Alma Mater Studiorum · Università di Bologna

SCUOLA DI SCIENZE
Corso di Laurea Triennale in Matematica

DAL FORMALISMO HAMILTONIANO AI FONDAMENTI DELLA MECCANICA QUANTISTICA

Tesi di Laurea in Fisica Matematica

Relatore:
Chiar.mo Prof.
André Georges Martinez

Presentata da:
Iacopo Marchetti

IV Sessione
2018-2019

Premessa

Lo scopo di questo elaborato è trattare alcuni dei concetti matematici a base della meccanica quantistica (non relativista).

Dopo aver ricordato quelle due pietre miliari della meccanica classica che sono l'equazione di Eulero-Lagrange e le equazioni di Hamilton-Jacobi, si cerca di descrivere un sistema fisico quantistico seguendo i postulati di Dirac e von Neumann, per enunciare al contempo qualche risultato classico quale il principio d'incertezza d'Heisenberg.

Nel terzo capitolo vengono trattati brevemente gli operatori pseudo-differenziali, in questo caso per costruire un'associazione tra funzioni "lisce" e operatori autoaggiunti in L^2 tramite la siddetta quantizzazione di Weyl. Infine, a titolo d'esempio, viene trattato il problema di trovare lo spettro dell'oscillatore armonico usando i polinomî d'Hermite e gli operatori di creazione e distruzione.

Il testo di riferimento usato riguardo la meccanica quantistica è il classico testo di Messiah [1], e la trattazione degli operatori pseudo-differenziali segue strettamente il testo di Martinez [2]. Vengono citati inoltre [5] e il libro di Didier [4].

Indice

Capitolo 1

Relazioni canoniche nel formalismo hamiltoniano

I seguenti richiami sono tratti in parte da [3].

1.1 Richiami fondamentali

1.1.1 Sulla meccanica lagrangiana

Ricordiamo subito l'equazione d'Eulero-Lagrange:

Definizione 1.1. Siano Ω un aperto di $\mathbb{R}^d$, $[t_0, t_1]$ un intervallo reale, $\mathscr{L} = \mathscr{L}(q, \dot{q}, t)$ una funzione reale $\mathscr{C}^\infty$ definita su $\Omega \times \mathbb{R}^d \times [t_0, t_1]$, l'equazione:

$$\frac{d}{dt}[\nabla_{\dot{q}} \mathscr{L}](q, \dot{q}, t) = \nabla_q \mathscr{L}(q, \dot{q}, t) \tag{1.1}$$

è detta equazione di Eulero-Lagrange per il funzionale $q = q(t) \mapsto S(q) = \int_{t_0}^{t_1} \mathscr{L}(q(t), \dot{q(t)}, t)\ dt$ (chiamato anche azione) [1].

Ora, dato un cammino $q = q(t) : [t_0, t_1] \to \Omega$ sufficientemente regolare (almeno $\mathscr{C}^2$), vale il seguente

[1] L'azione sarà definita su certi cammini da $[t_0, t_1]$ a $\mathbb{R}^d$, ad esempio quelli $\mathscr{C}^\infty$

Teorema 1.1.1. *Il funzionale $S(q)$, definito sullo spazio dei cammini $\mathscr{C}^2$ tra t_0 e t_1, è differenziabile, ergo fissato un cammino $q(t)$ e una variazione $h(t)$ (un cammino tale che $h(t_0) = h(t_1) = 0$) , allora $S(q+h)-S(q) = F(h,q)+R(h,q)$, dove F è lineare rispetto ad h (per q fissato) ed è detto il differenziale di S (che si dimostra essere unico), mentre per R vale $|R| \leq C \sup_{t\in[t_0,t_1]} (|h|^2 + |\dot{h}|^2)$, dove $C \geq 0$ non dipende da h; inoltre, nello spazio dei cammini da $q(t_0)$ a $q(t_1)$, $q = q(t)$ è un suo estremale sse soddisfa* (1.1)*, ovvero vale:*

$$\frac{d}{dt}[\nabla_{\dot{q}}\mathscr{L}]\left(q, \frac{dq}{dt}, t\right) = \nabla_q \mathscr{L}\left(q, \frac{dq}{dt}, t\right)$$

sse il differenziale dell'azione in q è l'applicazione identicamente nulla, più precisamente per ogni variazione h vale $F(h,q) = 0$.

Per un sistema di n punti materiali, i moti "fisici" di tale sistema (quelli che occorono in natura, o quelli che obbediscono le leggi di Newton [2]) coincidono con gli estremali dell'azione di $\mathscr{L} = T - V$, dove T rappresenta l'energia cinetica e V l'energia potenziale del sistema. In questo caso la funzione $\mathscr{L}$ è detta *lagrangiana* del sistema, e il teorema di prima è anche detto *principio di minima azione di Hamilton* (per $|t_1 - t_0|$ assai piccolo, il moto fa assumere valore minimo all'azione).

L'interesse per passare dalla classica formulazione newtoniana a questa formulazione lagrangianga, è la possibilità di lavorare con coordinate arbitrarie, e quindi, se possibile, più comode, contro il fatto che dobbiamo lavorare in sistemi di riferimento inerziali per applicare le leggi di Newton. Ciò è immediato in quanto il moto, non importa quali siano le coordinate, è comunque un estremale dell'azione.

1.1.2 Trasformata di Legendre

Consideriamo $\mathscr{L}$ come prima, ma richiediamo in più che sia convessa, come funzione di $\dot{q}$, o comunque che $\nabla_{\dot{q}}\mathscr{L}(q, \dot{q}, t)$ sia un diffeomorfismo globale per ogni punto q, sempre come funzione di $\dot{q}$. Sotto queste ipotesi per ogni punto

[2] La seconda asserzione è effettivamente un teorema

p in $\mathbb{R}^d$ esiste, ed è unico, il punto $y(q,p,t)$ tale che $\nabla_{\dot{q}}\mathscr{L}(q, y(q,p,t), t) = p$. Quindi possiamo procedere con la

Definizione 1.2. È detta trasformata di Legendre di $\mathscr{L}$ la funzione reale (il dominio è lo stesso di $\mathscr{L}$)

$$H(q,p,t) =< p, y(q,p,t) > -\mathscr{L}(q,y,t) \tag{1.2}$$

Equivalentemente è la funzione $< p, \dot{q} > -\mathscr{L}(q, \dot{q}, t)$, valutata in $\dot{q}$ nel suo unico punto critico (rispetto a $\dot{q}$).

Se $\mathscr{L}$ è la lagrangianga d'un sistema, allora H è detta hamiltoniana o funzione di Hamilton. Ora, le ipotesi aggiunte poco sopra su $\mathscr{L}$ si trasmettono a H, sicchè possiamo rieffettuare la trasformata, per poi riottenere la funzione di partenza; la trasformata di Legendre è perciò detta involutiva.

1.2 Sistema di Hamilton e trasformazioni canoniche

Teorema 1.2.1. *Siano $\mathscr{L}$ lagrangiana d'un sistema meccanico, tale che possiamo parlare anche dell'hamiltoniana, e $q = q(t)$ un moto soluzione di* (1.1)*, allora posto $p = p(t) = \nabla_{\dot{q}}\mathscr{L}(q(t), \dot{q}(t), t)$* [3]*, la coppia (q,p) è soluzione del sistema di Hamilton-Jacobi:*

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \nabla_p H(q,p,t) \\ \dot{p} &= -\nabla_q H(q,p,t) \end{aligned} \tag{1.3}$$

Reciprocamente, se una coppia (q,p) è soluzione di (1.3)*, allora q è soluzione di* (1.1) *e troviamo che $p(t) = \nabla_{\dot{q}}\mathscr{L}(q, \dot{q}, t)$.*

Esempio 1.1. Per $\mathscr{L}(q, \dot{q}) = \frac{m}{2}|\dot{q}|^2 - V(q)$, uno ottiene l'hamiltoniana $H(q,p) = \frac{|p|^2}{2m} + V(q)$, da cui (1.3) diventa $p = m\dot{q}$ e $\dot{p} = -V'(q)$; intuitivamente la seconda uguaglianza è una riscrittura della seconda legge di

[3] $\nabla_{\dot{q}}\mathscr{L}$ è detto momento generalizzato, di conseguenza ci riferiremo a p come momento

Newton, mentre H rappresenta l'energia d'un sistema $E = T + V$ (in un sistema di riferimento inerziale possiamo scrivere l'energia cinetica come $T = \frac{m}{2}|\dot{q}|^2$).

Nell'interesse di lavorare più comodamente diamo la seguente definizione:

Definizione 1.3. Un diffeomorfismo χ tra due aperti Ω e Ω' di $\mathbb{R}^{2d}$ è detto trasformazione canonica se per ogni funzione $\mathscr{C}^\infty(\Omega)$ reale H vale che: detta $H' = H \circ \chi^{-1}$, preso un moto (q, p) soluzione di (1.3) per H, allora $(q', p') = \chi(q, p)$ è soluzione di (1.3) per H' e viceversa.

Una caratterizzazione delle trasformazioni canoniche è data da:

Teorema 1.2.2. *Un diffeomorfismo χ come prima è una trasformazione canonica sse il suo differenziale preserva la forma simplettica canonica $dp \wedge dq = dp_1 \wedge dq_1 + \ldots + dp_d \wedge dq_d$, dove pensiamo $\mathbb{R}^{2d}$ come l'insieme dei punti $(q, p) = (q_1, \ldots, q_d, p_1, \ldots, p_d)$, e ricordiamo che una forma simplettica è una 2-forma chiusa non degenere; sottolineamo che per 2-forma s'intende una 2-forma differenziale, e quindi alternata (i.e. $\omega(x, y) = -\omega(y, x)$).*

Quindi, anche se la meccanica lagrangiana e quella hamiltoniana sono equivalenti da un punto di vista fisico, siamo comunque interessati a questa nuova formulazione per il suo aspetto geometrico, la struttura simplettica. Ricordiamo solamente che in questa geometria disponiamo sì del concetto di area (e anche d'un volume che sorge in maniera naturale), ma non, ad esempio, del concetto di lunghezza , o d'angolo.

1.2.1 Parentesi di Poisson

Definizione 1.4. Siano f e g due funzioni reali $\mathscr{C}^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, definiamo la parentesi di Poisson tra f e g denotata $\{f, g\}$:

$$\{f, g\} = < \nabla_p f, \nabla_q g > - < \nabla_q f, \nabla_p g > \tag{1.4}$$

La parentesi di Poisson è ovviamente bilineare e antisimmetrica, inoltre vale l'identità di Jacobi (i.e. $\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$), quindi lo spazio delle funzioni di Hamilton, munito di questo operatore, è un'algebra di Lie.

Diamo un'altra caratterizzazione delle trasformazioni canoniche:

Teorema 1.2.3. *Il diffeomorfismo χ è una trasformazione canonica sse valgono le seguenti per ogni k ed l:*

$$\{p'_k, p'_l\} = \{q'_k, q'_l\} = 0 \quad \{p'_k, q'_l\} = \delta_{k,l} \tag{1.5}$$

dove q'_k è la k-esima componente di $\chi(q,p)$, p'_k è la $d+k$-esima componente di $\chi(q,p)$, e $\delta_{k,l}$ è la delta di Kronecker.

Diremo in questo caso che le coordinate q' e p' sono in dualità simplettica.

1.2.2 Breve analogo quantistico

Anticipiamo che nel caso quantistico passeremo da punti nello spazio a particelle rappresentate da funzioni d'onda, ovvero funzioni complesse a quadrato sommabile (i.e. $\int \psi\bar{\psi}\, dx < \infty$), che denoteremo con $|\psi(t)\rangle = \psi(t,x)$, nella notazione di Dirac (t è l'istante sulla retta reale, x è un punto di $\mathbb{R}^3$, o di $\mathbb{R}^{3n}$, se consideriamo un sistema di n punti).

Al posto delle funzioni $\mathscr{C}^\infty$ definite sullo spazio delle fasi, dette osservabili classiche, considereremo degli operatori (lineari) autoaggiunti in L^2, con dominio che sarà un sottospazio di L^2, e diremo osservabili quantistiche. Dati due operatori autoaggiunti, A e B, possiamo considerare anche $A+B$, AB e BA, definiti rispettivamente su $\mathscr{D}(A) \cap \mathscr{D}(B)$, $\{|\psi\rangle \in \mathscr{D}(B) : |B\psi\rangle \in \mathscr{D}(A)\}$ ($|B\psi\rangle = B\,|\psi\rangle = B\psi$), e analogo per BA, quindi possiamo parlare dell'*algebra* delle osservabili quantistiche. Ora, ricordando la definzione di commutatore tra A e B, $[A,B] = AB - BA$, osserviamo che anche esso è antisimmetrico, bilineare, e vale inoltre l'identità di Jacobi (segue da $[A,BC] = [A,BC] + CAB - CAB = [AB,C] + [CA,B]$), e quindi l'algebra delle osservabili quantistiche col commutatore $\frac{1}{i}[A,B]$[4] è anche formalmente essa un'algebra di Lie.

[4]Si moltiplica $[A,B]$ per $-i$ affinchè il commutatore di due osservabili sia ancora un operatore autoaggiunto.

Se indichiamo con $\hat{q}_j$ l'operatore associato alla j-esima coordinata q_j, e $\hat{p}_j$ l'operatore associata alla j-esima componente del momento, dove daremo la loro definizione nella prossima sezione, allora valgono dei risultati, le relazioni di Heisenberg, del tutto analoghi a quelli visti per le coordinate in dualità simplettica:

$$[\hat{q}_j, \hat{q}_l] = [\hat{p}_j, \hat{p}_l] = 0 \quad [\hat{q}_j, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{j,l} \quad \forall j, l \tag{1.6}$$

La $\hbar$ che compare è la costante di Planck ridotta ($\hbar = h/2\pi \approx 1.054 \times 10^{-34}$), e i è la solita unità immaginaria.

Osservazione 1. È interessante notare che in certe assiomatizzazioni della meccanica quantistica, le relazioni di Heisenberg vengono prese come punto di partenza per definire gli operatori $\hat{q}_j$ e $\hat{p}_j$. Sebbene non sarà percorsa tale strada, è importante sottolineare che dalle relazioni di Heisenberg segue che uno andrà studiando delle algebre non abeliane (a differenza dell'algebra delle osservabili classiche).

Capitolo 2

Fondamenti della meccanica quantistica

2.1 Introduzione

La meccanica quantistica è quella branca della fisica che studia sistemi meccanici microscopici (atomi, elettroni...), ovvero sistemi di dimensioni assai piccole rispetto ai corpi ordinari; la ragione per cui è sorta è data dal duplice comportamento della materia, corpuscolare e ondulatorio, che non trova luogo nella fisica precedente, invece divisa nello studio tra corpi e fenomeni d'irraggiamento. Senza citare i varî esperimenti che hanno portato alla nascita della meccanica quantistica verso la fine del XIX secolo, diamo una descrizione non troppo formale d'un sistema "quantistico" a partire da certi postulati. Innanzitutto diamo un'idea di dove stiamo lavorando.

Postulato 2.1. Ad ogni sistema fisico è associato uno spazio di Hilbert $\mathscr{H}$, a dimensione infinita, separabile e complesso.

Lo spazio $\mathscr{H}$ è costituito generalmente da certe funzioni d'onda $\psi(r) : \mathbb{R}^N \mapsto \mathbb{C}$, dette stati, che rappresentano il sistema preso in esame. Definiamo la probabilità di trovare il sistema, nello stato ψ, nelle coordinate r con la densità $P(r) = \psi(r)\psi^*(r)$ (dove indichiamo con ψ^* la funzione coniugata);

integrando su tutto lo spazio troviamo $\int \psi\psi^* \, dr = 1$, e quindi le funzioni d'onda cercate sono quelle a quadrato sommabile, in particolare presupposte di norma unitaria. Ricordiamo che lo spazio delle funzioni a quadrato sommabile, denotato con $L^2(\mathbb{R}^N)$, munito del prodotto scalare $\langle\phi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \phi^* \, \psi$ è effettivamente uno spazio di Hilbert.

2.1.1 Operatori

Postulato 2.2. Ad ogni osservabile classica A è associato un operatore lineare autoaggiunto[1] $\hat{A}$ in $\mathscr{H}$.

Cerchiamo di dare subito gli operatori corrispondenti al momento e alla posizione. Indicando con $q = (q_1, \dots, q_N)$ le coordinate, la scelta più intuitiva per la osservabile q_j è l'operatore moltiplicativo $\hat{q}_j\psi(q) = q_j\psi(q)$. In generale, per ψ appartenente ad L^2, $q_j\psi(q)$ non è a sua volta a quadrato sommabile, quindi restringiamo opportunamente il dominio a $\mathscr{D}(\hat{q}_j) = \{\psi \in L^2 \,|\, q_j\psi \in L^2\}$; ovviamente $\hat{q}_j$ è lineare e autoaggiunto (segue da $q_j \in \mathbb{R}$).

Consideriamo ora per semplicità il caso d'una singola particella. In generale una funzione d'onda è scrivibile come sovrapposizione di onde monocromatiche piane $\phi_t(x) = Ae^{i(k\cdot x - \omega t)}$ $(x, k \in \mathbb{R}^3)$, dove k è detto vettore d'onda, e $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$ rappresenta la frequenza; dato che l'onda si propaga nella direzione di k, è naturale che il momento associato p sia parallelo al vettore d'onda; più precisamente, vale la relazione di De Broglie:

$$p = \hbar k \tag{2.1}$$

dove $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ indica la costante di Planck ridotta. Ora derivando $\phi_t(x) = Ae^{i(k\cdot x - \omega t)}$ rispetto a x, e sfruttando la relazione di De Broglie, uno trova

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{[\nabla_x \phi_t] \, \phi_t^*}{AA^*} \tag{2.2}$$

Quindi $p_j\phi_t = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \phi_t}{\partial x_j}$, e perciò associamo a p_j l'operatore $\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}$; come prima dobbiamo restringere il dominio, in questo caso a $\mathscr{D}(p_j) = \{\psi \in L^2 \,|\, \partial_{x_j}\psi \in$

[1] In generale si tratta di operatori non limitati.

$L^2\} = \{\psi \in L^2 | p_j \mathscr{F}(\phi)(p) \in L^2\}$, dove intendiamo la derivata in senso debole, indichiamo con $\mathscr{F}(\phi)$ la trasformata di Fourier di ϕ, e vale l'uguaglianza tra il secondo e il terzo membro in quanto $\partial_{x_j}\phi \in L^2$ *sse* $p_i \mathscr{F}(\phi) \in L^2$ (sempre presupponendo $\phi \in L^2$). Vediamo che $\hat{p}_j$ è effettivamente autoaggiunto:

$$\langle \psi | \hat{p}_j \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\hbar}{i} [\partial_{x_j} \phi(x)] \psi^*(x)\, dx = \int_{\mathbb{R}^{N-1}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar}{i} [\partial_{x_j} \phi] \psi^*\, dx_j d\tilde{x}$$

$$\int \frac{\hbar}{i} [\partial_{x_j} \phi] \psi^*\, dx_j = - \int \frac{\hbar}{i} \phi [\partial_{x_j} \psi^*]\, dx_j = \int \left(\frac{\hbar}{i} \partial_{x_j} \psi \right)^* \phi\, dx_j$$

E quindi

$$\langle \psi | \hat{p}_j \phi \rangle = \langle \hat{p}_j \psi | \phi \rangle$$

Da quanto visto, la dimostrazione delle relazioni di Heisenberg è immediata (ψ è presupposta tale da dare un senso a quanto segue):

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k]\psi = \frac{\hbar}{i} \left(q_j \frac{\partial \psi}{\partial q_k} - \frac{\partial q_j \psi}{\partial q_k} \right) = \frac{\hbar}{i} \left(q_j \frac{\partial \psi}{\partial q_k} - \delta_{j,k}\psi - q_j \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) = i\hbar \delta_{j,k} \psi$$

$$[\hat{q}_j, \hat{q}_k]\psi = q_j q_k \psi - q_k q_j \psi = 0$$

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k]\psi = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial q_k \partial q_j} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_j \partial q_k} \right) = 0$$

2.1.2 Equazione di Schrödinger

A partire da queste due famiglie d'operatori, è naturale associare a una osservabile $A(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N)$ l'operatore $\hat{A} = A(q_1, \ldots, q_N, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_1}, \ldots)$, dove la sostituzione ha effettivamente senso se, ad esempio, A è un polinomio.[2] Un caso particolare e importante è l'hamiltoniana d'una singola particella $H(q,p) = \frac{|p|^2}{2m} + V(q)$, a cui associamo, in base a quanto detto prima, l'operatore $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V}$, dove $\Delta = \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial^2}{\partial q_k^2}$ è il Laplaciano, quindi, presa $\psi \in H^2$, dove H^2 è lo spazio di Sobolev delle funzioni a quadrato sommabile con derivate prime e seconde (deboli) in L^2, $\hat{H}\psi(q) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(q) + V(q)\psi(q)$ (l'operatore $\hat{H}$ è effettivamente autoaggiunto). Diamo un altro postulato.

[2] C'è il rischio che l'operatore associato non sia autoaggiunto (e.g. per $(q,p) \mapsto q \cdot p$); questo problema di associazione sarà trattato nel seguito.

Postulato 2.3. Una funzione d'onda $\psi_t(q)$ ($q \in \mathbb{R}^N$, $t \in \mathbb{R}$) soddisfa la seguente equazione d'evoluzione (detta equazione di Schrödinger):

$$i\hbar\partial_t[\psi_t](q) = \hat{H}\psi_t(q) \tag{2.3}$$

dove $\hat{H}$ è l'operatore associato all'hamiltoniana del sistema.

Osservazione 2. Se ψ_t e ϕ_t sono soluzioni dell'equazione di Schrödinger, derivando $\langle\phi_t|\psi_t\rangle$ rispetto al tempo segue:

$$\langle\dot{\phi}|\psi\rangle + \langle\phi|\dot{\psi}\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\left(\langle\phi|\hat{H}|\psi\rangle - \langle\phi|\hat{H}|\psi\rangle\right) = 0$$

dove abbiamo usato il fatto che $\hat{H}$ è autoaggiunto e (2.3). Quindi l'angolo tra ϕ_t e ψ_t si mantiene costante, e di conseguenza anche la norma (L^2) delle soluzioni di (2.3) è invariante al passare del tempo.

Cerchiamo di motivare l'equazione di Schrödinger: consideriamo un pacchetto d'onde (in assenza di potenziale) $\psi(t,x) = \int_{\mathbb{R}^3} F(k)e^{i(k\cdot x-\omega(k)t)}\,dk$ ($F(k) \in \mathbb{C}$), ricordando che ad ogni frequenza è associato un livello d'energia $E = \hbar\omega$, e quindi, usando anche la relazione di De Broglie, scriviamo $\psi(t,x) = \int \tilde{F}(p)e^{i(p\cdot x-Et)/\hbar}\,dp$; derivando per t troviamo:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(t,x) = \int E\tilde{F}e^{i(px-Et)/\hbar}\,dp$$

$$\hat{H}\psi(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = \int \frac{|p|^2}{2m}\tilde{F}(p)e^{i(px-Et)/\hbar}\,dp$$

Dato che $E = \frac{|p|^2}{2m}$, troviamo appunto $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(t,x) = \hat{H}\psi(t,x)$.

Osservazione 3. Essendo l'equazione lineare, se conosciamo lo stato in un certo istante, allora lo stato è "determinato" per ogni altro istante, inoltre dall'equazione si derivano facilmente gli autostati (ovvero gli autovalori) di $\hat{H}$: da $i\hbar\partial_t\psi_t = E\psi_t$ e $\hat{H}\psi_0(x) = E\psi_0(x)$ segue $\psi_t = e^{-itE/\hbar}\psi_0(x)$; dato che in questo caso particolare l'ampiezza $|\psi_t(x)|$ é invariante nel tempo, e varia soltanto la fase con velocità costante, le funzioni $\psi_t(x) = e^{-itE/\hbar}\psi_0(x)$ sono dette onde stazionarie o stati stazionari.

Supponiamo ora $\hat{H}$ tale da avere una base ortonormale $\{\phi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ di L^2 composta dai suoi autovettori (con autovalori corrispondenti E_k), allora ha senso scrivere $e^{-it\frac{\hat{H}}{\hbar}}$; più precisamente, indicato $\pi_k(\psi) = \langle\psi|\phi_k\rangle\,\phi_k$ vale

$$e^{-it\frac{\hat{H}}{\hbar}} = \sum_{k\in\mathbb{N}} e^{-it\frac{E_k}{\hbar}}\pi_k$$

Quindi dato uno stato iniziale $\psi_0(x)$ possiamo riscrivere la legge d'evoluzione come

$$\psi_t = e^{-it\hat{H}/\hbar}\psi_0$$

Più in generale, supponendo che il dominio di $\hat{H}$ sia denso in L^2 (o comunque nello spazio di Hilbert preso in esame), allora $-i\hat{H}/\hbar$ genera un gruppo unitario $U(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar}$ grazie al teorema di Stone, e quindi possiamo ancora riscrivere la legge d'evoluzione come sopra.

2.2 Statistica

Seguendo la definizione di $P(r) = \psi(r)\psi^*(r)$, diamo il seguente postulato.

Postulato 2.4. Il valore atteso di un'osservabile $\hat{A}$, d'un sistema che si trova in uno stato ψ (nell'ipotesi che $\psi \in \mathscr{D}(\hat{A})$ e $\langle\psi|\psi\rangle = 1$) , è dato da:

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle = \int \phi^*\,\hat{A}\phi \tag{2.4}$$

Anche se presupponiamo $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, possiamo ampliare la definizione semplicemente dividendo $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ per $\langle\psi|\psi\rangle$, e se due stati di norma unitaria sono l'uno il multiplo dell'altro ($\phi = \lambda\psi$ dove λ è uno scalare sulla circoferenza unitaria) allora il valore atteso di $\hat{A}$ è lo stesso nei due stati. Ricordiamo che essendo l'operatore $\hat{A}$ autoaggiunto, $\langle\hat{A}\rangle$ è un numero reale.

2.2.1 Principio d'incertezza d'Heisenberg

A partire dal valore atteso, lo scarto tipo è definito come

$$\left(\Delta_\psi\hat{A}\right)^2 = \langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\psi)^2\rangle_\psi = \langle\hat{A}^2\rangle_\psi - \langle\hat{A}\rangle_\psi^2$$

Quindi lo scarto tipo è nullo *sse* ψ è un autostato di $\hat{A}$, con autovalore $\langle\hat{A}\rangle_\psi$; ha senso dire in questo caso che possiamo misurare la grandezza $\hat{A}$ nello stato ψ. Due grandezze saranno misurabili simultaneamente in uno stato ψ se ψ è loro autostato comune, di conseguenza uno è portato a dire che due grandezze L_1 ed L_2 sono misurabili simultaneamente se $[L_1, L_2] = 0$.

Il seguente è un risultato che stride decisamente con la meccanica classica.

Proposizione 2.2.1. *Per ogni stato ψ (in $\mathscr{D}(\hat{q}_j)$ e $\mathscr{D}(\hat{p}_j)$, e tale che $q_j\psi \in \mathscr{D}(\hat{p}_j)$ e $\frac{\partial\psi}{\partial q_j} \in \mathscr{D}(\hat{q}_j)$) vale la seguente diseguaglianza, detta principio d'incertezza di Heisenberg:*

$$\Delta_\psi\hat{q}_j \cdot \Delta_\psi\hat{p}_j \geq \frac{\hbar}{2} \tag{2.5}$$

Dimostrazione. Supponiamo che il valore atteso di $\hat{q}_j$ e $\hat{p}_j$ sia nullo; quindi sotto queste ipotesi:

$$(\Delta\hat{q}_j)^2 = \int q_j^2|\psi|^2\,dq \quad (\Delta\hat{p}_j)^2 = -\hbar^2\int\frac{\partial^2\psi}{\partial q_j^2}\psi^*\,dq = \hbar^2\int\left|\frac{\partial\psi}{\partial q_j}\right|^2\,dq$$

Definiamo

$$\begin{aligned}
I(\lambda) = \int\left|\lambda q_j\psi + \frac{\partial\psi}{\partial q_j}\right|^2\,dq &= \int\lambda^2 q_j^2|\psi|^2 + \left|\frac{\partial\psi}{\partial q_j}\right|^2 + 2\lambda q_j\Re\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial q_j}\right)\,dq \\
&= \lambda^2\int q_j^2|\psi|^2\,dq + \frac{1}{\hbar^2}\hbar^2\int\left|\frac{\partial\psi}{\partial q_j}\right|^2\,dq + 2\lambda\int q_j\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial q_j}\,dq \\
&= \lambda^2\,(\Delta\hat{q}_j)^2 + \frac{(\Delta\hat{p}_j)^2}{\hbar^2} + \lambda\int q_j\frac{\partial|\psi|^2}{\partial q_j}\,dq \\
&= \lambda^2\,(\Delta\hat{q}_j)^2 + \frac{(\Delta\hat{p}_j)^2}{\hbar^2} - \lambda\int|\psi|^2\,dq = \lambda^2\,(\Delta\hat{q}_j)^2 + \frac{(\Delta\hat{p}_j)^2}{\hbar^2} - \lambda
\end{aligned}$$

Ovviamente $I(\lambda) \geq 0$ per ogni $\lambda \in \mathbb{R}$, in particolare, per $\lambda = \frac{1}{2(\Delta\hat{q}_j)^2}$ (punto critico di $I(\lambda)$) otteniamo:

$$\frac{(\Delta\hat{p}_j)^2}{\hbar^2} \geq \frac{1}{4\,(\Delta\hat{q}_j)^2}$$

dalla quale segue la diseguaglianza voluta. □

Vediamo che può valere anche l'uguaglianza (caso unidimensionale); definiamo il pacchetto d'onda gaussiano di posizione media $x_0 \in \mathbb{R}$, momento medio p_0 e scarto tipo $\sigma \in \mathbb{R}^+$ come:

$$|x_0, p_0, \sigma\rangle = \psi(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{i\frac{p_0 x}{\hbar}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

Notiamo innanzitutto che il pacchetto d'onda è effettivamente a quadrato sommabile:

$$||\psi||^2_{L^2} = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} \int e^{-\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2} dx = \frac{1}{(\pi)^{1/2}} \int e^{-y^2} dy = 1$$

Calcoliamo i valori attesi:

$$\langle\hat{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int (\sigma y + x_0) e^{-y^2} dy = x_0$$

$$\langle\hat{p}\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \partial_x \left(e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2} \right) dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int p_0 e^{-y^2} dx = p_0$$

$$\begin{aligned} \langle\hat{x}^2\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} & \int (\sigma y + x_0)^2 e^{-y^2} dy \\ &= \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} \int (\sigma^2 y^2 + x_0^2) e^{-y^2} dy = \frac{\sigma^2}{2} + x_0^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle\hat{p}^2\rangle &= -\frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \int \psi^* \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2} = A(x) \right] dx \\ &= -\frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} \int \psi^* \hbar^2 \partial_x \left[\frac{i}{\hbar} p_0 A - \frac{1}{\sigma} \left(\frac{x-x_0}{\sigma} \right) A \right] dx \\ = -\frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}} & \int \psi^* \hbar^2 \left(-\frac{1}{\hbar^2} p_0^2 A + \frac{1}{\sigma^2} \left(\frac{x-x_0}{\sigma} \right)^2 A - \frac{1}{\sigma^2} A \right) dx = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{2\sigma^2} \end{aligned}$$

Quindi $\Delta\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma$ e $\Delta\hat{p} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{\sigma}$, e di conseguenza:

$$\Delta\hat{x} \cdot \Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2}$$

Vale una sorta d'estensione del principio d'Heisenberg detto sopra.

Proposizione 2.2.2. *In uno spazio di Hilbert complesso $\mathscr{H}$, per uno stato $\psi \in \mathscr{H}$ di norma unitaria, presi due operatori autoaggiunti L_1 e L_2, vale la seguente:*

$$\Delta_\psi L_1 \cdot \Delta_\psi L_2 \geq \frac{1}{2} \langle i[L_1, L_2] \rangle_\psi \tag{2.6}$$

supponendo ψ opportuna.

Dimostrazione. Supponiamo L_1 e L_2 con valore atteso nullo, dato che possiamo sostituirle con $L_1 - \langle L_1 \rangle$ e $L_2 - \langle L_2 \rangle$, lasciando lo scarto tipo invariato; definiamo per $\lambda \in \mathbb{R}$ $J(\lambda) = ||(L_1 + i\lambda L_2)\psi||^2_{L^2}$. Sviluppando s'ottiene:

$$J(\lambda) = ||L_1\psi||^2 + i\lambda \langle \psi | [L_1, L_2]\psi \rangle + \lambda^2 ||L_2\psi||^2$$

Dato che $J(\lambda) \geq 0$ per ogni λ, e di conseguenza $i\lambda \langle \psi | [L_1, L_2]\psi \rangle \in \mathbb{R}$, valutando $J(\lambda)$ nel suo punto critico $(1/2i)\langle \psi | [L_1, L_2]\psi \rangle / ||L_2\psi||^2$ s'ottiene il risultato voluto. □

2.2.2 Teorema di Ehrenfest

Consideriamo un operatore autoggiunto $\hat{H}$, che rappresenta l'hamiltoniana del sistema, uno stato ψ_t soluzione dell'equazione di Schrödinger e un generico operatore autoggiunto L:

Proposizione 2.2.3. *Nelle ipotesi che $\psi_t \in \mathscr{D}(\hat{H}) \cap \mathscr{D}(L)$, $\hat{H}\psi_t \in \mathscr{D}(L)$ e $L\psi_t \in \mathscr{D}(\hat{H})$ per ogni istante $t \in \mathbb{R}$, vale la seguente:*

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle_{\psi_t} = \frac{1}{i\hbar} \langle [L, \hat{H}] \rangle_{\psi_t} \tag{2.7}$$

Osservazione 4. Nel caso classico, se $(q(t), p(t))$ è soluzione del sistema d'Hamilton con hamiltoniana H, per $f \in \mathscr{C}^\infty$ reale vale un risultato analogo:

$$\frac{d}{dt} f(q(t), p(t)) = \{H, f\}(q(t), p(t))$$

dove $\{H, f\}$ è la parentesi di Poisson.

Dimostrazione.

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \langle \frac{\partial \psi}{\partial t} | L\psi \rangle + \langle \psi | L \frac{\partial \psi}{\partial t} \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H}\psi | L\psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | L\hat{H}\psi \rangle =$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}L\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|L\hat{H}\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[L,\hat{H}]\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[L,\hat{H}]\rangle$$

□

Ora consideriamo il caso d'una singola particella nello spazio con massa m, sottoposta a un potenziale V.

Teorema 2.2.4 (Teorema di Ehrenfest)**.** *Supponiamo che $\psi(t)$ e V verifichino le seguenti:*

$$x_j\psi(t) \in L^2(\mathbb{R}^3),\ \frac{\partial\psi(t)}{\partial x_j} \in L^2,\ \frac{\partial V}{\partial x_j} \in L^2$$

Valgono allora le seguenti equazioni:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}_j\rangle_{\psi_t} = \frac{1}{m}\langle\hat{p}_j\rangle \tag{2.8}$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}_j\rangle_{\psi_t} = -\langle\frac{\partial V}{\partial x_j}\rangle \tag{2.9}$$

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}_j\rangle_{\psi_t} = -\frac{1}{m}\langle\frac{\partial V}{\partial x_j}\rangle \tag{2.10}$$

Dimostrazione. Dalla proposizione precedente segue:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{x}_j\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x}_j,\hat{H}]\rangle\\ &= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\frac{\hbar^2}{2m}\Delta[x_j\psi] - V(x)x_j\psi - \frac{\hbar^2}{2m}x_j\Delta\psi + x_jV(x)\psi\rangle\\ &= \frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\langle\psi|2\frac{\partial\psi}{\partial x_j} + x_j\Delta\psi - x_j\Delta\psi\rangle = \frac{1}{m}\langle\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x_j}\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}_j\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\hat{p}_j\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p}_j,\hat{H}]\rangle\\ &= -\langle\psi| - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x_j}[\Delta\psi] + \frac{\partial}{\partial x_j}[V(x)\psi] + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\left[\frac{\partial\psi}{\partial x_j}\right] - V(x)\frac{\partial\psi}{\partial x_j}\rangle\\ &= -\langle\psi|\frac{\partial V}{\partial x_j}\psi\rangle = -\langle\frac{\partial V}{\partial x_j}\rangle\end{aligned}$$

□

Capitolo 3

Quantizzazione tramite operatori pseudodifferenziali

In questa sezione cerchiamo d'associare ad ogni $a(x, \xi) \in \mathscr{C}^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ un operatore autoaggiunto in $L^2(\mathbb{R}^n)$, e vedere qualche proprietà di questa associazione.

3.1 Operatori pseudo-differenziali

3.1.1 Notazione

Supponiamo di lavorare in $\mathbb{R}^n$; poniamo per brevità

$$D_x := \frac{1}{i}\partial_x = \frac{1}{i}\nabla_x$$

Intendiamo per multi-indice ogni $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$; quindi si denotano

$$|\alpha| = \alpha_1 + \ldots + \alpha_n$$
$$D_x^\alpha = D_{x_1}^{\alpha_1} \ldots D_{x_n}^{\alpha_n}$$
$$\partial_x^\alpha = \partial_{x_1}^{\alpha_1} \ldots \partial_{x_n}^{\alpha_n}$$

Definiamo inoltre $\langle \xi \rangle = (1 + |\xi|^2)^{1/2}$, e indichiamo con $\mathscr{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ lo spazio delle funzioni indefinitamente differenziabili con supporto compatto; infine $[x]$ indica la parte intera di x.

3.1.2 Integrali oscillanti

Per $a(x, y, \xi) \in \mathscr{C}^\infty(\mathbb{R}^{3n})$ tale che, per un certo $m \in \mathbb{R}$ fissato e per ogni multi-indice $\alpha \in \mathbb{N}^{3n}$ vale $|\partial^\alpha a(x, y, \xi)| \leq C_\alpha \langle \xi \rangle^m$ uniformente su $\mathbb{R}^{3n}$, dove C_α è non negativa e dipende solamente da α, denotando queste ipotesi con $a \in S_{3n}(\langle \xi \rangle^m)$, scriviamo:

$$I(a) = \int e^{i(x-y)\cdot\xi/\hbar} a(x, y, \xi)\, d\xi$$

Osservazione 5. In questo quadro $\hbar$ non è necessariamente la costante di Planck ridotta, ma indica un numero strettamente positivo, presupposto piccolo e quindi $\hbar \in (0, h_1]$, per un certo $h_1 > 0$.

Da $|a| \leq C_0 \langle \xi \rangle^m$ segue che l'integrale è assolutamente convergente se $m < -n$; quindi per $m < -n$ ha senso definire, per $u \in \mathscr{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$:

$$A_a u(x, \hbar) = \int e^{i(x-y)\xi/\hbar} a(x, y, \xi) u(y)\, dy d\xi$$

Vedendo che

$$(1 - \hbar\xi \cdot D_y) e^{i(x-y)\xi/\hbar} = (1 + |\xi|^2) e^{i(x-y)\xi/\hbar}$$

definito $L = L(\xi, \hbar D_y) = \frac{1}{1+|\xi|^2}(1 - \hbar\xi D_y)$, abbiamo:

$$L(e^{i(x-y)\xi/\hbar}) = e^{i(x-y)\xi/\hbar}$$

e più in generale $L^k(e^{i(x-y)\xi/\hbar}) = e^{i(x-y)\xi/\hbar}$ per ogni $k \in \mathbb{N}^*$. Quindi, effettuando k integrazioni per parti su $A_a u$ uno ottiene:

$$A_a u(x, \hbar) = I_k u(x) := \int e^{i(x-y)\xi/\hbar} ({}^tL)^k (au)\, dy d\xi$$

dove $({}^tL)^k(au) = \left(\frac{1+\hbar\xi D_y}{1+|\xi|^2}\right)^k (au)$; ora per ξ sufficientemente grande abbiamo:

$$|({}^tL)^k(au)| \leq C \langle \xi \rangle^{m-k}$$

allora, per $m - k < -n$, l'integrale $I_k u$ è assolutamente convergente, e quindi poniamo la seguente definizione:

Definizione 3.1. Nell'ipotesi che per un certo $m \in \mathbb{R}$, $a \in S_{3n}(\langle\xi\rangle^m)$, per ogni k intero non negativo maggiore di $m+n$ e $u \in \mathscr{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ definiamo:

$$A_a u(x,\hbar) = \int e^{i(x-y)\xi/\hbar}({}^tL)^k(au)\,dyd\xi$$

La definizione ha senso in quanto $I_k = I_l$ per ogni l sufficientemente grande.

Teorema 3.1.1. *Sempre sotto le stesse ipotesi A_a è un operatore lineare e continuo da $\mathscr{C}_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ a $\mathscr{C}^\infty(\mathbb{R}^n)$; questi operatori sono detti operatori pseudo-differenziali.*

Osservazione 6. Intendiamo la convergenza nello spazio $\mathscr{C}_0^\infty$ nella seguente maniera: presa una successione ϕ_k in $\mathscr{C}_0^\infty$, tutte con un certo supporto K, allora diremo che ϕ_k tende a 0 se $|\partial_\alpha \phi_k| \to 0$ (uniformemente) per ogni α; analogamente per $\mathscr{C}^\infty$ diremo che $\phi_k \to 0$ se per ogni compatto K' $\sup\limits_{K'} |\partial_\beta \phi_k| \to 0$ per ogni β.

Dimostrazione. Per $l \in \mathbb{N}^*$, prendiamo $k > m+n+l$ (k è comunque un intero non negativo), ad esempio $k = [m]+n+l+1$; dato che $\partial_x^\alpha \left[e^{i(x-y)\xi/\hbar}\left({}^tL\right)^k(au)\right]$ è $\mathcal{O}(\langle\xi\rangle^{l+m-k})$, dove $|\alpha| = l$, grazie al teorema della convergenza dominata di Lebesgue abbiamo che $A_a u \in \mathscr{C}^l(\mathbb{R}^n)$, e di conseguenza $A_a u \in \mathscr{C}^\infty$. Sia K un compatto che contenga il supporto di u, e K' un generico compatto di $\mathbb{R}^n$, allora, considerando k come prima e α multi-indice di altezza $|\alpha| = l$, per $x \in K'$

$$\begin{aligned}
|\partial_x^\alpha A_a u| = |\partial_x^\alpha I_k u| &\le \sum_{|\beta|\le l} C_\beta \int \langle\xi\rangle^{|\beta|} \left|\partial_x^{\alpha-\beta}\left[\left({}^tL\right)^{[m]+n+l+1}(au)\right]\right| dyd\xi \\
&\le C_\alpha \int \langle\xi\rangle^{l+m-([m]+n+l+1)} \sum_{|\beta|\le[m]+n+l+1} C_\beta^* |\partial_y^\beta u|\,dyd\xi \\
&\le C_{\alpha,K}\left(\int \langle\xi\rangle^{-n-1+(m-[m])}\,d\xi\right)\sum_{|\beta|\le k}\sup_{y\in K}|\partial_y^\beta u| \le \tilde{C}_{\alpha,K}\sum_{|\beta|\le k}\sup_K|\partial_y^\beta u|
\end{aligned}$$

Passando al sup rispetto a $x \in K'$ segue la continuità di A_a.

$\square$

Osservazione 7. È interessante notare che definito $B = {}^tA$ l'operatore che verifica (per $u, v \in \mathscr{C}_0^\infty$) $\int A_a u(x)\, v(x)\, dx = \int u(x)\, Bv(x)\, dx$, anche esso è della forma di A_a. L'operatore può essere quindi definito per dualità sulle distribuzioni a supporto compatto $\mathcal{E}'$, ergo $A_a : \mathcal{E}' \to \mathcal{D}'$ ($\mathcal{D}'$ indica lo spazio delle distribuzioni).

Uno dopo aver verificato il teorema sopra scritto, può estendere la definizione (in modo unico) anche per $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, dove $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ indica lo spazio di Schwartz delle funzioni a decrescenza rapida, inoltre anche $A_a u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$; l'operatore A_a è ancora continuo, e A_a può essere ulteriormente esteso per dualità sullo spazio delle distribuzioni temperate $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$, quindi l'operatore A_a può essere inteso da L^2 a $\mathcal{S}'$ (in quanto $L^2 \subset \mathcal{S}'$). Un esempio notevole tra questi operatori è la delta di Dirac centrata in $y = x$ ($\delta_{y=x}(u) = u(x)$), ottenuta con $a = 1/(2\pi\hbar)^n$ e usando la formula d'inversione della trasformata di Fourier.

3.2 Quantizzazione di Weyl

Consideriamo ora delle osservabili classiche $a(x,\xi) \in \mathscr{C}^\infty(\mathbb{R}^{2n})$[1]; supponendo che $a(x,\xi) \in S_{2n}(\langle\xi\rangle^m)$ per un certo m, allora $\tilde{a}(x,y,\xi) = a(\frac{x+y}{2},\xi) \in S_{3n}(\langle\xi\rangle^m)$, e quindi ha senso la seguente definizione:

Definizione 3.2. Per $a(x,\xi)$ come sopra, poniamo:

$$Op_\hbar^W(a)u(x,\hbar) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int e^{i(x-y)\xi/\hbar} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right) u(y)\, dyd\xi$$

Questa associazione è detta quantizzazione di Weyl.

Vediamo che $Op_\hbar^W a$ è simmetrico rispetto al prodotto L^2; indichiamo $\tilde{L} = \frac{1-\hbar\xi D_x}{1+|\xi|^2}$ e di conseguenza ${}^t\tilde{L} = \frac{1+\hbar\xi D_x}{1+|\xi|^2}$:

$$\langle v, (Op_\hbar^W a)u\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int e^{i(x-y)\xi/\hbar} v^*(x) \left({}^tL\right)^k \left(a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right) u(y)\right) dyd\xi dx$$

[1]Nelle notazioni del capitolo precedente x sarebbe la posizione q, mentre ξ il momento p.

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int e^{i(x-y)\xi/\hbar} \left({}^tL\right)^k (auv^*)$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int e^{i(x-y)\xi/\hbar} (\tilde{L})^k \left({}^tL\right)^k (auv^*)$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int e^{i(x-y)\xi/\hbar} \left(\left({}^t\tilde{L}\right)^k (av)\right)^* u(y) = \langle (Op_\hbar^W a)v, u\rangle$$

dove k è inteso come nella definizione di A_a.

Osservazione 8. È importante notare che, sebbene uno possa formulare delle quantizzazioni analoghe sostituendo $\frac{x+y}{2}$ con un'altra combinazione convessa di x e y in a, in generale l'operatore risultante non sará simmetrico!

Esempio 3.1. Consideriamo $a(x,\xi) = \sum_{k=1}^n x_k\xi_k$, allora otteniamo:

$$\begin{aligned} Op_\hbar^W(a)u(x) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\frac{1}{2}\sum_{k=1}^n \left(x_k \int e^{i(x-y)\xi/\hbar}\xi_k u(y)\, dyd\xi \right. \\ &\qquad \left. + \int e^{i(x-y)\xi/\hbar}\xi_k y_k u(y)\, dyd\xi\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\frac{1}{2}\sum \left(x_k \int e^{ix(\xi/\hbar)}\xi_k \mathscr{F}(u)(\xi/\hbar)\, d\xi + \int e^{ix\xi/\hbar}\xi_k\mathscr{F}(x_k u)(\xi/\hbar)\, d\xi\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^n}\frac{1}{2}\hbar\sum\left(\frac{1}{i}x_k\int e^{ix\xi}\xi_k\mathscr{F}(u)(\xi)\, d\xi + \int e^{ix\xi}\xi_k\mathscr{F}(x_k u)(\xi)\, d\xi\right) \\ &= \frac{1}{2}\sum\left(x_k\frac{\hbar}{i}\frac{\partial u}{\partial x_k} + \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}[x_k u]\right) \end{aligned}$$

Quindi $Op_\hbar^W a = \frac{1}{2}\sum\left(\hat{x}_k\hat{\xi}_k + \hat{\xi}_k\hat{x}_k\right)$. Se invece si considera $a(x,\xi)$ al posto di $a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)$ s'ottiene come operatore associato $\sum \hat{x}_k\hat{\xi}_k$, che non è simmetrico in quanto $\hat{x}_k$ e $\hat{\xi}_k$ non commutano.

3.2.1 Proprietà

Per $a(x,y,\xi) \in S_{3n}(\langle\xi\rangle^m)$ poniamo $Op_\hbar(a) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}A_a$. Vale la seguente corrispondenza:

Teorema 3.2.1. *Per a come prima, esiste ed è unica $a^W(x,\xi) \in S_{2n}$ tale che:*

$$Op_\hbar(a) = Op_\hbar^W(a^W)$$

Indicato $A = Op_\hbar(a)$*,* a^W *è detto il simbolo di Weyl di* A *ed è denotato*

$$\sigma^W(A) := a^W(x,\xi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int e^{i(\eta-\xi)\theta/\hbar} a\left(x+\frac{\theta}{2}, x-\frac{\theta}{2}, \eta\right) d\eta d\theta$$

Teorema 3.2.2 (Calcolo simbolico)**.** *Siano* $a \in S_{2n}(\langle\xi\rangle^m)$ *e* $b \in S_{2n}(\langle\xi\rangle^{m'})$*, allora esiste ed è unica* $c^W \in S_{2n}(\langle\xi\rangle^{m+m'})$ *tale che*

$$Op_\hbar^W(a) \circ Op_\hbar^W(b) = Op_\hbar^W(c^W)$$

Inoltre c^W *ha la forma:*

$$a\#^W b := c^W(x,\xi) = e^{i\hbar[D_\eta D_v - D_y D_\xi]}\left[a\left(\frac{x+y}{2},\eta\right) b\left(\frac{x+v}{2},\xi\right)\right]_{\substack{y=v=x,\\ \eta=\xi}} \tag{3.1}$$

Osservazione 9. Presi due operatori pseudo-differenziali A e B con simboli in $S_{2n}(\langle\xi\rangle^m)$ e $S_{2n}(\langle\xi\rangle^{m'})$ rispettivamente, sviluppando (3.1) s'ottiene:

$$\sigma^W(A\circ B) = \sigma^W(A)\sigma^W(B) + \mathcal{O}(\hbar)$$

Nel caso del commutatore $[A,B]$, sviluppando ulteriormente si trova:

$$\sigma^W([A,B]) = \frac{\hbar}{i}\{a,b\} + \mathcal{O}(\hbar^2)$$

Dove $\{a,b\}$ sono sempre le parentesi di Poisson.

Dato l'interesse di lavorare in L^2, ricordiamo il seguente teorema di continuità:

Teorema 3.2.3 (di Caldéron-Vaillancourt)**.** *Per* $a \in \mathscr{C}^\infty(\mathbb{R}^{3n})$*, uniformemente limitata su* $\mathbb{R}^{3n}$ *assieme a ogni sua derivata,* $Op_\hbar(a)$ *è un operatore continuo in* $L^2(\mathbb{R}^n)$*, e vale la stima*

$$||Op_\hbar(a)||_{\mathscr{L}(L^2)} \leq C_n\left(\sum_{|\alpha|\leq M_n} ||\partial^\alpha a||_{L^\infty(\mathbb{R}^{3n})}\right)$$

dove C_n *e* M_n *sono delle costanti positive che dipendono solo da* n*.*

Capitolo 4

L'oscillatore armonico

L'oscillatore armonico rappresenta, in meccanica classica, una particella vincolata a muoversi su un'asse, soggetta a una forza ristabilente proporzionale alla posizione. La forza ha forma $-m\omega^2 q$, dove $\omega > 0$, e quindi l'hamiltoniana associata al sistema è

$$H(q,p) = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2 q^2)$$

Dalle equazioni di Hamilton-Jacobi $\dot{q}_t = \frac{p_t}{m}$ e $\dot{p}_t = -m\omega^2 q_t$ seguono $\ddot{q}_t + \omega^2 q_t = 0$ e $\ddot{p}_t + \omega^2 p_t = 0$, e quindi le soluzioni sono delle onde sinusoidali, inoltre, fissato $H(q,p) = e = cost\, \forall (q,p) \in \mathbb{R}^2$, le soluzioni (q_t, p_t) appartengono a un'ellisse.

L'interesse di studiare l'oscillatore armonico nella meccanica quantistica è molteplice: è uno dei casi in cui si può calcolare effettivamente lo spettro di $\hat{H}$, in particolare consente di ricavare lo spettro dell'atomo di idrogeno; uno può inoltre approssimare altri potenziali in fisica, intorno a dei punti d'equilibrio stabili, col potenziale armonico $m\omega^2 q/2$; infine uno si imbatte nell'oscillatore armonico ogni qualvolta si studiano problemi che trattano oscillazioni quantizzate.

4.1 Caso unidimensionale

Consideriamo $\tilde{H}(\tilde{x},\tilde{p}) = \frac{1}{2m}(\tilde{p}^2 + m^2\omega^2\tilde{x}^2)$, e per facilitare i calcoli poniamo

$$x = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\tilde{x} \quad p = (m\hbar\omega)^{-1/2}\tilde{p}$$

$$H = \frac{1}{\hbar\omega}\tilde{H}$$

sicchè da $H = \frac{1}{2}(x^2 + p^2)$ otteniamo l'operatore

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left[-\frac{d^2}{dx^2} + x^2\right]$$

Dato il problema $\hat{H}\phi = \phi/2$, ovvero $\frac{d^2\phi}{dx^2} + \phi = x^2\phi$, uno trova come soluzione $\phi_0 = e^{-x^2/2}$ (motiveremo questa scelta più in là). Se poniamo

$$h_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\left(\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}\right) \qquad n = 0, 1, \ldots, +\infty$$

gli h_n sono dei polinomî di grado n, detti polinomî d'Hermite; poniamo ora $\phi_n(x) = h_n(x)\phi_0(x)$, che può essere anche riscritto come

$$h_n(x)\phi_0(x) = (-1)^n e^{x^2/2}\frac{d^n}{dx^n}\left[e^{-x^2/2}\phi_0(x)\right] = \left[\frac{d}{dx} - x\right]^n \phi_0 = (-2/\sqrt{2}a^*)^n\phi_0$$

dove l'operatore $a^* = \sqrt{2}/2(\hat{x} - i\hat{p}) = \sqrt{2}/2\left(x - \frac{d}{dx}\right)$ è detto operatore di creazione. Definito $a = \sqrt{2}/2(\hat{x} + i\hat{p}) = \sqrt{2}/2\left(x + \frac{d}{dx}\right)$, detto operatore di distruzione (a e a^* sono uno l'aggiunto dell'altro), possiamo riscrivere $\hat{H}$ come $\hat{H} = a^*a + \frac{1}{2}$, e quindi il problema di trovare gli autovalori di $\hat{H}$ può essere ricondotto a $N = a^*a$.

Osservazione 10. Da $a\phi = 0$, ovvero $\phi' = -x\phi$, segue che $\phi'/\phi = -x$, e quindi $\log\phi = -x^2/2$ (a meno d'una costante), da cui $\phi = \phi_0 = e^{-x^2/2}$; ora da $a\phi_0 = 0$ segue appunto che $\hat{H}\phi_0 = (0 + 1/2)\phi_0$.

Teorema 4.1.1. *Sia ϕ un autovettore di N, ed E il suo autovalore corrispondente, allora:*

1. *necessariamente $E \geq 0$;*

2. *se* $E = 0$, *anche* $a\phi = 0$; *altrimenti* $a\phi$ *è un vettore non nullo di norma (al quadrato)* $E \langle \phi | \phi \rangle$, *inoltre è un autovettore di* N *con autovalore* $E - 1$;

3. *il vettore* $a^*\phi$ *è non nullo, e la sua norma (al quadrato) è* $(E+1) \langle \phi | \phi \rangle$; *inoltre è un autovettore di* N *con autovalore* $E + 1$.

Dimostrazione. Dato che $aa^* = N + 1$, abbiamo le seguenti uguaglianze

$$||a\phi||^2 = \langle \phi | N | \phi \rangle = E \langle \phi | \phi \rangle$$

$$||a^*\phi||^2 = \langle \phi | (N+1) | \phi \rangle = (E+1) \langle \phi | \phi \rangle$$

Calcolando $Na = a^*aa = (aa^* - 1)a = a(N-1)$ e $Na^* = a^*(N+1)$, seguono

$$Na\phi = a(N-1)\phi = (E-1)a\phi \quad Na^*\phi = a(N+1)\phi = (E+1)a^*\phi$$

$\square$

Quindi, applicando il teorema a ϕ_0, otteniamo che $\{\phi_n\}$ è una successione di autovettori con autovalori $n + \frac{1}{2}$. Dal fatto che i polinomî d'Hermite sono densi in L^2, segue che le ϕ_n, una volta normalizzate, formano una base ortonormale di L^2, che indichiamo con $\{|n\rangle\}_{n\geq 0}$ $(N|n\rangle = n|n\rangle)$, e lo spettro di $\hat{H}$ è $\sigma(\hat{H}) = \sigma_p(\hat{H}) = \left\{n + \frac{1}{2} | n \in \mathbb{N}\right\}$; infine, dato che $\hbar\omega H = \tilde{H}$, abbiamo $\sigma(\hat{\tilde{H}}) = \left\{\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) | n \in \mathbb{N}\right\}$, e le autofunzioni di $\hat{\tilde{H}}$ sono $\tilde{\phi}_n(\tilde{x}) = \phi_n\left(\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \tilde{x}\right)$, dove le ϕ_n sono sempre le autofunzioni di $\hat{H}$ scritte sopra.

4.2 Caso a più dimensioni

Lavoriamo in $\mathbb{R}^m$; sia A una matrice $m \times m$ definita positiva, scriviamo l'hamiltoniana $H(q,p) = \frac{1}{2m}\left(|p|^2 + m^2 \langle Aq, q \rangle\right)$. Dato che A, applicando delle trasformazioni ortogonali, è scrivibile come una matrice diagonale, con gli autovalori ω_k^2 sulla diagonale, possiamo considerare

$$H(q,p) = \frac{1}{2m}\left(\sum_{k=1}^{m} p_k^2 + m^2\omega_k^2 q_k^2\right) = \sum_{k=1}^{m} H_k$$

dove $H_k = \frac{1}{2m}\left(p_k^2 + m^2\omega_k^2 q_k^2\right)$; sia $|n_k\rangle$ l'autovettore (di norma unitaria) di $\hat{H}_k$ con autovalore $\hbar\omega_k(n_k+\frac{1}{2})$, allora denotato $|n_1 n_2 \dots n_m\rangle = |n_1\rangle \dots |n_m\rangle$, segue che $\hat{H}_k |n_1 \dots n_m\rangle = \hbar\omega_k \left(n_k + \frac{1}{2}\right) |n_1 \dots n_m\rangle$, e quindi $|n_1 \dots\rangle$ è autovettore di $\hat{H}$, più precisamente vale

$$\hat{H} |n_1 \dots n_m\rangle = \hbar \left(\omega_1 n_1 + \ldots + \omega_m n_m + \frac{\sum_{k=1}^m \omega_k}{2}\right) |n_1 \dots n_m\rangle$$

Similmente al caso unidimensionale, troviamo che

$$\sigma(\hat{H}) = \left\{ \sum_{k=1}^{m} \left(\hbar\omega_k \left(n_k + \frac{1}{2}\right)\right) : (n_1, \ldots, n_m) \in \mathbb{N}^m \right\}$$

In particolare, nel caso dell'oscillatore armonico isotropo ($\forall k\, \omega_k = \omega$) uno ottiene $\sigma(\hat{H}) = \left\{\hbar\omega \left(\left(\sum n_k\right) + \frac{m}{2}\right)\right\}$.

Bibliografia

[1] A. Messiah, *Quantum Mechanics.* Dover Books on Physics, Mineola, New York: Dover Publications, 2014.

[2] A. G. Martinez, *An Introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis.* New York: Springer, 2011.

[3] V. I. Arnold, *Metodi matematici della meccanica classica.* Roma: Editori Riuniti university press, 2010.

[4] R. Didier, *Autour de l'Approximation Semi-Classique.* No. 68 in Progress in Mathematics, Boston: Birkhäuser, 1987.

[5] O. Lablée, "Une vue panoramique sur l'analyse semi-classique," *HAL*, June 2009.