteranno il nome di *stati coerenti*. Per prima cosa osserviamo che l'insieme di vettori

$$u_n(z) \equiv \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} z \right)^n \quad (2.22)$$

costituisce un sistema ortonormale completo; infatti si può vedere che per

definizione, chiamando sempre con \hat{a}^+ l'operatore di raising in \mathcal{F} ,

$$u_n \equiv \frac{1}{\sqrt{n\pi}} \hat{a}^+ u_{n-1}. \quad (2.23)$$

Allora questi stati sono i trasformati sotto U degli autostati dell'oscillatore armonico, che sono noti per essere una base ortonormale in $L^2(\mathbb{R})$.¹²

Prendiamo opportune combinazioni lineari di questi:

Definizione 2.6 (STATI COERENTI). *Si definiscono stati coerenti, nella rappresentazione di Bargmann, i vettori della forma:*

$$e_w(z) \equiv \exp \left\{ \frac{\omega}{\hbar} \bar{w} z \right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\omega}{\hbar} \right)^n \frac{\bar{w}^n z^n}{n!}.$$

Si può vedere che gli antitrasformati secondo l'operatore di U di Bargmann di questi stati sono funzioni d'onda gaussiane piccate in un certo punto (q, p) dello spazio di fase. Vale il seguente

Teorema 2.7. *Gli stati coerenti godono delle seguenti proprietà:*

a)
$$e_w(z e^{-i\omega t}) = e_{w e^{i\omega t}}(z);$$

b)
$$\Psi(w) = \frac{\omega}{\pi \hbar} \int \overline{e_w(z)} \Psi(z) \exp \left\{ -\frac{\omega}{\hbar} |z|^2 \right\} d^2 z.$$

La prima di tali proprietà è ovvia. Per dimostrare la seconda si può procedere formalmente usando la proprietà di completezza degli $\{u_n\}$. Infatti, si può scrivere

$$e_w(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \overline{u_n(w)} u_n(z), \quad (2.24)$$

da cui

$$\langle e_w, \Psi \rangle_{\mathcal{F}} = \sum_{n=0}^{\infty} u_n(w) \langle u_n, \Psi \rangle_{\mathcal{F}} = \Psi(w). \quad (2.25)$$

¹² Fra l'altro possiamo rovesciare l'ordine delle asserzioni fatte e usare l'ortonormalità e completezza degli $u_n \in \mathcal{F}$ (la qual cosa è abbastanza banale) per dimostrare l'analoga affermazione in L^2 , che richiederebbe l'uso della teoria spettrale.

La b) mostra come gli stati coerenti siano una base continua in \mathcal{F} : essi si comportano esattamente come una δ di Dirac. Analoga affermazione, vista l'equivalenza unitaria, varrà per gli stati coerenti gaussiani nella rappresentazione di Schrödinger. Si suole dire che questi stati costituiscono un *nucleo autoriproduttore*.

Dalla (2.21), usando i risultati di questo teorema, ricaviamo il propagatore sottoforma di operatore integrale:

$$(U(t)\Psi_0)(w) = \frac{\omega}{\pi\hbar} \int \overline{e_w(z e^{i\omega t})} \Psi_0(z) \exp\left\{-\frac{\omega}{\hbar}|z|^2\right\} d^2z. \quad (2.26)$$

Da qui, usando l'operazione U^{-1} di antitrasformazione di Bargmann, si può ricavare l'espressione consueta del propagatore nello spazio delle q . La semplicità di questa e delle precedenti formule sono la miglior giustificazione dell'introduzione dello spazio di Bargmann-Fock, sebbene per equivalenza unitaria tutto si sarebbe potuto dire nella rappresentazione di Schrödinger.

Si è vista, precedentemente, la regola per associare univocamente ad una variabile dinamica classica reale un operatore formalmente autoaggiunto nello spazio degli stati.

Se, viceversa, dato un operatore formalmente autoaggiunto, possiamo determinare un osservabile classico che, una volta quantizzato secondo la regola da noi scelta (ad esempio quella di Weyl), riproduce tale operatore diremo che quest'osservabile è il suo *simbolo*. Sono sufficienti le nozioni che già abbiamo per fare qualche considerazione.

Non è detto che tutti gli operatori formalmente autoaggiunti su \mathcal{H} ammettano simbolo.

Non necessariamente un dato operatore quantistico ammette come simbolo la funzione delle coordinate canoniche che descrive la stessa grandezza fisica in meccanica classica. Il punto è che una determinata variabile dinamica può essere tradotta in più modi come operatore: si prenda come esempio la famiglia di operatori $t\hat{q}\hat{p} + (1-t)\hat{p}\hat{q}$ ($t \in \mathbb{R}$); tutti questi operatori descrivono la grandezza classica qp , ma, essendo diversi, uno solo sarà uguale al corrispondente quantistico, cioè $[qp]^\wedge$ (nella regola di Weyl tale operatore è quello con $t = 1/2$).

La corrispondenza operatori-simboli non conserva la struttura algebrica delle osservabili classiche. Il simbolo del commutatore di due operatori non è in generale uguale alla parentesi di Poisson dei loro simboli. Come esempio si prendano le seguenti ovvie corrispondenze $p^2 \mapsto \hat{p}^2$ e $q^4 \mapsto \hat{q}^4$. Si ha che

$$\begin{aligned}
[\hat{p}^2, \hat{q}^4]\psi &= -\hbar^2[\partial_q^2(q^4\psi) - q^4\partial_q^2\psi] = \\
&= -\hbar^2[12q^2\psi + 8q^3\partial_q\psi] = -\hbar^2 12\hat{q}^2\psi - i\hbar 8\hat{q}^3\hat{p}\psi = \quad (2.27) \\
&= i\hbar\{p^2, q^4\}^{\wedge}\psi - \hbar^2 12\hat{q}^2\psi.
\end{aligned}$$

Questo è il primo esempio (ne parleremo poi un po' più diffusamente) di *correzione quantistica*, in questo caso all'ordine \hbar .

Proseguendo possiamo dare un esempio di come addirittura il simbolo del prodotto di due operatori, anche coincidenti, non è il prodotto dei simboli dei due operatori. Si consideri l'operatore $(\hat{p}^2 + \hat{q})$ avente ovviamente simbolo $(p^2 + q)$. Il quadrato del simbolo è la funzione $p^4 + q^2 + 2p^2q$: quantizziamola con la regola del prodotto simmetrico; otterremo:

$$\hat{p}^4 + \hat{q}^2 + 2\Pi_s(\hat{p}^2\hat{q}) = \hat{p}^4 + \hat{q}^2 + \frac{2}{3}(\hat{p}^2\hat{q} + \hat{p}\hat{q}\hat{p} + \hat{q}\hat{p}^2). \quad (2.28)$$

Invece il quadrato dell'operatore vale:

$$(\hat{p}^2 + \hat{q})^2 = \hat{p}^4 + \hat{q}^2 + \hat{p}^2\hat{q} + \hat{q}\hat{p}^2. \quad (2.29)$$

Quindi gli operatori mostrati nelle due precedenti formule, essendo diversi, avranno simboli diversi.

Questi semplici esempi ci mostrano comunque una cosa: è vero sì che il simbolo di un dato operatore non è necessariamente quello che si aspetterebbe guardando la forma (polinomiale, per esempio) dell'operatore come funzione degli operatori canonici, ma è altrettanto vero che la differenza fra il vero simbolo e la variabile dinamica classica descritta da quell'operatore è come minimo dell'ordine \hbar . In altre parole, la corrispondenza biunivoca è ristabilita all'ordine \hbar^0 . Questo non ci stupisce visto che a creare difficoltà era la non-commutazione degli operatori canonici: di fatto, però il loro

commutatore è dell'ordine \hbar e quindi possiamo dire che essi commutino in approssimazione zero.

Ammetteremo d'ora in poi che qualsiasi operatore associabile ad una variabile dinamica ammetta simbolo ¹³. Quanto appena detto ci fa pensare che ogni operatore formalmente autoaggiunto che abbia controparte classica (denotiamolo con \hat{A}) abbia simbolo esprimibile sotto la forma

$$A(q, p; \hbar) = \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j a_j(q, p), \quad (2.30)$$

dove $a_0(q, p) \equiv a(q, p)$ viene detto *simbolo principale*, mentre gli altri termini prendono il nome di *correzioni quantistiche*. Nello spazio di Bargmann-Fock ci attendiamo uno sviluppo della medesima forma, con le coordinate canoniche (η, ξ) al posto delle (q, p) .

Fin qui si è proceduto solo formalmente da un punto di vista matematico, mentre i problemi sono sostanziali:

- 1) Se vogliamo procedere nella direzione inversa rispetto a quanto detto negli ultimi paragrafi, cioè se, dato un simbolo nella forma (2.30), vogliamo riottenere l'operatore dal quale esso è stato generato, dobbiamo risolvere il problema di sapere come si quantizzano i termini della somma, cioè dobbiamo sapere cosa si intende per $[a_j(q, p)]^\wedge$. La regola di Schrödinger-Weyl risponde alla domanda se $a_j(q, p)$ è un polinomio, ma come si quantizza una funzione non polinomiale?
- 2) Risolto il punto 1), che senso si deve dare allo sviluppo in serie della (2.30)?
- 3) Bisogna poi essere in grado, una volta determinata la topologia dello sviluppo (2.30), di effettuare tecnicamente l'operazione inversa della quantizzazione, cioè di trovare il simbolo di un determinato operatore semiclassico.

A queste domande risponde la teoria degli *operatori pseudodifferenziali*.

¹³ Questa condizione non è in realtà restrittiva. Per la sua discussione si veda la bibliografia citata qui e più avanti.

Richiamiamo ora alcuni concetti basilari del calcolo psuedodifferenziale evitando accuratamente le dimostrazioni, che comunque possono essere trovate nella bibliografia, vedi per esempio [FM] o [F]. Noi, interessati soprattutto allo sviluppo dei simboli in serie di potenze in \hbar , ci atterremo ai ricercatori della scuola francese ([RH] e [He]), adeguandoci anche un po' alle loro notazioni; ulteriori referenze sono citate in [Gr].

Per ogni m reale, si definisce la classe dei simboli S^m nella seguente maniera: $a \in S^m \Leftrightarrow a \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ tale che $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}^n \exists C_{\alpha, \beta}$ per cui

$$(\lambda(x, \xi))^{-m+|\alpha|+|\beta|} |\partial_\xi^\alpha D_x^\beta a(x, \xi)| \leq C_{\alpha, \beta} \quad \forall (x, \xi) \in \mathbb{R}^{2n}; \quad (2.31)$$

dove $|\alpha| \equiv \alpha_1 + \dots + \alpha_n$ si chiama *altezza* del multiindice α e dove si è denotata con $D_x^\beta \equiv (-i)^{|\beta|} \partial_x^\beta$ la *derivazione simmetrica*. λ è la funzione peso data da $\lambda(x, \xi) \equiv (1 + |x|^2 + |\xi|^2)^{1/2}$.

Se denotiamo la classe delle funzioni di Schwartz con $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \equiv \{u \in C^\infty(\mathbb{R}^n); x^\alpha u(x) \rightarrow 0 \text{ per } |x| \rightarrow \infty, \forall \alpha \in \mathbb{N}^n\}$ allora ad ogni $a \in S^m$ possiamo associare l'operatore

$$(\hat{A}u)(x) \equiv a^W(x, D)u(x) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int \int e^{i(x-y)\cdot\xi} a\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) u(y) dy d\xi, \quad (2.32)$$

definito per $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Questa quantizzazione, lo si può mostrare, è esattamente la quantizzazione di Weyl. Non stiamo qui a parlare del problema dell'estensione di \hat{A} ad un dominio più grande di $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, ma supporremo direttamente, d'ora in poi, che sia definito sul suo dominio massimale.

Si indica con \mathcal{L}^m lo spazio degli operatori (pseudodifferenziali, appunto) $a^W(x, D)$ tali che $a \in S^m$. Si avrà bisogno anche dello spazio di Sobolev a peso associato:

$$H^m(\mathbb{R}^n) \equiv \{\hat{A}u; u \in L^2(\mathbb{R}^n), \hat{A} \in \mathcal{L}^{-m}\}. \quad (2.33)$$

Si mostra che se $m \geq 0$, $H^m = \text{Dom}(-\Delta + |x|^2)^{m/2}$, mentre se $m < 0$, $H^m = (-\Delta + |x|^2)^{-m/2}(L^2)$.

Data l'ambientazione generale in cui ci si muove nel calcolo pseudodifferenziale, vogliamo ora introdurre il paramentro \hbar e cominciare così a

trattare degli operatori di tipo semiclassico o, come diremo qui di seguito seguendo la notazione di Helffer e Robert, *operatori ammissibili*.

Si dà la seguente definizione:

Definizione 2.8 (SIMBOLO AMMISSIBILE). *Si dice che a è un simbolo ammissibile di ordine m , e si scrive $a \in S_{ad}^m$, se esiste $\hbar_0 > 0$ tale che: $a \in C^\infty([0, \hbar_0[\times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$, $(\partial^j a / \partial \hbar^j)|_{\hbar=0} \in S^{m-j} \forall j \in \mathbb{N}$. Inoltre deve darsi che per tutti gli $N \in \mathbb{N}$,*

$$\hbar^{-N-1} \left(a(\hbar; x, \xi) - \sum_{j=0}^N \frac{\hbar^j}{j!} \frac{\partial^j}{\partial \hbar^j} a(0; x, \xi) \right)$$

descrive un limitato di S^{m-N-1} quando $\hbar \in [0, \hbar_0[$. In questo caso, allora, si porrà $a_j(x, \xi) = (1/j!)(\partial^j / \partial \hbar^j)a(0; x, \xi)$ e si scriverà $a \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j a_j$.

Nonostante l'ovvietà di quello che sto per dire, vale la pena di ricordare che se a non ha tutte le derivate rispetto ad \hbar , cioè se la serie di Taylor si tronca, il simbolo è ammissibile. Ora, se $a \in S_{ad}^m$, gli si può associare in maniera naturale l'operatore $\hat{A}(\hbar) = a^W(\hbar; x, \hbar D) = a^W(\hbar; \hat{q}, \hat{p})$.

Definizione 2.9 (OPERATORE AMMISSIBILE). *Si chiama operatore ammissibile di ordine m una applicazione $\hat{A} :]0, \hbar_0[\rightarrow \mathcal{L}^m$ tale che esiste una successione di funzioni $a_j \in S^{m-j}$, $j \in \mathbb{N}$, tali che, per ogni coppia di naturali N e k con $k \leq N + 1$,*

$$\hbar^{-N-1+k+m} \left(\hat{A}(\hbar) - \sum_{j=0}^N \hbar^j a_j^W(x, \hbar D) \right)$$

descrive un limitato di $\mathcal{L}(H^{l+m}, H^{l+k}) \forall l \in \mathbb{R}$, quando $\hbar \in [0, \hbar_0[$.

Va di seguito la notevole

Proposizione 2.10. *Condizione necessaria e sufficiente affinché*

$$a(\hbar; x, \xi) \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j a_j(x, \xi)$$

nel senso dei simboli ammissibili, è che

$$a^W(\hbar; x, \hbar D) \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j a_j^W(x, \hbar D)$$

nel senso degli operatori ammissibili.

Abbiamo cioè formalizzato, nella teoria degli operatori pseudodifferenziali, quale significato dare alla (2.30) e anche alla sua quantizzata, cioè l'analoga formula con gli operatori al posto dei simboli. Ora *sappiamo*, nel senso del rigore matematico, cos'è un operatore di tipo semiclassico.

Talvolta si preferisce, per motivi di simmetria, lavorare con gli operatori $\hat{A}_1(\hbar) = a^W(\hbar; \sqrt{\hbar}x, \sqrt{\hbar}D)$. Questi sono legati ai precedenti dalla relazione

$$\hat{A}(\hbar) = T_{\hbar}^{-1} \hat{A}_1(\hbar) T_{\hbar} \quad \text{con} \quad (T_{\hbar} f)(x) \equiv \hbar^{n/4} f(\sqrt{\hbar}x). \quad (2.34)$$

La prima cosa che si può studiare su questa corrispondenza semiclassica simboli-operatori è la *regola di composizione*, cioè la formula che dà il simbolo del prodotto di due operatori in funzione dei loro simboli; è ovvio che tale regola non può essere una banale moltiplicazione perché la moltiplicazione fra simboli commuta mentre quella fra operatori non lo fa. Però questo discorso ci fa aspettare, visto che i commutatori quantistici sono tutti almeno dell'ordine \hbar , che almeno il simbolo principale sia il prodotto dei simboli principali. Vedremo che è così:

Teorema 2.11 (REGOLA DI COMPOSIZIONE). *Siano $a \in S_{ad}^m$ e $b \in S_{ad}^p$ dove $m, p \in \mathbb{R}$. Per ogni $\hbar \in]0, \hbar_0[$ poniamo*

$$\hat{C}(\hbar) \equiv \hat{A}(\hbar) \hat{B}(\hbar),$$

come da definizione 2.9. Allora $\hat{C}(\hbar)$ ammette simbolo ammissibile che si denoterà con $c = a \odot b \in S_{ad}^{m+p}$. Se

$$a \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j a_j \quad \text{e} \quad b \sim \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j b_j,$$

allora $c \sim \sum_j \hbar^j c_j$ dove le c_j sono date dalla:

$$c_j = \sum_{|\alpha+\beta|+k+l=j} \frac{1}{\alpha!\beta!} \left(\frac{1}{2}\right)^{|\alpha|} \left(-\frac{1}{2}\right)^{|\beta|} (\partial_\xi^\alpha D_x^\beta a_k) (\partial_\xi^\beta D_x^\alpha b_l).$$

Come si vede, quindi, $c_0 = a_0 b_0$.

Ritorniamo alla meccanica quantistica ed al problema della quantizzazione. Ci si può chiedere: a cosa serve conoscere una strumentazione così complicata se gli operatori che effettivamente si adoperano come "osservabili", cioè come quantità effettivamente misurate in un esperimento, come l'energia, la quantità di moto, ecc., sono tutti così semplici da non avere correzioni quantistiche?

Un primo fatto importante è che gli operatori pseudodifferenziali di tipo semiclassico formano un'algebra con unità, cioè, quando esistono, anche gli inversi sono operatori di tipo semiclassico; per esempio, anche se l'hamiltoniana \hat{H} non ha correzioni quantistiche si può dimostrare che il risolvete $\hat{R}(z, \hat{H}) \equiv (\hat{H} - z\mathbb{I})^{-1}$, per $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, le ha non nulle a tutti gli ordini. Un altro caso del genere, ancora più importante ¹⁴, è il propagatore $\hat{U}^t = e^{it\hat{H}/\hbar}$.

Un secondo fatto forse ancora più profondo è legato al comportamento delle relazioni fra operatori e simboli rispetto alle trasformazioni canoniche classiche. Abbiamo già osservato come la quantizzazione di due osservabili classiche ottenibili l'una dall'altra per trasformazione canonica non dia origine a due operatori unitariamente equivalenti. La corrispondenza fra operatori e simboli permette di chiarire molto meglio questo punto. Vale infatti il seguente teorema fondamentale, dovuto originalmente al matematico russo Egorov, che, enunciato per semplicità in un solo grado di libertà e nella rappresentazione di Schrödinger-Weyl, afferma:

Teorema 2.12 (EGOROV). *Sia dato un operatore ammissibile \hat{A} di simbolo $a \in S_{ad}^m$ avente sviluppo $a(\hbar; q, p) \sim \sum_j \hbar^j a_j(q, p)$. Sia $\mathcal{C} : (q, p) \mapsto$*

¹⁴ È importante anche per il nostro problema dell'ergodicità quantistica: se infatti l'operatore \hat{U}^t avesse banalmente simbolo $e^{itH(q,p)/\hbar}$ sarebbe troppo facile ricostruire l'evoluzione classica a partire da quella quantistica.

(q', p') una trasformazione canonica. Allora esiste un operatore \hat{B} , unitariamente equivalente ad \hat{A} , di simbolo $b \in S_{ad}^m$, tale che i due simboli principali valgono

$$a_0(q, p) = b_0(\mathcal{C}(q, p)).$$

Inversamente, se \hat{A} e \hat{B} sono due operatori ammissibili unitariamente equivalenti, allora esiste una trasformazione canonica tale che i loro simboli principali $a_0(q, p)$ e $b_0(q', p')$ sono l'immagine l'uno dell'altro attraverso di essa.

Questo teorema chiarisce dunque il ruolo delle correzioni quantistiche assieme al motivo per cui è stata introdotta una simile locuzione: occorre aggiungerle se, una volta fissato il procedimento di quantizzazione, si vogliono ottenere operatori fra loro unitariamente equivalenti che quantizzino variabili dinamiche classiche immagine l'una dell'altra attraverso una trasformazione canonica: infatti le operazioni di quantizzazione e di trasformazione canonica con commutano (a meno che la trasformazione non sia lineare, come ricordato in precedenza).

L'associazione fra operatori e simboli, che mette in particolare risalto l'esistenza delle correzioni quantistiche, ci permette di affrontare sotto una nuova e più moderna luce la relazione fra i livelli quantistici esatti (ricordiamo che con questa locuzione intendiamo gli autovalori dell'equazione di Schrödinger stazionaria) e quelli di Bohr-Sommerfeld.

Scriveremo quelle poche formule che si possono scrivere su quest'argomento nella rappresentazione di Bargmann-Fock, sulla quale, come avevamo accennato, si può costruire la teoria degli operatori pseudodifferenziali così come l'abbiamo introdotta nelle variabili (q, p) .¹⁵ I simboli degli operatori pseudodifferenziali di tipo semiclassico saranno dunque funzioni del tipo:

$$A(\xi, \eta; \hbar) = \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j a_j(\xi, \eta). \quad (2.35)$$

¹⁵ In realtà quest'adattamento al caso di Bargmann-Fock è tutt'altro che immediato dal punto di vista tecnico. Siccome però abbiamo deciso di trascurare i dettagli tecnici, andiamo pure avanti da un punto di vista formale, consci però della difficoltà degli argomenti che stanno dietro a quello che affermiamo.

Di particolare interesse è il simbolo $H_0 = \omega\xi\eta$, il cui quantizzato è, come al solito seguendo la regola di Weyl,

$$\hat{H}_0 = \omega\hbar z \frac{d}{dz} + \frac{\omega\hbar}{2}, \quad (2.36)$$

i cui autovalori, se ci ricordiamo che gli u_n della (2.22) sono per la (2.23) gli autostati di \hat{H}_0 , sono dati dalla seguente formula:

$$E_n = \langle u_n, \hat{H}_0 u_n \rangle = \omega\hbar(n + 1/2). \quad (2.37)$$

Ma sappiamo che $\xi\eta = I$, per cui $H_0(\xi, \eta) = H_0(I)$, il che ci dice che la formula soprastante, che ci fornisce gli autovalori esatti dell'oscillatore armonico, può essere riscritta come $E_n = H_0((n + 1/2)\hbar)$, che è una formula alla Bohr-Sommerfeld con indice di Maslov (che come abbiamo detto è del tutto ininfluenza, sia dal punto di vista teorico, sia per quanto riguarda i conti). Abbiamo ritrovato cioè il risultato che già avevamo anticipato, e cioè che l'approssimazione di Bohr-Sommerfeld è praticamente esatta per l'oscillatore armonico.

Ora però diciamo qualcosa in più, e cioè che tale proprietà vale per qualsiasi operatore hamiltoniano il cui simbolo sia funzione di ξ, η solo attraverso il prodotto $\xi\eta$. Prendiamo ad esempio un polinomio $f(\xi\eta; \hbar) = \sum_j c_j(\hbar)(\xi\eta)^j$: il suo quantizzato è ovviamente $\hat{f} = \sum_j c_j(\hbar)(\hat{H}_0/\omega)^j$. Ora, gli u_n , che sono una base di autostati dell'oscillatore armonico, saranno tutti e soli gli autostati di \hat{f} , per cui gli autovalori si calcolano nel solito modo:

$$E_n(\hat{f}) = \langle u_n, \hat{f} u_n \rangle = \sum_j c_j(\hbar) [(n + 1/2)\hbar]^j \equiv f((n + 1/2)\hbar; \hbar), \quad (2.38)$$

la quale è ancora una formula di Bohr-Sommerfeld.

Siamo ora in grado di cominciare ad affrontare in termini quantitativi uno dei problemi fondamentali che sono oggetto di questa sezione: la relazione fra i livelli energetici di Bohr-Sommerfeld e quelli esatti provenienti dalla risoluzione dell'equazione di Schrödinger stazionaria.

Dato infatti l'operatore di Schrödinger $\hat{S}(\hat{z}, \hbar\partial_z)$ che proviene dalla quantizzazione di Weyl dell'osservabile $S(\xi, \eta)$, si può provare a costruire

una trasformazione unitaria tale che il simbolo dell'operatore trasformato $\hat{\Sigma} \equiv U\hat{S}U^{-1}$ abbia la forma

$$\Sigma(\xi\eta; \hbar) = \sum_j \hbar^j \sigma_j(\xi\eta). \quad (2.39)$$

Se questa costruzione fosse possibile, l'operatore $\hat{\Sigma}$ diverrebbe funzione dell'oscillatore armonico, e pertanto:

$$E_n(\hat{S}; \hbar) = \sum_j \hbar^j \sigma_j((n + 1/2)\hbar). \quad (2.40)$$

D'altra parte il simbolo principale di $\hat{\Sigma}$ sarebbe $\sigma_0(\xi\eta) = \sigma_0(I) \equiv H(I)$ (che il simbolo principale sia una nuova hamiltoniana è conseguenza del teorema di Egorov: difatti l'operatore unitario U induce una trasformazione canonica sui simboli principali: ora, visto che il simbolo principale di $\hat{\Sigma}$ dipende solo dalle azioni, è chiaro che la trasformazione canonica in questione è proprio quella in variabili azione-angolo, che porta l'hamiltoniana ad essere funzione delle sole azioni). Quindi il termine di indice 0 nella formula precedente coinciderebbe con la formula di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld, mentre i termini successivi ne rappresenterebbero le correzioni quantistiche. Cioè potremmo riscrivere la (2.40) sotto la forma

$$E_n(\hat{S}; \hbar) = E_n^{BS}(\hbar) + \sum_{j \geq 1} \hbar^j E_n^j(\hbar), \quad (2.41)$$

dove, ovviamente, gli $E_n^{BS}(\hbar) = H((n + 1/2)\hbar)$ sono i livelli di Bohr-Sommerfeld, mentre gli $E_n^j(\hbar) = \sigma_j((n + 1/2)\hbar)$ sono le correzioni quantistiche che, sommate ai livelli di Bohr-Sommerfeld, dovrebbero dare i livelli esatti.

La formula soprastante, se ottenibile, darebbe una soluzione completa del problema in questione perché costituirebbero *una funzione di quantizzazione esatta*. Infatti la conoscenza di una sola funzione dell'azione classica, e precisamente il simbolo $\Sigma(\xi\eta) = \Sigma(I)$, permetterebbe di determinare **tutti** i livelli energetici mediante la regola di quantizzazione dell'azione classica: $I = (n + 1/2)\hbar$. È chiaro inoltre che le correzioni quantistiche sarebbero tanto più trascurabili quanto più si sia vicini al limite classico "sul

toro”¹⁶. Avremmo potuto impostare la discussione nella rappresentazione di Schrödinger cercando una trasformazione unitaria tale che il simbolo dell’operatore trasformato $\hat{\Theta} = U\hat{S}U^{-1}$ avesse la forma

$$\Theta\left(\frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2); \hbar\right) = \sum_j \hbar^j \theta_j\left(\frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2)\right). \quad (2.42)$$

Chiarito cosa sarebbe auspicabile ottenere, dobbiamo ovviamente chiederci se e quando sia possibile costruire una trasformazione unitaria che diagonalizzi il dato operatore di Schrödinger stazionario in modo tale che il nuovo simbolo abbia la forma voluta. Poiché assumiamo sempre che tale operatore sia diagonalizzabile (sulla base degli autostati dell’oscillatore armonico), e sappiamo che la trasformazione che lo porta in forma diagonale è unica¹⁷, è chiaro che potremo aspettarci un simbolo trasformato della forma (2.39) o (2.42), solo per quegli \hat{S} che commutino con l’oscillatore armonico, e che quindi ne risultino una funzione. Si tratta però di una classe non certo ampia di operatori di Schrödinger.

Bisogna poi osservare che per loro natura gli sviluppi in serie di potenze di \hbar dei simboli degli operatori di tipo semiclassico vanno considerati come sviluppi asintotici più che come sviluppi convergenti. Questo comporta la concessione *a priori* di un errore avente sviluppo in serie di potenze nullo in \hbar , di modo che le formule di quantizzazione esatte nel senso sopra definito non saranno più tali in generale, ma valide, come si suole dire, modulo \hbar^∞ . Ciò significa che l’errore che si commette sostituendo agli autovalori esatti la serie (2.41) troncata all’ordine ν è di ordine $\hbar^{\nu+1}$ per ogni $\nu \in \mathbb{N}$. D’ora in poi parlando di formula di quantizzazione esatta la intenderemo sempre in questo senso.

¹⁶ Che verrà definito in sezione 5. Qui possiamo accennare che si tratta di mandare $\hbar \rightarrow 0$ con $I = \text{costante}$.

¹⁷ Per essere precisi, è unica, a meno di fasi moltiplicative, se lo spettro di \hat{S} è semplice e se, ma questo viene dato per scontato, la diagonalizzazione è fatta in modo che gli elementi in diagonale siano ordinati in maniera crescente. La semplicità dello spettro è gratuita nel caso unidimensionale, mentre viene presa come ipotesi, è questo non è affatto scontato, nel caso di più dimensioni.

Ci chiediamo ora: è possibile, magari usando tecniche diverse, o richiedendo risultati meno forti, ampliare la classe degli operatori per cui valga una formula di quantizzazione analoga alla (2.41), esatta nel senso sopra specificato? Sempre nel caso monodimensionale, per hamiltoniani quantistici corrispondenti ad hamiltoniane classiche del tipo $H = p^2 + V(q)$, V olomorfo in q , la formula cercata è ottenibile tramite metodi di equazioni differenziali ordinarie del tipo "WKB a tutti gli ordini". In questo caso ovviamente l'azione da quantizzare alla Bohr-Sommerfeld è quella corrispondente all'hamiltoniana H , cioè:

$$I(E) = \frac{1}{\pi} \int_{q_-(E)}^{q_+(E)} \sqrt{E - V(q)} dq. \quad (2.43)$$

dove $q_{\pm}(E)$ sono i punti di inversione dei moti classici di energia E (per semplicità supporremo che ce ne siano solo due ¹⁸), e le correzioni quantistiche, cioè i coefficienti di \hbar^j con $j \geq 1$ sono ancora esprimibili tramite quantità classiche. Non è però possibile, in generale, ottenere tramite una simile costruzione un simbolo di un operatore pseudodifferenziale semiclassico.

Per i sistemi a più gradi di libertà il problema si presenta assai più complicato già al livello della quantizzazione di Bohr-Sommerfeld medesima, prima ancora di considerare le correzioni quantistiche. Come abbiamo visto, infatti, per cominciare, la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld è definita solo per i sistemi classicamente integrabili, che, pur costituendo l'oggetto di studio principale di questo scritto, sono un caso assai particolare in più gradi di libertà. Anche in questa ipotesi estremamente restrittiva, tuttavia, la relazione fra i livelli di Bohr-Sommerfeld e quelli esatti non è del tutto chiara; è noto infatti che vicino ad ogni livello di Bohr-Sommerfeld ce ne è uno esatto, ma non si sa il viceversa.

Se si vogliono poi affrontare casi più generali, per prima cosa occorrerà considerare i sistemi quasi-integrabili (sappiamo comunque che questi costituiscono una famiglia piuttosto "interessante" di sistemi) nelle condizioni

¹⁸ Essendo il potenziale olomorfo, questa ipotesi equivale a chiedere che il moto classico non ammetta separatrici.

in cui sia applicabile la versione di Arnold della teoria KAM. Verrebbe a questo punto spontaneo pensare di quantizzare alla Bohr-Sommerfeld la hamiltoniana KAM $K^\infty(\mathbf{I})$ e di ottenere così una prima approssimazione dei livelli esatti. Un simile procedimento cozza tuttavia contro due seri ostacoli concettuali.

Il primo, come abbiamo già notato, è che il dominio di definizione dell'hamiltoniana KAM è un insieme decisamente patologico e quindi non è dato sapere se un dato valore $\mathbf{n}\hbar$ del reticolo delle azioni vi appartiene o meno e quindi questo diventa un algoritmo inutile.

Se anche il primo ostacolo fosse sormontato, i livelli che si otterrebbero approssimerebbero forse la maggior parte di quelli esatti, ma non tutti perché, come abbiamo ricordato, c'è sempre un insieme, sia pure di misura che tende a zero per ε (parametro perturbativo) che va a zero, su cui l'hamiltoniana KAM non è definita.

La rimozione del primo ostacolo sarebbe un passo preliminare per una formulazione quantistica della teoria KAM, che a tutt'oggi manca. In tal caso si potrebbe rinunciare a superare il secondo, ed accontentarsi di una formula di quantizzazione che approssimi una *consistente* parte dello spettro, se non tutto.

Comunque, allo stato attuale delle cose, queste difficoltà non sono state superate, e volendo descrivere lo spettro dei sistemi quasi-integrabili tramite una formula di quantizzazione, si deve procedere ancora come Born ed i suoi allievi, cioè quantizzare alla Bohr-Sommerfeld ogni ordine della teoria classica delle perturbazioni. ¹⁹

¹⁹ Si può andare avanti a parlare delle difficoltà e del grado di esattezza di questo procedimento, ma diverrebbe veramente troppo. Rimando al saggio di [Gr].

3. LE DEFINIZIONI DI VON NEUMANN

Il primo a occuparsi di ergodicità in un sistema quantistico fu Von Neumann [VN] che era interessato a stabilire una definizione di sistema quantistico ergodico per poi provare risultati di meccanica statistica tra cui le condizioni di validità, nella "nuova meccanica", del teorema H di Boltzmann.

Il primo problema che affrontò fu quello di definire che cosa si dovesse intendere per *varietà equienergetica*. In effetti in meccanica quantistica abbiamo sempre un numero infinito di "integrali primi del moto" e cioè i coefficienti di probabilità $|\langle \psi(t), e_n \rangle|^2$ che il sistema descritto dalla funzione d'onda $\psi(t)$ si trovi nel livello energetico definito dal numero quantico n .

Conseguentemente, per Von Neumann, dato uno stato quantistico $\psi \in \mathcal{H}$, dove \mathcal{H} è lo spazio di Hilbert che descrive l'ambiente matematico della meccanica quantistica e ψ è un vettore di norma unitaria che, sviluppato sulla base ortonormale di autovettori di H , si scrive come $\psi = \sum_n a_n e_n$, la sua varietà equienergetica è definita da tutti quegli elementi di \mathcal{H} aventi in comune con ψ i suoi integrali primi cioè gli $|a_n(t)|^2 = |a_n|^2 \quad (\forall n \in \mathbb{N})$. In formula

$$M_\psi = \left\{ \psi' = \sum_n a'_n e_n ; |a'_n|^2 = |a_n|^2 \quad \forall n \in \mathbb{N} \right\} \quad (3.1)$$

L'ergodicità va sempre riferita a questa varietà equienergetica. Ora Von Neumann dà due definizioni di ergodicità, che in meccanica classica risultano equivalenti:

1) *L'evoluzione dello stato ψ visita tutto M_ψ* . In altre parole se scrivo

$$\psi = \sum_n r_n e^{i\alpha_n} e_n \implies \psi(t) = \sum_n r_n e^{i(\alpha_n - E_n t/\hbar)} e_n \quad (3.2)$$

e prendo $\psi' \in M_\psi$, con

$$\psi' = \sum_n r_n e^{i\alpha'_n} e_n, \quad (3.3)$$

deve esistere un opportuno t tale che $\psi(t) = \psi'$, cioè

$$\alpha_n - \frac{E_n}{\hbar}t = \alpha'_n \pmod{2\pi} \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (3.4)$$

Questo, per quanto abbiamo detto nella sezione 1 sul flusso di traslazioni sul toro, accade se e solo se le frequenze sono linearmente indipendenti in \mathbb{Z} (formula (1.8)). Nel nostro caso, quindi, se k_1, \dots, k_n sono interi,

$$\sum_{i=1}^n k_i E_i = 0 \implies k_1 = \dots = k_n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}. \quad (3.5)$$

In realtà, come puntualizza lo stesso Von Neumann, non è indispensabile richiedere che $\psi(t)$ coincida esattamente con ψ' : è sufficiente che questa uguaglianza venga realizzata a meno di una fase aggiuntiva cioè $e^{i\beta(t)}\psi(t) = \psi'$. Se scegliamo come fase ininfluyente, ad esempio, $\beta(t) = \alpha_1 - \alpha'_1 - E_1 t/\hbar$ avremo che la condizione (3.4) diventa

$$\alpha_n - \alpha_1 + \alpha'_1 - \frac{E_n - E_1}{\hbar}t = \alpha'_n \pmod{2\pi} \quad \forall n \in \mathbb{N} \setminus \{1\}. \quad (3.6)$$

Il che significa che devono essere razionalmente ¹ indipendenti gli "autovalori traslati" dell'energia, cioè gli $\{E_n - E_1\}_{n \geq 2}$.

2) *Il valore di aspettazione di qualsiasi osservabile coincide se mediato su tutti i tempi o su tutto M_ψ .* Il valore di aspettazione di un qualsiasi osservabile quantistico \hat{f} si definisce, usando notazioni più moderne di quelle usate da Von Neumann, come

$$\langle \psi(t), \hat{f}\psi(t) \rangle = \sum_{n,m} \bar{a}_n(t) a_m(t) f_{nm} = \text{Tr} \left(\hat{\rho}_{\psi(t)} \hat{f} \right), \quad (3.7)$$

dove $\hat{\rho}_{\psi(t)}$ è la matrice densità i cui elementi nella base degli autostati, sono dati da $(\rho_{\psi(t)})_{mn} \equiv a_m(t) \bar{a}_n(t)$. Nella formula soprastante gli unici termini dipendenti dal tempo e dalla configurazione iniziale di $\psi \in M_\psi$ sono i

$$(\rho_{\psi(t)})_{mn} = r_n r_m e^{i[(\alpha_m - \alpha_n) - (E_m - E_n)t/\hbar]}; \quad (3.8)$$

¹ Prima si parlava di lineare indipendenza sugli interi, ma è completamente equivalente richiederla sul campo dei razionali: si tratta ovviamente di calcolarsi un minimo comun denominatore.

Mediando questi su M_ψ , cioè sulle fasi α_n, α_m , per un tempo fissato qualsiasi (per semplicità $t = 0$) si ottiene $\bar{\rho}_{mn} = r_n^2 \delta_{mn}$, dove abbiamo aggiunto la barra $\bar{}$ ed eliminato il deponente $\psi(t)$ per indicare la media sulla varietà M_ψ .

Affinché il sistema sia ergodico, dice Von Neumann, si deve ottenere lo stesso risultato mediando sui tempi ² : ma ciò accade se e solo se $E_n \neq E_m$ per $n \neq m$, cioè se lo spettro dell'energia è semplice, il che è una condizione ben più debole della precedente. Riassumendo quanto appena detto in formula, si deve avere

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \langle \psi(t), \hat{f}\psi(t) \rangle dt = \sum_n |a_n|^2 f_{nn} \quad (3.9)$$

Il nostro problema è che entrambe le definizioni di Von Neumann discordano dalla loro controparte classica, nel senso che non classificano come ergodici sistemi che classicamente lo sarebbero o viceversa. L'esempio tipico, che costituirà anche il modello sul quale si baserà la maggior parte delle nostre considerazioni, è l'oscillatore armonico.

L'oscillatore armonico monodimensionale di frequenza ω ha uno spettro, a parte costanti aggiuntive che comunque possono essere riassorbite in una ridefinizione dell'hamiltoniano, come segue:

$$E_n = n\omega\hbar. \quad (3.10)$$

È ugualmente banale scrivere lo spettro dell'oscillatore armonico bidimensionale di frequenze ω_1 e ω_2 :

$$E_{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \omega\hbar = (n_1\omega_1 + n_2\omega_2)\hbar \quad (3.11)$$

² Non stiamo qui a discutere dei problemi matematici connessi alle operazioni di media spaziale e temporale: difatti, guardando la (3.7), possiamo dire che mediare sugli elementi della matrice densità e poi fare la traccia non è equivalente in generale a fare queste due operazioni in senso inverso, a meno che la somma in (3.7) sia finita. Vedremo comunque nella prossima sezione che sotto banali condizioni su \hat{f} tale commutatività è ristabilita.

dove $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$ e $\omega = (\omega_1, \omega_2)$, dove supponiamo ω_1 e ω_2 razionalmente indipendenti: questo ci garantisce che non abbiamo degenerazione.

Ora si ha che la prima definizione di Von Neumann etichetta entrambi i sistemi come non ergodici, infatti lo spettro dell'oscillatore armonico in 1 dimensione è proporzionale all'insieme dei naturali che sono, ovviamente, fra loro razionalmente dipendenti; per quanto riguarda il caso a 2 dimensioni possiamo prendere, ad esempio, la sequenza di interi: $k_{(1,0)} = 2$; $k_{(2,0)} = -1$; $k_{\mathbf{n}} = 0$ (per tutti gli altri \mathbf{n}) e verificare che $\sum_{\mathbf{n}} k_{\mathbf{n}} E_{\mathbf{n}} = 0$.

Se adottassimo invece la seconda definizione di Von Neumann avremmo che entrambi i sistemi, avendo spettro semplice, sono ergodici.

Quello che lo studio dei sistemi dinamici classici ci insegna, invece, come si può leggere alla fine della sezione 1, è che l'oscillatore armonico monodimensionale è ergodico, mentre il bidimensionale non lo è, essendo questo sistema l'esempio più tipico di sistema integrabile. Tale asserzione, come abbiamo già ampiamente notato, vale solo se prendiamo come varietà "di lavoro" la superficie equienergetica; ma questo è proprio ciò che ci proponiamo di fare.

4. RICERCA DI UNA NUOVA DEFINIZIONE

Conviene allora, almeno per il momento, dimenticare le definizioni date da Von Neumann e provare a darne una così, di primo acchitto, avendo come punto di partenza solo la definizione 1.10 di ergodicità classica. Si può provare a trasportare questa definizione in meccanica quantistica ricordando che è usuale quantizzare le funzioni costanti con operatori multipli dell'identità e che è altrettanto lecito pensare di quantizzare l'evoluzione dell'osservabile f cioè $f \circ G^t$ con l'operatore $e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{f} e^{-i\hat{H}t/\hbar}$. Allora l'operatore media temporale di f diventa (cfr. (1.6))

$$\hat{f}^\infty \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{f} e^{-i\hat{H}t/\hbar} dt. \quad (4.2)$$

La definizione che possiamo pensare di dare per l'ergodicità quantistica è allora

$$\hat{f}^\infty|_{\mathcal{H}_E} = \bar{f}(E) \mathbb{1}|_{\mathcal{H}_E} \quad \forall E \in \sigma_d(\hat{H}) \quad (4.3)$$

(ci limitiamo allo spettro discreto perché solo gli stati legati possono essere ergodici); \mathcal{H}_E è l'autospazio relativo all'autovalore E dell'energia. Si vede quindi che questa definizione richiede che \hat{f}^∞ sia, se pensato come una matrice sulla base degli autostati di \hat{H} , diagonale ed avente i termini diagonali dipendenti solo dall'energia dello stato in questione.

Andiamo allora a calcolare questi elementi di matrice di \hat{f}^∞ :

$$\begin{aligned} f_{nm}^\infty &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sum_{k\ell} \left(e^{i\hat{H}t/\hbar} \right)_{nk} f_{k\ell} \left(e^{-i\hat{H}t/\hbar} \right)_{\ell m} dt \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sum_{k\ell} e^{iE_n t/\hbar} \delta_{nk} f_{k\ell} e^{-iE_m t/\hbar} \delta_{\ell m} dt \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} f_{nm} dt = f_{nm} \delta_{E_m, E_n}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Come si vede questa definizione si riconduce banalmente alla seconda fra quelle proposte da Von Neumann; infatti lo spettro semplice è una condizione sufficiente affinché \hat{f}^∞ sia diagonale e ogni elemento diagonale dipenda solo dall'energia (infatti in quel caso ad ogni energia E_n corrisponde un

solo $f_{nn}^\infty = f_{nn}$ e quindi non possono esistere due elementi diagonali diversi ma corrispondenti alla stessa energia). Rimane da dire che in quel caso la $\bar{f}(E)$ che appare nella definizione soprastante è proprio f_{nn} dove n è quell'unico numero quantico tale che $E_n = E$: questa è una cosa buona perché f_{nn} , che il valor medio quantistico sullo stato e_n di energia E , sembra proprio il valore più opportuno per riampiazzare la media spaziale classica su M_E .

Quello che più ci interessa in tutto questo discorso è che il calcolo (4.4) implica la relazione (3.9), che può essere scritta equivalentemente, se ci mettiamo dal punto di vista di Heisenberg (trasferire cioè la dipendenza temporale dalla funzione d'onda all'operatore), come

$$\langle \psi, \hat{f}^T \psi \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \sum_n |a_n|^2 f_{nn} \quad (4.5)$$

dove $\hat{f}^T \equiv (1/T) \int_0^T e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{f} e^{-i\hat{H}t/\hbar} dt$, in accordo con la definizione (4.2). La dimostrazione di questo, se imponiamo qualche ipotesi semplificativa peraltro irrilevante da un punto di vista fisico, è ovvia ma verrà ugualmente delineata perché ci riferiremo ad essa in seguito. Per prima cosa definiamo, per $x > 0$,

$$F(x) \equiv \frac{e^{ix} - 1}{ix} ; \quad G(x) \equiv \sup_{y>x} |F(y)|. \quad (4.6)$$

Procediamo notando che la formula (4.5) è equivalente alla

$$\sum_{m<n} \bar{a}_n a_m f_{nm}^T = \sum_{m<n} \bar{a}_n a_m f_{nm} F\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} T\right) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0, \quad (4.7)$$

perché $f_{nn}^T = f_{nn}$; inoltre i termini nella sommatoria per cui $m > n$ sono i complessi coniugati dei rispettivi termini con gli indici scambiati (si ricordi che \hat{f} è simmetrico).

L'ipotesi che facciamo è che valga $\sum_{n,m} |f_{nm}|^2 < \infty$ ¹: questo implica che converge la serie doppia

$$C \equiv \sum_{n,m} |a_n| |a_m| |f_{nm}| \leq \left(\sum_{n,m} |f_{nm}|^2 \right)^{1/2} < \infty, \quad (4.8)$$

¹ Cioè l'operatore \hat{f} deve essere normalizzato nella topologia di Hilbert-Schmidt.

dove abbiamo usato la disuguaglianza di Cauchy-Schwartz ed il fatto che $\sum_{n,m} |a_n|^2 |a_m|^2 = 1$. Ora, dato $\varepsilon > 0$, $\exists R = R(\varepsilon)$ tale che

$$\left| \sum_{\substack{m < n \\ |m,n| > R}} \bar{a}_n a_m f_{nm} F\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} T\right) \right| \leq \sum_{\substack{m < n \\ |m,n| > R}} |a_n| |a_m| |f_{nm}| \leq \frac{\varepsilon}{2}. \quad (4.9)$$

Quindi chiamiamo $\alpha = \alpha(R) = \min_{m < n, |m,n| \leq R} (E_n - E_m)/\hbar$. Abbiamo che

$$\left| \sum_{\substack{m < n \\ |m,n| \leq R}} \bar{a}_n a_m f_{nm} F\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} T\right) \right| \leq \frac{C}{2} G(\alpha T) \leq \frac{\varepsilon}{2}. \quad (4.10)$$

$\forall T \geq \bar{T} = \bar{T}(\varepsilon, \alpha)$ scelto opportunamente; abbiamo maggiorato la funzione $|F|$ con la G perché quest'ultima è decrescente e quindi il suo massimo è raggiunto quando il suo argomento raggiunge il minimo.

Incidentalmente, abbiamo anche dimostrato che il limite della (4.7) è uniforme rispetto allo stato ψ scelto; C , infatti, non dipende dagli $\{a_n\}$: questo implica che nemmeno R e \bar{T} ne dipendono.

Siamo ora in grado di notare, meglio di prima, che la seconda definizione di Von Neumann, che d'ora in poi chiameremo semplicemente **la** definizione di Von Neumann, è realmente una buona definizione, anche se ha il non trascurabile difetto di non concordare con la sua equivalente classica, poiché traduce bene il concetto classico di moto ergodico come il moto di quel punto che raggiunge, nello spazio delle fasi, tutti gli stati aventi energia uguale alla sua energia iniziale: ora, se abbiamo uno spettro semplice per \hat{H} avremo che gli stati ad una data energia $E_n \in \sigma_d(\hat{H})$ sono tutti e soli gli stati del tipo $e^{i\alpha} e_n$ dove e_n è l'autostato ad energia E_n : ognuno di questi stati, evolvendo come $e^{i(\alpha - E_n t/\hbar)} e_n$, raggiunge tutti gli altri. ²

² Si potrebbe obiettare che se $E_n = 0$ lo stato iniziale non incrementa la sua fase nel tempo, quindi non raggiunge tutti gli stati normalizzati del suo autospazio, ma in effetti, come si diceva in precedenza, non è necessario chiedere questo. Di fatto, due stati che differiscono per una fase sono lo stesso stato fisico.

Comunque, per buona che sia, questa definizione "non risponde bene", per cui sarà bene farci venire qualche buona idea per migliorarla o addirittura sostituirla. Ritorniamo, come ci eravamo proposti di fare, al caso più semplice che conosciamo: quello dell'oscillatore armonico. Cos'è che differenzia il caso monodimensionale dal bidimensionale? La risposta, dopo un po' di tempo che si studiano queste cose, diventa decisamente evidente: *la distribuzione dello spettro energetico*. Cos'era infatti che discriminava i sistemi ergodici dai non-ergodici, secondo Von Neumann? Era la degenerazione dei livelli. Ora nel oscillatore armonico monodimensionale i livelli non solo sono non-degeneri, ma hanno anche una struttura di scala rigida, con una spaziatura (spacing) costante, e comunque inferiormente limitata; invece passando a due dimensioni troviamo che

Teorema 4.1. *Se le frequenze $\omega_1, \dots, \omega_n$ sono razionalmente indipendenti, allora per ogni $\varepsilon > 0$ esiste una sequenza di interi k_1, \dots, k_n , non tutti nulli, tale che*

$$0 < |k_1\omega_1 + \dots + k_n\omega_n| \leq \varepsilon.$$

Limitiamoci al caso $n = 2$, per cui si ha $\alpha \equiv \omega_2/\omega_1 \notin \mathbb{Q}$. Ci si può comunque ricondurre a questo caso perché nella sequenza delle frequenze ci deve essere almeno una coppia di frequenze ω_i e ω_j il cui rapporto sia irrazionale; si può porre $k_m = 0$ per $m \neq i, j$ e trovare k_i e k_j come nel procedimento a seguire.

Si consideri il sistema dinamico classico (\mathbb{T}, G, λ) dove $G(x) \equiv x + \alpha$ e λ è l'ordinaria misura di Lebesgue: per il teorema di Poincaré la traiettoria partita dall'origine dovrà tornarvi vicino a piacere ad una certa iterazione dell'automorfismo G , cioè deve esistere un $m \in \mathbb{N}$ tale che

$$|m\alpha - [m\alpha]| = |m\alpha \pmod{1}| \equiv |G^m(0) - 0| \leq \frac{\varepsilon}{|\omega_1|}, \quad (4.11)$$

dove $[x]$ è la parte intera di x . Poniamo ora $k_2 \equiv m$ e $k_1 \equiv -[m\alpha]$; moltiplichiamo tutto per $|\omega_1|$ e otterremo

$$|k_1\omega_1 + k_2\omega_2| \leq \varepsilon, \quad (4.12)$$

che è la dimostrazione del teorema nel caso particolare e in quello generale.

Vediamo quindi che i livelli si accumulano, man mano che si aumenta numero quantico, e che quindi si trovano distanze sempre più piccole fra alcune coppie di livelli energetici. Non abbiamo degenerazione, ma ci andiamo vicino: siamo in un caso di *quasi-degenerazione*.

D'altronde che lo spacing costituisca un dato fondamentale per la caratterizzazione della caoticità in campo quantistico è largamente creduto dalla comunità dei fisici e matematici che si occupano di questi argomenti (si veda [G], che rappresenta una sorta di libro mastro per i cultori del caos quantistico, e poi i lavori di [BV], [BGS], [CMG], [P]; infine costituisce un lavoro fondamentale in questo settore quello di [BT]).

Un'altra buona ragione per pensare che la distanza fra i vari livelli giochi un ruolo di primo piano nella definizione di ergodicità quantistica la si può trovare in quanto abbiamo scritto pocanzi per dimostrare in maniera rigorosa la proposizione (4.5). Tutto si basava sulla possibilità di scegliere un limite inferiore $\alpha > 0$ per lo spacing dei "livelli riscaldati" E_n/\hbar . Finché siamo in ambito strettamente quantistico, con $\hbar > 0$ fissato, ciò è possibile. Non ci rimane altro, allora, che andare al limite classico e vedere quello che succede.

5. IL LIMITE CLASSICO "SUL TORO"

Siccome, nel nostro procedere verso una sempre più profonda comprensione della formula (4.5), siamo stati costretti ad incappare nel limite classico, non è inutile ricordare e puntualizzare il comportamento semiclassico degli elementi di matrice di un osservabile quantistico, visto che in quella formula e nella sua "parente" (4.7) essi giocano il ruolo principale. In questa sezione terremo sott'occhio quanto si trova scritto in [LL] cap.VII, §48.

Per cominciare definiamo che tipo di limite intenderemo, d'ora in avanti, per *limite classico* in sistemi integrabili n -dimensionali. Tutta la discussione fatta nella sezione 2 ci ha convinto ad usare i livelli energetici di Bohr-Sommerfeld, senza indici di Maslov (vedremo proprio in questa sezione che essi non influiscono al limite):

$$E_{\mathbf{n}} = H(\mathbf{n}\hbar), \quad (5.1)$$

dove abbiamo usato la solita convenzione non rigorosa di indicare sempre con $H(\mathbf{I})$ l'hamiltoniana nello spazio delle azioni. Ricordiamo anche che tali livelli sono una conseguenza del principio di quantizzazione delle azioni che fissa il vettore delle azioni ad essere un multiplo intero di \hbar , per cui $\mathbf{I}_{\mathbf{n}} = \mathbf{n}\hbar$.

Si ha degenerazione quando, nello spazio delle azioni, due o più punti del reticolo $(\mathbb{N}\hbar)^n$ giacciono sulla stessa $\mathcal{M}_E \equiv \{\mathbf{I} \in (\mathbb{R}^+)^n; H(\mathbf{I}) = E\}$ (vedi fig.6).

Il nostro tipo di limite classico sarà scelto in modo che le quantità fisiche rilevanti (che sono le azioni) non cambino mentre \hbar diventa sempre più piccolo. Vorremmo cioè definire il nostro limite come il limite $|\mathbf{n}| \rightarrow \infty$, $\hbar \rightarrow 0$ con $\mathbf{n}\hbar = \mathbf{I} = \text{costante}$. Di fatto, però, così facendo saremmo costretti a fare il limite solo su vettori di azione che siano multipli di un vettore di interi. Si ovvia facilmente a questo inconveniente prendendo il limite: $|\mathbf{n}| \rightarrow \infty$, $\hbar \rightarrow 0$ con $\mathbf{n}\hbar \equiv \mathbf{I}_{\mathbf{n}} \rightarrow \mathbf{I}$.

Vogliamo dimostrare che per i sistemi integrabili vale la formula

$$\lim_{\substack{|\mathbf{n}| \rightarrow \infty \\ \mathbf{n}\hbar \rightarrow \mathbf{I}}} f_{\mathbf{n}+\mathbf{s},\mathbf{n}}(\hbar) = \tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I}), \quad (5.2)$$

dove gli elementi di matrice vengono calcolati su una *certa* base di auto-stati dell'hamiltoniano e $\tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I})$ è la componente di Fourier di ordine s della f (simbolo principale dell'operatore \hat{f} ¹) riscritta in *opportune* variabili azione-angolo:

$$f(\mathbf{I}, \varphi) = \sum_{\mathbf{s}} \tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I}) e^{i\mathbf{s} \cdot \varphi}. \quad (5.3)$$

Queste ultime due formule, e il commento che le unisce, richiedono una spiegazione: che valore può avere una formula che vale per *certi* elementi di matrice e per *opportune* variabili azione-angolo? Effettivamente ci si deve rendere conto di due cose:

Primo. Ci sono un'infinità di basi composte da autovettori di \hat{H} , per cui, se la (5.2) vale per una, non è detto valga per un'altra. Facciamo un esempio: poniamo che \mathcal{H} ammetta come base ortonormale la famiglia di autovettori $\{e_n\}$ ² e che su questa base si abbia, al limite classico, $\langle e_{n+s}, \hat{f}e_n \rangle \rightarrow a \neq 0$. Ora anche i $v_n \equiv e^{in\alpha}e_n$ costituiscono una base ortonormale che diagonalizza \hat{H} , ma il limite diventerà $\langle v_{n+s}, \hat{f}v_n \rangle \rightarrow e^{-is\alpha}a$, e questo, come diremo più avanti, non costituirebbe un problema. Se però considerassimo la base $w_n \equiv e^{in^2\alpha}e_n$ la successione diverrebbe $\langle w_{n+s}, \hat{f}w_n \rangle = e^{-i\alpha(2ns+s^2)}\langle e_{n+s}, \hat{f}e_n \rangle$ che non ha limite. Ecco quindi che la scelta di una certa base di autovettori è fondamentale per il risultato (5.2); si noti poi che nei nostri esempi non abbiamo mai scelto una base che cambiasse l'ordine, generalmente crescente, degli autovalori, altrimenti le cose sarebbero diventate ancor più intricate.

Il secondo punto da discutere è quello riguardante la $\tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I})$: si nota infatti che non è affatto unico il modo di riscrivere un osservabile classico in variabili

¹ Rimando a quanto già detto nella sezione 2 per quanto riguarda la teoria semiclassica degli operatori pseudodifferenziali, che useremo anche più avanti.

² Qui e di seguito abbiamo soppresso per semplicità l'indicazione della dipendenza di $e_n(\hbar)$ da \hbar , che è comunque essenziale nel limite (5.2).

azione-angolo, ma ve ne sono una famiglia: per esempio si scelga una differente origine degli angoli su toro. In altre parole, se è canonica la trasformazione $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \mapsto (\mathbf{I}, \varphi)$, lo è parimenti la trasformazione ottenuta da essa per traslazione, che scriviamo come $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \mapsto (\mathbf{I}, \varphi + \alpha)$. Allora la f scritta in questi due set di coordinate di toro, cioè $f(\mathbf{I}, \varphi)$ e $f'(\mathbf{I}, \varphi) \equiv f(\mathbf{I}, \varphi + \alpha)$, avrà coefficienti di Fourier che differiscono per una fase secondo la formula

$$\tilde{f}'_{\mathbf{s}}(\mathbf{I}) = e^{i\mathbf{s}\cdot\alpha} \tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I}). \quad (5.4)$$

Di fatto, quindi, il limite della (5.2) può essere conosciuto solo a meno di una fase, ma questo non influisce nel nostro discorso, poiché vedremo, quando useremo tale limite per ottenere l'evoluzione classica della f a partire da quella quantistica di $\langle \psi(t), \hat{f}\psi(t) \rangle$, che la scelta di quella fase corrisponde alla scelta di una determinata condizione iniziale sul toro, che è irrilevante per tempi lunghi.

Rimane da concludere che la (5.2) non poteva essere commentata *a priori* in un altro modo e che per sapere su quale base di autostati dell'operatore hamiltoniano si devono calcolare i termini a sinistra e quali variabili angolari vanno usate a destra, non c'è altro da fare che il conto esplicito, come faremo adesso nel caso particolare dell'oscillatore armonico e in un caso più generale.

Prima di affrontare le dimostrazioni, spieghiamo la notazione che verrà usata. Innanzitutto, per mere questioni di semplicità ci metteremo nella rappresentazione di Bargmann, che, lo ricordiamo, consiste nell'usare le variabili ³

$$\begin{cases} z_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_i + ip_i), \\ \bar{z}_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_i - ip_i). \end{cases} \quad (5.5)$$

I corrispondenti operatori sono i ben noti $\hat{a}_i = (\hat{q}_i + i\hat{p}_i)/\sqrt{2}$ e $\hat{a}_i^+ = (\hat{q}_i - i\hat{p}_i)/\sqrt{2}$, le cui proprietà sugli autostati dell'oscillatore armonico verranno sfruttate in seguito.

³ Per semplicità porremo d'ora in poi $\omega=1$ e quindi anche l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico sarà $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_i (p_i^2 + q_i^2)/2$.

Inoltre dato un operatore psuedodifferenziale di tipo semiclassico \hat{f} , indicheremo con $f \equiv f_0$ il suo simbolo principale e con $\hbar f_c$ le correzioni quantistiche; non introdurremo un particolare segno per indicare il simbolo completo che sarà semplicemente scritto come $f_0 + \hbar f_c$. L'operatore ottenuto dalla quantizzazione del simbolo principale sarà denotato con \hat{f}_0 e quello che quantizza le correzioni quantistiche con $\hbar \hat{f}_c$. Questo sistema di notazione ha lo svantaggio di generare confusione all'interno delle dimostrazioni perchè mentre $\hat{f} \neq \hat{f}_0$, vale sempre, per definizione $f \equiv f_0$; in altre parole \hat{f} non è il quantizzato di f . Ha però il grosso vantaggio di rendere immediatamente visibile la stretta relazione che c'è fra un operatore ed il suo simbolo principale, soprattutto al limite classico. Inoltre tale notazione è più vicina a quelle usate normalmente in fisica teorica (vedi ad esempio [LL]).

Teorema 5.1. *Nel caso dell'oscillatore armonico la formula (5.2) vale per ogni osservabile quantistico \hat{f} avente simbolo principale $f \equiv f_0$ olomorfo nelle variabili canoniche. Gli elementi di matrice vengono calcolati sulla consueta base delle funzioni di Hermite ⁴ e le variabili d'angolo sono scelte in maniera "trigonometrica" ⁵.*

Semplifichiamo la dimostrazione mettendoci in un solo grado di libertà: siccome il problema è separabile "a vista" la generalizzazione a più gradi di libertà è banale.

Scriviamo allora il simbolo completo di \hat{f} nella forma

$$f_0(z, \bar{z}) + \hbar f_c(z, \bar{z}) = \sum_{j,k \geq 0} c_{jk} z^j \bar{z}^k + \hbar f_c(z, \bar{z}), \quad (5.6)$$

dove $f_0(z, \bar{z})$ è appunto analitico in (z, \bar{z}) , con tutte le proprietà che ne derivano per i coefficienti c_{jk} della serie scritta sopra. Questo simbolo dà

⁴ Cioè quella base per cui $u_n(\hbar) = \frac{1}{\sqrt{n\hbar}} u_{n-1}(\hbar)$; in realtà anche qui si tratta di una famiglia di basi a seconda della scelta di una fase arbitraria in u_0 , ma questa si cancella nell'elemento di matrice lasciando le cose esattamente immutate.

⁵ Si sceglie cioè che il punto $(I_1, \dots, I_n, \varphi_1=0, \dots, \varphi_n=0)$ corrisponda, in coordinate rettangolari, al punto $(q_1, \dots, q_n, p_1=0, \dots, p_n=0)$ con $q_i > 0$ e, in coordinate di Bargmann, al punto $(z_1, \dots, z_n, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n)$ tale che $\Re z_i > 0, \Im z_i = 0$.

luogo ad un operatore che è scrivibile nella forma

$$\begin{aligned}
\hat{f} &= \hat{f}_0 + \hbar \hat{f}_c = \sum_{j,k \geq 0} c_{jk} \Pi_s((\hat{a})^j (\hat{a}^+)^k) + \hbar \hat{f}_c = \\
&= \sum_{j,k \geq 0} c_{jk} (\hat{a})^j (\hat{a}^+)^k + \hbar \hat{g},
\end{aligned} \tag{5.7}$$

dove, in virtù della regola di commutazione $[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hbar$, abbiamo posto gli operatori "crociati" a destra e gli altri a sinistra: i resti di questa operazione di commutazione (tutti come minimo dell'ordine \hbar) sono confluiti in \hat{f}_c che è quindi diventato \hat{g} . Ultimo commento da fare sulla (5.7) è che la somma infinita di monomi di operatori, non ben definita nella teoria della quantizzazione canonica, ha senso nella teoria degli operatori pseudodifferenziali. Sempre tale teoria poi ci dice che al limite classico il termine \hat{g} ha elementi di matrice limitati, per cui

$$\begin{aligned}
&\lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ n\hbar \rightarrow I}} \left(\langle u_{n+s}(\hbar), \hat{f}_0 u_n(\hbar) \rangle + \hbar \langle u_{n+s}(\hbar), \hat{g} u_n(\hbar) \rangle \right) = \\
&= \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ n\hbar \rightarrow I}} \langle u_{n+s}(\hbar), \hat{f}_0 u_n(\hbar) \rangle.
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Facciamo allora questo conto, supponendo per semplicità $s > 0$ e ricordandoci le peculiari e ben note proprietà della base u_n rispetto agli operatori \hat{a} e \hat{a}^+ (vedi una delle ultime note).

$$\begin{aligned}
&\langle u_{n+s}(\hbar), \hat{f}_0 u_n(\hbar) \rangle = \\
&= \sum_{j,k \geq 0} c_{jk} \langle (\hat{a}^+)^j u_{n+s}(\hbar), (\hat{a}^+)^k u_n(\hbar) \rangle = \\
&= \sum_{j,k \geq 0} c_{jk} \delta_{j+s,k} [\hbar(n+s+1) \cdots \hbar(n+s+j) \hbar(n+1) \cdots \hbar(n+k)]^{1/2} \\
&= \sum_{j \geq 0} c_{j,j+s} [\hbar(n+1) \cdots \hbar(n+s)]^{1/2} \hbar(n+s+1) \cdots \hbar(n+s+j) \\
&\xrightarrow[\substack{n \rightarrow \infty \\ n\hbar \rightarrow I}]{} \sum_{j \geq 0} c_{j,j+s} I^{j+s/2}
\end{aligned} \tag{5.9}$$

D'altra parte, sul fronte classico, ricordiamo che l'azione di un punto (q, p) nello spazio delle fasi è l'area sottesa dalla traiettoria di quel punto, divisa per 2π : nel nostro caso le traiettorie sono esattamente delle circonferenze percorse in senso orario, per cui $I(q, p) = (q^2 + p^2)/2$, che nelle variabili di Bargmann, si legge $I(z, \bar{z}) = z\bar{z} = |z|^2$. Scegliamo, come abbiamo precisato nell'enunciato, la variabile angolare a partire dal semiasse positivo delle q . La trasformazione canonica $(I, \varphi) \mapsto (z, \bar{z})$ sarà data da $z = \sqrt{I}e^{-i\varphi}$, $\bar{z} = \sqrt{I}e^{i\varphi}$, da cui

$$\begin{aligned}
f(I, \varphi) &= \sum_{j, k \geq 0} c_{jk} (\sqrt{I}e^{-i\varphi})^j (\sqrt{I}e^{i\varphi})^k = \sum_{j, k \geq 0} c_{jk} I^{(j+k)/2} e^{i(k-j)\varphi} \\
&= \sum_{j \geq 0} \sum_{s \geq -j} c_{j, j+s} I^{(2j+s)/2} e^{is\varphi} \\
&= \left(\sum_{s < 0} \sum_{j \geq -s} + \sum_{s \geq 0} \sum_{j \geq 0} \right) c_{j, j+s} I^{j+s/2} e^{is\varphi},
\end{aligned} \tag{5.10}$$

avendo chiamato $s = k - j \geq -j$, e quindi $k = s + j$. Da qui si vede se $s > 0$ la componente di ordine s dello sviluppo di Fourier della (5.10) è $\sum_{j \geq 0} c_{j, j+s} I^{j+s/2}$ che è quanto sta scritto nell'ultima riga della (5.9). Abbiamo così dimostrato la (5.2) nel caso dell'oscillatore armonico.

Teorema 5.2. *Sia dato l'operatore pseudodifferenziale di tipo semiclassico \hat{f} , con simbolo principale $f \equiv f_0$ olomorfo nelle variabili canoniche; sia dato inoltre un sistema olomorficamente integrabile, tale cioè che l'operatore di Schrödinger \hat{H} abbia simbolo H ⁶ esprimibile, tramite una trasformazione canonica olomorfa, come funzione delle sole azioni. Allora esiste una base $\{e_{\mathbf{n}}(\hbar)\}$ di autostati di \hat{H} per cui vale la (5.2).*

Torniamo, per dimostrare questo teorema, ad usare notazioni n -dimensionali continuando ad adottare variabili canoniche $(\mathbf{w}, \bar{\mathbf{w}})$ di tipo Bargmann. Sia $\mathcal{C} : (\mathbf{z}, \bar{\mathbf{z}}) \mapsto (\mathbf{w}, \bar{\mathbf{w}})$ la trasformazione canonica olomorfa tale

⁶ Se si suppone, come accade sempre, che il simbolo di \hat{H} sia un polinomio nelle variabili canoniche classiche, allora non si avranno correzioni quantistiche ed esso coinciderà col simbolo principale.

che

$$\begin{aligned} K(z_1, \dots, z_n, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n) &\equiv (H \circ \mathcal{C})(z_1, \dots, z_n, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n) = \\ &= \gamma(z_1 \bar{z}_1, \dots, z_n \bar{z}_n), \end{aligned} \quad (5.11)$$

che è, per ipotesi, solo funzione delle azioni $z_i \bar{z}_i$. Ora il teorema di Egorov ci dice che alla trasformazione \mathcal{C} è associato un operatore unitario U tale che il simbolo principale g_0 di ogni operatore $\hat{g} \equiv U^{-1} \hat{f} U$ si ottiene coniugando il simbolo principale di \hat{f} con la trasformazione \mathcal{C} . In formula:

$$g_0(z_1, \dots, z_n, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n) = (f_0 \circ \mathcal{C})(z_1, \dots, z_n, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n). \quad (5.12)$$

Applicando questa formula all'hamiltoniana, cioè confrontando (5.11) con (5.12), si ha che l'osservabile classica $K \equiv K_0$ che compare in (5.11) è il simbolo principale di $\hat{K} \equiv U^{-1} \hat{H} U$. Vista la forma di $K_0(z_1, \dots, z_n, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n)$, che è funzione delle sole azioni, se chiamiamo $u_{\mathbf{n}}(\hbar)$ il prodotto tensoriale di n basi di autostati dell'oscillatore armonico monodimensionale, tutte identiche e del tipo di quella che compare nel teorema 5.1, si vede che

$$\begin{aligned} \langle u_{\mathbf{n}+\mathbf{s}}(\hbar), \hat{K} u_{\mathbf{n}}(\hbar) \rangle &= \langle u_{\mathbf{n}+\mathbf{s}}(\hbar), \hat{K}_0 u_{\mathbf{n}}(\hbar) \rangle + \hbar \langle u_{\mathbf{n}+\mathbf{s}}(\hbar), \hat{K}_c u_{\mathbf{n}}(\hbar) \rangle = \\ &= \delta_{0\mathbf{s}} \gamma(\mathbf{n}\hbar) + \hbar (K_c)_{\mathbf{n}+\mathbf{s}, \mathbf{n}} = \delta_{0\mathbf{s}} \gamma(\mathbf{I}_{\mathbf{n}}) + O(\hbar). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Cioè, se definiamo $v_{\mathbf{n}}(\hbar) \equiv U u_{\mathbf{n}}(\hbar)$, la (5.13) dice che la base $\{v_{\mathbf{n}}(\hbar)\}$ diagonalizza \hat{H} all'ordine zero in \hbar , cioè $\langle v_{\mathbf{n}+\mathbf{s}}(\hbar), \hat{H} v_{\mathbf{n}}(\hbar) \rangle$ è diagonale a meno di termini in \hbar . Si può vedere, allora, che esiste ⁷ un altro operatore unitario $V = U + O(\hbar)$ tale che, definendo $e_{\mathbf{n}}(\hbar) \equiv V u_{\mathbf{n}}(\hbar)$, la matrice $\langle e_{\mathbf{n}+\mathbf{s}}(\hbar), \hat{H} e_{\mathbf{n}}(\hbar) \rangle$ sia *esattamente* diagonale, e quindi soddisfa le richieste dell'enunciato del teorema.

Consideriamo ora l'operatore \hat{f} e facciamone gli elementi di matrice su questa nuova base, ricordando la definizione di \hat{g} scritta prima della formula (5.12):

$$\begin{aligned} \langle e_{\mathbf{n}+\mathbf{s}}(\hbar), \hat{f} e_{\mathbf{n}}(\hbar) \rangle &= \langle u_{\mathbf{n}+\mathbf{s}}(\hbar), V^{-1} \hat{f} V u_{\mathbf{n}}(\hbar) \rangle = \\ &= \langle u_{\mathbf{n}+\mathbf{s}}(\hbar), \hat{g} u_{\mathbf{n}}(\hbar) \rangle + O(\hbar) = \end{aligned} \quad (5.14)$$

$$\xrightarrow[\mathbf{n}\hbar \rightarrow I]{|\mathbf{n}| \rightarrow \infty} \tilde{g}_{\mathbf{s}}(I) = (f \circ \mathcal{C})_{\mathbf{s}}(I) \equiv \tilde{f}_{\mathbf{s}}(I).$$

⁷ Questo se si suppone, come facciamo sempre, che \hat{H} sia diagonalizzabile.

Questa formula vale poiché abbiamo applicato ad \hat{g} il teorema precedente; difatti, per ipotesi, guardando la (5.12), g_0 è olomorfo in $(\mathbf{z}, \bar{\mathbf{z}})$. L'ultima equivalenza, dopo il segno di limite, è giustificata dal fatto che f e g sono la stessa variabile dinamica parametrizzata da due diversi set di variabili canoniche: è ovvio che, coniugate con due diverse trasformazioni che la rendono dipendente dalle stesse variabili azione-angolo, entrambe assumeranno la forma (5.3) e quindi avranno s -esima componente di Fourier uguale. Si chiude così la dimostrazione del teorema 5.2.

Siamo ora in grado di sfruttare i calcoli citati all'inizio della sezione in [LL] per analizzare il limite "sul toro" appena definito. Non sarà inutile chiarire che tipo di ragionamento andremo a fare.

Avendo dimostrato in maniera esatta, almeno per un consistente numero di sistemi, la (5.2), che è quello che Landau e Lifšits ottengono come risultato dopo una serie di ipotesi non troppo chiare, usiamo il loro stesso conto per tornare indietro a puntualizzare il significato delle loro ipotesi e definire formalmente che tipo di limite classico essi abbiano effettivamente invocato. La proprietà fondamentale di questo tipo di limite è proprio quella che serve a noi per trattare la fondamentale formula di Von Neumann (4.5).

Dunque, iniziamo a definire gli oggetti con i quali lavoriamo: prendiamo una famiglia di funzioni d'onda $\psi(\hbar)$ molto localizzate nello spazio delle azioni. Perché questo succeda ciascuna $\psi(\hbar) = \sum_n a_n(\hbar)e_n(\hbar)$ (usiamo notazioni monodimensionali, ma questi discorsi si applicano comunque in più dimensioni) sarà scelta in modo che abbia i coefficienti $a_n(\hbar)$ diversi da zero solo in un intervallo $[\bar{n} - \Delta n, \bar{n} + \Delta n]$ con \hbar scelto in maniera che $\bar{n}\hbar = I$ e con $1 \ll \Delta n \ll \bar{n}$.⁸ Inoltre facciamo l'ipotesi ulteriore che gli $a_n(\hbar)$ varino molto lentamente con n : più tale variazione sarà lenta più saranno rigorosi i seguenti calcoli.

Definizione 5.3 (LIMITE CLASSICO SUL TORO). *Viene detto limite classico sul toro di azione I il seguente limite*

$$\text{cl-lim}_I \equiv \lim_{\substack{\bar{n} \rightarrow \infty \\ \bar{n}\hbar \rightarrow I}},$$

⁸ In un sistema n -dimensionale i coefficienti saranno scelti nulli al di fuori della boccia $B(\bar{\mathbf{n}}, \Delta n)$ di centro $\bar{\mathbf{n}}$ e raggio Δn .

agente su stati del tipo $\psi(\hbar)$ definiti come sopra.

Possiamo a questo punto scrivere che

$$\begin{aligned} \langle \psi(\hbar), \hat{f}(t) \psi(\hbar) \rangle &= \sum_{m,n=0}^{\infty} \bar{a}_m(\hbar) a_n(\hbar) e^{-i[E_n(\hbar)-E_m(\hbar)]t/\hbar} f_{mn}(\hbar) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=-n}^{\infty} \bar{a}_{n+s}(\hbar) a_n(\hbar) e^{i[E_{n+s}(\hbar)-E_n(\hbar)]t/\hbar} f_{n+s,n}(\hbar). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Ora, in base alla regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld, per s finito, se n ed \hbar vanno come nel limite definito sopra, accade che $(E_{n+s} - E_n)/\hbar \rightarrow s\omega$ dove $\omega(I)$ è la frequenza del moto classico sul toro su cui si fa il limite, contrassegnato dalla sua azione I . Se adesso ricordiamo la (5.2) e l'ipotesi sulla variazione lenta degli a_n , vediamo che

$$\begin{aligned} \text{cl-lim}_I \langle \psi(\hbar), \hat{f}(t) \psi(\hbar) \rangle &\simeq \text{cl-lim}_I \sum_{n=0}^{\infty} |a_n(\hbar)|^2 \sum_{s=-n}^{\infty} e^{is\omega t} f_{n+s,n}(\hbar) = \\ &= \sum_{s=-\infty}^{\infty} \tilde{f}_s(I) e^{is\omega t}, \end{aligned} \quad (5.16)$$

in quanto \bar{a}_{n+s} diventa, per s non troppo grandi, circa uguale a \bar{a}_n ; per s grandi ci penserà il termine $\tilde{f}_s(I) \simeq 0$ a rendere trascurabile l'intero addendo.

Se, invece, avessimo scelto coefficienti circa costanti ma a meno di una fase, cioè del tipo $a_{n+s} \simeq e^{i\alpha s} a_n$, avremmo avuto $\sum_n \bar{a}_{n+s} a_n \simeq e^{i\alpha s}$ e quindi

$$\text{cl-lim}_I \langle \psi(\hbar), \hat{f}(t) \psi(\hbar) \rangle = \sum_s \tilde{f}_s(I) e^{is(\alpha + \omega t)}, \quad (5.17)$$

che è la stessa evoluzione di prima, ma avente angolo iniziale diverso.

È proprio nelle due formule precedenti che è contenuto il valore di questo procedimento di limite: prendendo stati quali quelli precedentemente scelti, il valor medio quantistico dell'operatore $\hat{f}(t)$ si riconduce all'evoluzione classica sul toro della $f(I, \varphi^t)$ e ciò per ogni t . Questo non è

affatto un risultato banale: se avessimo scelto degli stati $\psi(\hbar)$ molto piccati su un punto dello spazio di fase, per esempio degli stati coerenti, avremmo avuto

$$\langle \psi(\hbar), \hat{f}(t) \psi(\hbar) \rangle \simeq f(q^t, p^t) \quad (5.18)$$

dove (q, p) è il punto sul quale è localizzato lo stato (più \hbar è vicino a zero più tale localizzazione è precisa) però come è ben noto dallo studio della meccanica quantistica, tali pacchetti d'onda tendono a delocalizzarsi per cui la (5.16) avrebbe avuto validità limitata nel tempo. Ciò che a noi invece serve, guardando la nostra formula notevole (4.5), è trovare un limite classico che faccia tendere quel membro sinistro alla giusta quantità classica per tempi illimitati, visto che di esso se ne fa il limite $T \rightarrow \infty$. È ora giunto il momento di farlo.

6. LIMITE CLASSICO DELLA FORMULA DI VON NEUMANN

In questa sezione tratteremo il "clou" dell'intero discorso sulla formula (4.5) di Von Neumann, perchè porteremo essa, e la sua analoga (6.1) per spettri non semplici, al limite classico come definito in precedenza. Innanzitutto ricordiamo che per ogni sistema hamiltoniano quantistico a spettro discreto vale la formula

$$\langle \psi, \hat{f}^T \psi \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \sum_n |a_n|^2 f_{nn} + \sum_{\substack{n \neq m \\ E_n = E_m}} \bar{a}_m a_n f_{mn}. \quad (6.1)$$

Tutti i termini di questa formula verranno portati al limite classico, per cui sarà possibile analizzare quando tale limite commuta con il limite $T \rightarrow \infty$ della convergenza temporale necessaria nella definizione di ergodicità.

Tale proprietà di commutazione, oltre a rivestire un interesse teorico per la conoscenza delle caratteristiche semiclassiche della definizione di Von Neumann che, lo ribadiamo, sembra essere quanto di meglio offre lo studio dell'ergodicità in meccanica quantistica, è importante da un punto di vista applicativo. Infatti fare il limite classico del membro destro della (4.5), che, per un sistema ergodico secondo Von Neumann, è semplicemente la media decoerente di un dato operatore ¹, è sicuramente più conveniente che svolgere il limite classico del termine a sinistra, che dovrebbe dare l'evoluzione classica per tutti i tempi (vedi parte finale della sezione precedente) del simbolo principale di quell'operatore. Questa evoluzione, nel caso generale di sistemi non integrabili o addirittura fortemente caotici, è sicuramente dura da trattare e preferiremmo evitarla il più possibile.

Per prima cosa trattiamo, usando i risultati della sezione precedente, il membro sinistro della (6.1):

¹ È interessante notare, riprendendo le fila del discorso che avevamo toccato nell'introduzione a questa tesi, che tale proprietà di decoerenza della media di un operatore è proprio quella che viene postulata in meccanica statistica quantistica al momento di definire l'ensemble microcanonico. Questo rafforza i punti di contatto, anche quantistici, fra la teoria del caos e la meccanica statistica.

Proposizione 6.1. *Al limite classico sul toro di azione \mathbf{I} , la media al tempo T del valor medio quantistico dell'osservabile \hat{f} tende alla corrispondente media dell'evoluzione classica della f su quel toro. In formula:*

$$\begin{aligned} \text{cl-lim}_{\mathbf{I}} \langle \psi(\hbar), \hat{f}^T \psi(\hbar) \rangle &\equiv \text{cl-lim}_{\mathbf{I}} \frac{1}{T} \int_0^T \langle \psi(\hbar), \hat{f}(t) \psi(\hbar) \rangle = \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T \sum_{\mathbf{s}} \tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I}) e^{i\mathbf{s} \cdot \omega t} = \sum_{\mathbf{s}} \tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I}) F(\mathbf{s} \cdot \omega T). \end{aligned}$$

La (5.16) ci dice che convergono $\forall t$ gli integrandi nella formula soprastante: rimane allora da dimostrare la convergenza degli integrali, fino ad un T fissato; questo può essere fatto con il teorema della convergenza dominata di Lebesgue. Si può scrivere

$$\begin{aligned} &\left| \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} \bar{a}_{\mathbf{m}}(\hbar) a_{\mathbf{n}}(\hbar) f_{\mathbf{mn}}(\hbar) e^{i(E_{\mathbf{m}} - E_{\mathbf{n}})t/\hbar} \right| \leq \\ &\leq \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} |\bar{a}_{\mathbf{m}}(\hbar) a_{\mathbf{n}}(\hbar)| |f_{\mathbf{mn}}(\hbar)| \leq \\ &\leq \sum_{\substack{\mathbf{m}, \mathbf{n} \in \\ B(\bar{\mathbf{n}}, \Delta n)}} |f_{\mathbf{mn}}(\hbar)| \leq \text{costante rispetto ad } \hbar, \end{aligned} \tag{6.2}$$

infatti l'ultima somma è una somma finita di termini limitati in \hbar (perché convergenti). Ora, una funzione costante è sommabile su $[0, T]$ e questo prova la proposizione.

È banale, proseguendo, dimostrare la seguente

Proposizione 6.2. *Sotto lo stesso limite della proposizione precedente si ha che:*

$$\text{cl-lim}_{\mathbf{I}} \sum_{\mathbf{n}} |a_{\mathbf{n}}(\hbar)|^2 f_{\mathbf{nn}}(\hbar) = \tilde{f}_0(\mathbf{I}).$$

Non ci rimane, allora che andare a verificare il comportamento, sotto il nostro limite, del terzo e più ostico termine che compare nella (6.1), che è poi quello che sancisce l'ergodicità quantistica di un determinato sistema. Va notato che questo termine contiene tutte le coppie di stati degeneri, ma sotto

il nostro limite classico che, come avevamo già visto, localizza un pacchetto nello spazio delle azioni, esso dovrà vedersela solo con degenerazioni in intorni sempre più piccoli del punto \mathbf{I} nello spazio delle azioni: l'idea è che tanto più questi intorni sono piccoli quanto più la porzione di \mathcal{M}_E che ci interessa sarà approssimabile con il suo spazio tangente, cioè si comporterà localmente come un'oscillatore armonico, che è l'unico sistema avente \mathcal{M}_E piatta (fig.7).

Proposizione 6.3. *Sotto lo stesso limite della proposizioni precedenti si ha che:*

$$\text{cl-lim}_{\mathbf{I}} \sum_{\substack{\mathbf{n} \neq \mathbf{m} \\ E_{\mathbf{n}} = E_{\mathbf{m}}}} \bar{a}_{\mathbf{m}}(\hbar) a_{\mathbf{n}}(\hbar) f_{\mathbf{m}\mathbf{n}}(\hbar) = \sum_{\substack{\mathbf{s} \neq 0 \\ \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\omega} = 0}} \tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I}),$$

dove $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}(\mathbf{I}) = \partial H / \partial \mathbf{I}$.

L'unica cosa su cui vale la pena insistere, nel dimostrare questa proposizione, è che, man mano che $\hbar \rightarrow 0$, la condizione $E_{\mathbf{m}} - E_{\mathbf{n}} = 0$ viene sempre meglio approssimata dalla $(\mathbf{m} - \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\omega} = 0$. Ora, uno potrebbe obiettare che tale equivalenza, in generale, è vera solo al primo ordine in \hbar , mentre, quando si fa il limite $T \rightarrow \infty$, nella sommatoria in questione rimangono solo i termini per cui vale *esattamente* $E_{\mathbf{m}} = E_{\mathbf{n}}$. È altrettanto vero, però, che tutta la teoria semiclassica che stiamo usando, non ultimo il calcolo (5.1) dei livelli energetici nella approssimazione di Bohr-Sommerfeld è concepita al primo ordine in \hbar e che quindi questa affermazione ha la stessa veridicità di quelle fatte nella sezione precedente; per cui, per quanto riguarda i nostri conti, ci dobbiamo mettere nell'ordine di idee che \hbar è talmente piccolo che tutte le volte che compare con una potenza strettamente maggiore di zero esso è nullo.

Chiarito questo, la proposizione si dimostra in maniera del tutto analoga alla formula (5.16):

$$\begin{aligned} & \text{cl-lim}_{\mathbf{I}} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\substack{\mathbf{s} \neq 0 \\ E_{\mathbf{n}+\mathbf{s}} = E_{\mathbf{n}}}} \bar{a}_{\mathbf{n}+\mathbf{s}}(\hbar) a_{\mathbf{n}}(\hbar) f_{\mathbf{n}+\mathbf{s},\mathbf{n}}(\hbar) = \\ & = \text{cl-lim}_{\mathbf{I}} \sum_{\mathbf{n}} |a_{\mathbf{n}}(\hbar)|^2 \sum_{\substack{\mathbf{s} \neq 0 \\ E_{\mathbf{n}+\mathbf{s}} = E_{\mathbf{n}}}} f_{\mathbf{n}+\mathbf{s},\mathbf{n}}(\hbar) = \sum_{\substack{\mathbf{s} \neq 0 \\ \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\omega} = 0}} \tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I}). \end{aligned} \tag{6.3}$$

Forse vale la pena sottolineare che anche qui, come nel già citato calcolo (5.16), bisogna porre attenzione ai domini delle sommatorie; per esempio, la somma su \mathbf{s} , anche se non espressamente richiamato per motivi di spazio e di comodità, veniva fatta su tutti gli \mathbf{s} tali che $\mathbf{m} = \mathbf{n} + \mathbf{s} \in \mathbb{N}^2$, cioè sugli $\mathbf{s} \in -\mathbf{n} + \mathbb{N}^2$. Questa, al limite, è stata sostituita con la somma su *tutti* gli $\mathbf{s} \in \mathbb{Z}^2$; questo è giusto poiché al limite gli $|a_{\mathbf{n}}(\hbar)|^2$ saranno diversi da zero solo per grandi (n_1, n_2) . Allora $-\mathbf{n} + \mathbb{N}^2 \simeq \mathbb{Z}^2$.

Se teniamo conto che vale, vedi (1.9), $\lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{s}} \tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I}) F(\mathbf{s} \cdot \omega T) = \sum_{\mathbf{s} \cdot \omega = 0} \tilde{f}_{\mathbf{s}}(\mathbf{I})$ possiamo affermare il notevole

Teorema 6.4. *Dato un sistema integrabile ed un osservabile f per cui vale la formula (5.2), si ha che la (6.1) si riconduce, al limite classico sul toro, alla formula classica della media temporale di f . In altre parole è commutativo il grafico in fig.8.*

Abbiamo cioè raggiunto il risultato che ci sembrava, all'inizio della sezione, il più auspicabile. Tale commutatività rende le cose decisamente interessanti e ci mostra come le nozioni quantistiche si riconducano alle classiche nella maniera meno traumatica possibile, a patto, come si è ribadito a sufficienza nelle sezioni precedenti, di definire in maniera fisicamente corretta e matematicamente conveniente cosa si intende per limite classico.

Se tale commutatività avesse caratteri più generali (ma parleremo di questo e dei problemi a ciò connessi nella prossima sezione) allora saremmo tentati di dare le seguenti due definizioni, che, almeno nel nostro caso, valgono.

Definizione 6.5 (VON NEUMANN). *Un sistema quantistico è quantisticamente ergodico quando il suo spettro è semplice; in altre parole quando vale la*

$$\langle \psi, \hat{f}^T \psi \rangle \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \sum_n |a_n|^2 f_{nn}$$

Definizione 6.6. *Un sistema integrabile quantistico è classicamente ergodico quando, $\forall \mathbf{I} \in \mathcal{M}_E$ vale*

$$\text{cl-lim}_{\mathbf{I}} \lim_{T \rightarrow \infty} \langle \psi, \hat{f}^T \psi \rangle = \bar{f}(E)$$

essendo il membro destro la media spaziale sulla varietà M_E (vedi definizioni in sezione 1).

Se così stanno le cose, la definizione 6.6 si riconduce esattamente a quella classica per cui, vedi parte finale della sezione 1, tutti i sistemi monodimensionali sono ergodici e tutti i multidimensionali non lo sono, anche se invadono tutto il loro toro invariante.

È interessante notare che i due tipi di ergodicità non sono collegati fra loro: il nostro procedimento di limite, infatti, ci ha insegnato che il "termine misto" della (6.1) dipende per \hbar molto piccoli, solo dalle degenerazioni in un intorno di \mathbf{I} e queste dipendono solo dalla direzione del gradiente della H ivi calcolato. Perciò conta la struttura "locale" dello spettro, se per locale si intende localizzata attorno ad un determinato vettore di azione.²

Ci sono allora dei sistemi quantisticamente ergodici che non conservano tale proprietà al limite (è il caso per esempio, come ampiamente sottolineato, dell'oscillatore armonico in due dimensioni) e ci sono sistemi, anche se non rientrano fra quelli studiati in questa tesi, che sono quantisticamente non ergodici, ma classicamente sono quanto di più caotico si possa trovare. Un esempio è il gatto di Arnold (vedi (1.13)) che ha degenerazioni per $\hbar > 0$ le quali scompaiono al limite permettendoci di ritrovare tutte le sue proprietà caotiche classiche ([DGI]).

² Per quanto riguarda il limite sul toro tutti i sistemi si comportano come un'oscillatore armonico, a rafforzare, se mai ce ne fosse stato bisogno, l'importanza di questo tipo di sistemi.

7. CONCLUSIONI E PROSPETTIVE

Forse il modo migliore di concludere questa tesi è riepilogare il percorso logico che si è fatto per arrivare ai risultati sull'ergodicità quantistica dei sistemi integrabili.

Dopo una carrellata di nozioni di richiamo della teoria ergodica, che è appunto la teoria da cui bisogna partire per avere una comprensione generale ed il più possibile astratta di ciò che si intende per caos deterministico, abbiamo affrontato il delicato problema della quantizzazione come punto di partenza per il lavoro che si doveva svolgere e per giustificare la validità della regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld, che avremmo poi usato in seguito.

Da qui in avanti si è entrati nel vivo del problema cominciando a studiare probabilmente il più autorevole fisico matematico che si sia occupato di ergodicità quantistica e cioè, come ampiamente detto, Von Neumann. Il problema, però, era che la definizione di Von Neumann, pur appearing sotto molti aspetti un'ottima definizione, non concordava con la definizione classica di Boltzmann. Quello che si è fatto, allora, è stato di provare a dimenticarla (l'intera sezione 4 è dedicata a questo) e di provare a darne un'altra che sembrasse "a naso" la quantizzazione più diretta della definizione classica: la sorpresa, se così si può dire, è stata che di fatto la nuova caratterizzazione che si era trovata era equivalente a quella data da Von Neumann. Di qui il sospetto che per "smontare" una nozione che in meccanica quantistica sembra funzionare a meraviglia, ma che non coincide con la sua controparte classica, si debba necessariamente effettuare un limite classico.

Questo è quanto abbiamo fatto in sezione 5 limitandoci, unicamente per motivi di difficoltà ¹, al caso dei sistemi integrabili ed al limite sul toro. Definito tale limite e dimostrate rigorosamente le sue proprietà per quanto riguarda gli elementi di matrice di un dato osservabile, si è potuti approdare al risultato della sezione 6 che ci dice che la formula di Von Neumann si

¹ Effettivamente la sezione 5, se mi è concesso dirlo, non rende ragione degli svariati tentativi fatti per definire il più generale e "trattabile" possibile. Dirò qualcosa più avanti.

riconduce alla formula classica "senza traumi". Ancora una volta avevamo trovato un buon motivo per considerare basilare la definizione di Von Neumann di ergodicità quantistica, ma stavolta eravamo in grado di dire dove essa fallisse al confronto con il caso classico. Precisamente quello che si è visto, limitandoci per semplicità al caso di un sistema quantisticamente ergodico secondo Von Neumann², è che la *media decoerente* di un operatore \hat{f} , cioè la

$$\sum_n |a_n|^2 f_{nn}, \quad (7.1)$$

è sì il giusto modo di esprimere la media spaziale *quantistica*, cioè la media in fase sulla "varietà equienergetica" M_ψ definita in (3.1), ma non si riconduce alla media spaziale classica su M_E introdotta nella prima parte della sezione 1, bensì alla media spaziale sul toro invariante classico³. Questo perché, in parole povere, la M_ψ tiene conto di tutti gli *integrali quantistici del moto*, quindi nel caso multidimensionale è più naturale associarla alla M_f , la sottovarietà di codimensione n ottenuta fissando tutti gli n integrali del moto di un sistema integrabile (vedi comunque la definizione nel teorema 1.28).

Viene però spontaneo, ora, pensare a come estendere questo risultato al caso dei sistemi non integrabili. Ho già accennato che le cose diventano subito pesanti, come mostrerò con il seguente approccio al limite classico.

Poniamo di avere un hamiltoniano con spettro semplice, tanto per prendere il caso più malleabile. Ci viene in mente di tentare, quando non abbiamo altri integrali del moto, di definire un limite classico che blocchi solo l'energia, che è l'unica variabile dinamica della cui costanza possiamo star certi. Quello che si tratta di fare, allora, è di mandare $\hbar \rightarrow 0$ in maniera tale che si abbia $E_n(\hbar) = E$. Confrontando questa idea con la definizione 5.3, ci viene in mente di considerare degli stati $\psi(\hbar) = \sum_n a_n(\hbar) e_n(\hbar)$ dove, va precisato, gli $e_n(\hbar)$ sono ordinati in maniera tale che i loro autovalori costituiscano una successione strettamente crescente: $E_0 < E_1 < \dots < E_n < \dots$

² Che non abbia cioè il termine più a destra in (6.1).

³ In gergo si dice che la (7.1), per sistemi integrabili, restituisce al limite la componente ergodica della f sul toro.

Gli $a_n(\hbar)$ saranno presi in modo che variino molto lentamente con n e diventino nulli all'infuori dell'intervallo $[\bar{n} - \Delta n, \bar{n} + \Delta n]$ dove, come al solito, $1 \ll \Delta n \ll \bar{n}$, e con \bar{n} e \hbar tali che $E_{\bar{n}}(\hbar) = E$. Passiamo ora alla ovvia definizione che ne segue:

Definizione 7.1 (LIMITE CLASSICO SULLA VARIETÀ EQUIENERGETICA). *Viene detto limite classico sulla varietà equienergetica di energia E il seguente limite:*

$$\text{cl-lim}_E \equiv \lim_{\substack{\bar{n} \rightarrow \infty \\ E_{\bar{n}}(\hbar) = E}},$$

agente su stati del tipo $\psi(\hbar)$ definiti come sopra.

Un risultato che si può ottenere con questa strumentazione riguarda la commutatività del limite $T \rightarrow \infty$ col limite classico nella (4.5). Si è dimostrato che, per $\hbar > 0$ fissato, la (4.5) è valida purché l'osservabile \hat{f} sia normalizzato secondo Hilbert-Schmidt, per cui si ha che $\exists \bar{T} = \bar{T}(\varepsilon, \hbar)$ (si ricordi che si dimostrava che il limite era uniforme sugli stati ψ) tale che $\forall T \geq \bar{T}$

$$\left| \langle \psi, \hat{f}^T \psi \rangle - \sum_n |a_n|^2 f_{nn} \right| \leq \varepsilon. \quad (7.2)$$

Vogliamo ora vedere quando tale formula mantiene la sua validità in maniera uniforme rispetto ad \hbar , se prendiamo degli stati $\psi(\hbar)$ e vi facciamo il limite poc'anzi definito. In questo senso il limite classico commuta con l'evoluzione temporale.

Proposizione 7.2. *Il limite (7.2) è uniforme rispetto al limite sulla varietà di energia E (cioè si può scegliere \bar{T} indipendente da $\hbar \in]0, \hbar_0]$) se e solo se la densità dei livelli energetici attorno all'energia E va, per $\hbar \rightarrow 0$, come $\hbar^{-\alpha}$ con $\alpha \leq 1$.*

Si consideri infatti, in analogia a quanto scritto nella precedente sezio-

ne, il seguente conto ⁴, dove si definisce F come in (4.6):

$$\begin{aligned}
& \langle \psi(\hbar), \hat{f}^T \psi(\hbar) \rangle - \sum_n |a_n(\hbar)|^2 f_{nn}(\hbar) = \\
& = \sum_{n \geq 0} \sum_{\substack{s \geq -n \\ s \neq 0}} \bar{a}_{n+s}(\hbar) a_n(\hbar) f_{n+s,n}(\hbar) F \left(\frac{E_{n+s}(\hbar) - E_n(\hbar)}{\hbar} T \right) \simeq \\
& \simeq \sum_n |a_n(\hbar)|^2 \sum_{s \neq 0} f_{n+s,n}(\hbar) F \left(\frac{E_{n+s}(\hbar) - E_n(\hbar)}{\hbar} T \right) \simeq \\
& \simeq \text{Media}_{n \in \Lambda} \sum_{s \neq 0} f_{n+s,n}(\hbar) F \left(\frac{E_{n+s}(\hbar) - E_n(\hbar)}{\hbar} T \right).
\end{aligned} \tag{7.3}$$

La media che compare nell'ultima riga viene fatta sull'insieme di numeri quantici $\Lambda \equiv \Lambda(E, \hbar, \Delta n)$ che contiene, per ogni dato \hbar , esattamente $2\Delta n$ numeri quantici adiacenti tali che i primi Δn abbiano energia inferiore ad E e gli altri energia superiore ad E . Praticamente si tratta della *energy-shell* quantistica, tanto più stretta quanto più andiamo al limite.

È lecito supporre ⁵ che, mandati n ed \hbar al limite, $|f_{n+s,n}(\hbar)| \leq C_s$. Inoltre si suppone ⁶ che la serie $\sum_{s \neq 0} C_s$ converga. Possiamo quindi proseguire il calcolo tenendo conto delle approssimazioni fatte e della definizione di G in (4.6); inoltre eliminiamo, per semplicità di notazione, l'indicazione della dipendenza delle varie quantità da \hbar .

$$\begin{aligned}
& \left| \langle \psi, \hat{f}^T \psi \rangle - \sum_n |a_n|^2 f_{nn} \right| \leq \\
& \leq \text{Media}_{n \in \Lambda} \sum_{s \neq 0} C_s G \left(\frac{E_{n+s} - E_n}{\hbar} T \right) \leq \\
& \leq C \text{Media}_{n \in \Lambda} G \left(\frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar} T \right).
\end{aligned} \tag{7.4}$$

⁴ Non staremo quindi qui a ripetere le approssimazioni fatte con i relativi commenti.

⁵ Almeno nei casi integrabili questo si può proprio dimostrare $\forall f$.

⁶ Questo non vale in generale nemmeno nel caso dei sistemi integrabili ma è assolutamente non restrittivo considerare solo gli operatori i cui elementi di matrice si comportino in quella maniera.

Siamo ora in grado di dimostrare la prima parte della nostra proposizione. Sia infatti $P(r)dr$ la probabilità di avere uno spacing, per grandi numeri quantici, compreso fra r e $r + dr$, dove, com'è usuale per chi si occupa di spacing ([BT], [G], [BGS], [P]), la P viene calcolata sui livelli *riscalati*, tali cioè che lo spacing medio $\langle r \rangle \equiv \int rP(r)dr = 1$.

È banale vedere che, se chiamiamo $D \equiv (dN/dE)(E, \hbar)$ la densità dei livelli attorno al valore E , allora la funzione di distribuzione che dobbiamo usare è la $P_D(r) \equiv P(rD)D$: infatti anch'essa è normalizzata, ma verifica $\int rP_D(r)dr = 1/D$ che è ovviamente lo spacing medio di uno spettro avente densità D . Se Δn è molto grande, la media discreta in Λ può essere sostituita da quella continua su $r \in [0, +\infty[$, per cui si può scrivere

$$\begin{aligned} \text{Media}_{n \in \Lambda} G\left(\frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar} T\right) &\simeq \left\langle G\left(\frac{r}{\hbar} T\right) \right\rangle \equiv \\ &\equiv \int_0^\infty G\left(\frac{r}{\hbar} T\right) P(rD)Ddr = \int_0^\infty G\left(\frac{xT}{D\hbar}\right) P(x)dx. \end{aligned} \quad (7.5)$$

In questa formula la dipendenza da \hbar è finita tutta nel termine $D\hbar \approx \hbar^{-\alpha+1}$ per $\hbar \rightarrow 0$. Se $\alpha \leq 1$ tale termine, al denominatore, non fa calare l'argomento della G , per cui si può scegliere un \bar{T} indipendente da \hbar tale da rendere quell'integrale piccolo a piacere, visto che non può essere $P(x) = \delta(x)$.

Anche se non stiamo qui a delinearlo, si intuisce come si deve procedere per dimostrare il viceversa.

Si vede immediatamente (fig.6) che i sistemi integrabili n -dimensionali hanno una "funzione numero di livelli" (o, molto più brevemente, *counting function*) fatta in questa maniera:

$$N(E, \hbar) \approx \#\{j \in \mathbb{N}; E_j(\hbar) \leq E\} = \frac{A(E)}{\hbar^n}, \quad (7.6)$$

dove $A(E)$ è la misura n -dimensionale della regione dello spazio delle azioni sottesa dalla superficie \mathcal{M}_E . È ovvio allora che $D \approx \hbar^n$.

Non si capisce bene come interpretare questo risultato: da una parte abbiamo introdotto un limite che, contrariamente a quanto volevamo nella

sezione precedente, non garantisce sempre la commutazione nella formula di Von Neumann; d'altra parte, però, è anche vero che in questa maniera abbiamo trovato un modo per discriminare, ad esempio, i sistemi integrabili monodimensionali da quelli a più di un grado di libertà; non solo, ma questa differenza è dovuta alla differenza nella distribuzione dello spacing dei livelli, e questo è quanto dicevamo di voler trovare.

I problemi, comunque, non finiscono qui: per esempio, a parte il caso unidimensionale per il quale il limite sulla energy-shell è equivalente al limite sul toro, non si capisce bene cosa farà il membro sinistro della (6.1), cioè il termine $\langle \psi(\hbar), \hat{f}^T \psi(\hbar) \rangle$, al limite, e quindi non è facile ricostruire la formula dell'ergodicità classica.

Questo solo per accennare che nel delicato campo di studio dell'ergodicità quantistica e, più in generale, del caos quantistico, dove molti ricercano ma pochi hanno certezze, il problema è prima di tutto capire cosa si sta facendo e in che direzione continuare a cercare. Difatti svariate sono le linee di ricerca che si stanno seguendo attualmente ⁷ : c'è chi si occupa di studiare cosa succede in casi particolari di cui si conosca, almeno in parte, il comportamento classico ([BV], [DGI]); chi studia le proprietà statistiche dei livelli energetici ([B], [BT], [BGS], [CMG], [P]); che cerca di ricostruire una visione classica del comportamento quantistico surrogando lo spazio delle fasi con pacchetti d'onda localizzati ([H], [HS]) e chi infine tratta il problema in maniera astratta cercando di applicare la strumentazione del calcolo pseudodifferenziale ai concetti classici del caos [HMR].

⁷ Come si è detto in precedenza un ottimo libro per entrare in questi argomenti è quello di Gutzwiller.

8. RINGRAZIAMENTI

Desidero ringraziare in maniera veramente non retorica il Prof.Sandro Graffi; in primo luogo per la fiducia dimostratami assegnandomi un lavoro di tesi difficile ma affascinante, ma soprattutto per il notevole interessamento e l'enorme disponibilità che mi sono stati accordati ben oltre il normale rapporto docente-laureando.

9. BIBLIOGRAFIA

- [A] Arnold V.I. - *Metodi matematici della meccanica classica* - Editori Riuniti
- [AA] Arnold V.I., Avez A. - *Ergodic problems of classical mechanics* - W.A.Benjamin, New York
- [BV] Balazs N.L., Voros A. - Phys.Rep. **143** (1986), 109-240 - "*Chaos on the pseudosphere*"
- [B] Berry M.V. - in Casati (op.cit.) - "*Aspects of degeneracy*"
- [BL] Bocchieri P., Loinger A. - Phys.Rev. **114** (1959), 948-951 - "*Ergodic foundation of quantum statistical mechanics*"
- [BT] Berry M.V., Tabor M. - Proc.Royal Soc.London A **356** (1977), 375-394 - "*Level clustering in the regular spectrum*"
- [BGS1] Bohigas O., Giannoni M.J., Schmit C. - J.Phys.Lett. **45** (1984), 1015-1022 - "*Spectral properties of the Laplacian and random matrix theories*"
- [BGS2] Bohigas O., Giannoni M.J., Schmit C. - Phys.Rev.Lett. **52** (1984), 1-4 - "*Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level clustering of level fluctuation laws*"
- [C] Casati G. (edited by) - *Chaotic behaviour in quantum systems (Como proceeding, 1983)* - Plenum Press, New York
- [CMG] Casati G., Mantica G., Guarnieri I. - in Casati (op.cit.) - "*Spectral fluctuations and chaos in quantum systems*"
- [DGI] Degli Esposti M., Graffi S., Isola S. - to be published on Comm. Math.Phys. - "*Stochastic properties of the quantum Arnold cat in the classical limit*"
- [F] Folland G. - *Harmonic analysis in phase space* - Princeton University Press
- [FM] Fedoryuk M.V., Maslov V.P. - *Semiclassical approximation in quantum mechanics* - Riedel
- [G] Gutzwiller M. - *Chaos in classical and quantum mechanics* - Springer-Verlag

- [Gr] Graffi S. - *Le radici della quantizzazione (Quaderni di Fisica Teorica 9)* - Università degli Studi di Pavia
- [Gu] Gutzwiller M. - in Giannoni et al. (op.cit.) - "*The semi-classical quantization of chaotic Hamiltonian systems*"
- [GVZ] Giannoni M.J., Voros A., Zinn-Justin J. (editors) - "*Chaos and quantum physics (Les Houches, 1989)*" - North-Holland
- [H] Heller E.J. - in Giannoni et al. (op.cit.) - "*Wavepacket dynamics and quantum chaos*"
- [Ha] Halmos P.R. - *Lectures on ergodic theory* - Chelsea, New York
- [He] Helffer B. - *Théorie spectrale pour des opérateurs globalement elliptiques* - Asterisque 112, 1984
- [HMR] Helffer B., Martinez A., Robert D. - *Comm.Math.Phys.* **109** (1987), 313-326 - "*Ergodicité et limite semi-classique*"
- [HS] Heller E.J., Sundbeg R.L. - in Casati (op.cit.) - "*Quantum ergodicity and intensity fluctuations*"
- [K] Keller J.B. - *Ann.Phys.* **4** (1958), 180-188 - "*Corrected Bohr-Sommerfeld quantum conditions for nonseparable systems*"
- [LL] Landau L.D., Lifšits E.M. - *Meccanica quantistica (teoria non relativistica)* - Editori Riuniti
- [Ma] Manè R. - *Ergodic theory of differentiable dynamics* - Springer-Verlag
- [Mo] Moser J. (edited by) - *Dynamical systems, theory and applications (Lecture Notes in Physics 38)* - Springer-Verlag
- [P] Peres A. - in Casati (op.cit.) - "*Regular and irregular energy spectra*"
- [RH] Robert D., Helffer B. - *Ann.Inst.Fourier* **31** (1981), 169-223 - "*Comportement semi-classique du spectre des hamiltoniens quantiques elliptiques*"
- [S] Sinai Ya.G. - *Introduction to ergodic theory* - Princeton University Press
- [VN] Von Neumann J. - in J.Von Neumann, *Collected works* - "*Beweis des Ergodensatzes und des H-Theorems in der neuen Mechanik*"

[W] Weidmann J. - *Linear operator in Hilbert spaces* - Springer-Verlag