Università degli Studi di Padova

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

Forme Quadratiche in Meccanica Quantistica

Laureando: Marco Michetti
Relatore: Prof. Pieralberto Marchetti

Anno accademico 2016-2017

Indice

Capitolo 1

Introduzione

Uno dei problemi fondamentali che si incontra nello studio di un sistema quantistico è la risoluzione dell'equazione di Schrödinger stazionaria

$$\hat{H}\psi = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V})\psi = E\psi. \tag{1.1}$$

Dove $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V}$ è un operatore dato dalla somma dell'operatore laplaciano Δ con l' operatore che descrive il potenziale $\hat{V}$, ψ la funzione d'onda che descrive lo stato del sistema quantistico di energia E, un elemento dello spazio di Hilbert $\psi \in H$ se E appartiene allo spettro discreto. Come è evidente la (1.1) rappresenta l'equazione spettrale dell'operatore $\hat{H}$ detto Hamiltoniano, dove lo spettro $\sigma(H)$ (insieme degli autovalori E, eventualmente generalizzati per uno spettro continuo) è l'insieme dei possibili risultati di una misura di energia del sistema.
Un postulato della Meccanica Quantistica asserisce che una grandezza fisica A_o di un sistema quantistico è descritta da un operatore A *autoaggiunto* con dominio denso nello spazio di Hilbert H degli stati e lo spettro della grandezza fisica coincide con lo spettro dell'operatore autoaggiunto ad essa associato $\sigma(A_o) = \sigma(A)$.
Va ricordato inoltre che l'operatore Hamiltoniano governa la dinamica del sistema tramite l'equazione di Schroedinger:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V})\psi. \tag{1.2}$$

Si intuisce quindi quanto sia importante riuscire ad associare ad ogni Hamiltoniano di un modello fisico un operatore autoaggiunto, infatti se questa identificazione non avvenisse cadrebbe uno degli assiomi della Meccanica Quantistica.
Questa relazione tra Hamiltoniane ed operatori *autoaggiunti* non è sempre ovvia e ci sono moltissimi esempi di modelli fisici che hanno un'Hamiltoniana del tipo $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V)$ dove non è possibile associare al potenziale V alcun operatore *autoaggiunto*, anzi a volte non è possibile associare a V alcun tipo di operatore.
Ciò si verifica in un'Hamiltoniana molto importante in fisica, ovvero quella data dalla forma $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$, che descrive un modello 1-dimensionale dove il potenziale

è formalizzato dalla *delta di Dirac* al quale non è possibile associare alcun tipo di operatore.
In questa tesi si discuterà questo tipo di problematiche e in particolare si descriverà in dettaglio la possibilità di associare all'Hamiltoniano $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$ un operatore *autoaggiunto* tramite il formalismo delle *forme quadratiche*.
Più in dettaglio nel *Capitolo 2* verrà discussa la trattazione non formale che si fa in ambito fisico del potenziale a *delta di Dirac*, enfatizzando l'importanza che tale potenziale ha nei modelli fisici.
Mentre nel Capitolo 3 enunceremo il *Teorema KLMN* (Kato(1955), Lax e Milgram (1954), Lions (1961), Nelson (1964)) teorema che permette di definire Hamiltoniane come forme quadratiche, si introdurrà dunque tutto il formalismo matematico necessario per comprendere l'enunciato del teorema.
Il *Capitolo 4* è il capitolo più formale, in questo capitolo verrà presentata la teoria necessaria per riuscire a dimostrare il *Teorema KLMN*.
Introdurremo le *catene di Hilbert* ed enunceremo e dimostreremo importanti teoremi nell'ambito della rappresentazione di *Forme Quadratiche* tramite operatori.
Infine nell'ultimo capitolo *Capitolo 5* si vedrà come l'Hamiltoniano nella forma $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$ soddisfi le ipotesi del *Teorema KLMN* e si commenterà tale risultato, dando una visone un po' più intuitiva del teorema.

Capitolo 2

Potenziale a delta di Dirac in fisica

Moltissimi modelli fisici idealizzati richiedono per la loro trattazione un potenziale che sia della forma a *delta di Dirac*.
Un classico esempio che si può fare è la descrizione della distribuzione di carica puntiforme, mentre se si pensa a dei potenziali fisici la *delta di Dirac* permette di esprimere matematicamente il concetto fisico di contatto, ovvero due oggetti fisici interagiscono solamente quando si trovano nella stessa posizione.
Ovviamente questa è un'approssimazione fisica, infatti non esistono in natura potenziali che hanno un raggio di azione nullo, ma spesso introducendo questo tipo di interazioni si semplifica il modello matematico del sistema in esame e si riesce così ad afferrare la fisica del problema.
Un esempio di quanto detto è la descrizione della conduzione elettrica di un solido cristallino che permette di prevedere quando un solido sia conduttore, isolante o semiconduttore. Questa suddivisione, basata sulle proprietà del trasporto di carica, nasce dall'esistenza di bande, permesse o proibite, di energia dell'elettrone nel reticolo cristallino. Tali bande emergono come conseguenza della periodicità del potenziale nel quale questi elettroni si muovono, dato dalla sovrapposizione dei potenziali dovuti agli ioni nel reticolo e ne risulta un potenziale efficace periodico. Pertanto bisogna risolvere L'equazione di Schrödinger con un potenziale periodico, la più semplice formulazione del problema avviene tramite il modello di *Kronig-Penny* in cui il potenziale è formato da una successione ripetuta di barriere di potenziale alte V, larghe b, ed equispaziate di una distanza a che è la costante reticolare del solido.
La soluzione si trova imponendo le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima sulle discontinuità del potenziale, seguendo tale procedura si arriverà a dover calcolare dei determinanti di matrici 4x4 che risulta essere un compito molto gravoso. Per evitare questi calcoli macchinosi, che potrebbero oscurare la fisica del modello preso in esame, si semplifica tale problema imponendo un potenziale detto *pettine di Dirac*. Tale potenziale è dato da una successione di delta di Dirac $\delta(x)$ centrate sui

siti reticolari del solido. La forma analitica è la seguente

$$V(x) = aV_0 \sum_{n=0}^{N} \delta(x - na)$$

dove N rappresenta il numero di siti reticolari del solido.
Tale modello semplificato del problema porta (con molta meno fatica) ad evidenziare la struttura a banda delle energie degli elettroni nel solido.
Però in questa formulazione matematica del problema si pensa alla *delta di Dirac* come ad una funzione, infatti essa compare nell'Hamiltoniano pensando, un pò euristicamente, ad un potenziale di *Kronig-Penny* con barriere di ampiezza infinita e spessore nullo.
Nella Fisica questo modo non formale di pensare alla *delta di Dirac* è molto comune e porta a risultati fisicamente molto rilevanti, come nel caso appena analizzato, anche se il procedimento matematico utilizzato non è affatto rigoroso.

2.1 Trattazione non formale

Presentiamo ora la trattazione non formale del potenziale a *delta di Dirac* che è di uso comune in problemi di Fisica.
La *delta di Dirac* è definita da Dirac stesso da queste due proprietà:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \neq 0 \\ \infty & \text{se } x = 0 \end{cases} \tag{2.1}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \tag{2.2}$$

Da queste segue immediatamente la più importante proprietà della *delta di Dirac* ovvero che se moltiplichiamo per una funzione $f(x)$ e ne facciamo l'integrale sullo spazio si ottiene il valore di tale funzione nello zero:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x) dx = f(0) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = f(0). \tag{2.3}$$

Ovviamente l'integrale in questione non è necessario che vada da $-\infty$ a ∞, quello che è importante è che si estenda in un intorno dello zero cioè da $-\epsilon$ a ϵ, per qualche $\epsilon > 0$.
Consideriamo ora un potenziale della forma

$$V(x) = -a\delta(x) \tag{2.4}$$

dove a è una costante reale. Affrontiamo ora il problema dato dall'equazione (1.1), ovvero cercare i valori spettrali dell'Hamiltoniano che corrispondono ai possibili risultati di misure di energia del sistema risolvendo l'equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - a\delta(x)\psi = E\psi. \tag{2.5}$$

Analizziamo i possibili stati legati del sistema ovvero quelli per cui $E < 0$. Nella regione $x < 0$ abbiamo dalla (2.1) che $V(x) = 0$, dunque la (2.5) diventa

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = k^2\psi, \tag{2.6}$$

dove

$$k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}. \tag{2.7}$$

Considerando stati legati abbiamo che $E < 0$ dunque k è reale e positivo.
La soluzione generale dell'equazione (2.6) è

$$\psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx} \qquad (x < 0) \tag{2.8}$$

ora tale funzione d'onda deve appartenere allo spazio di Hilbert $H = L^2(\mathbb{R})$ delle funzioni quadrato integrabili dunque deve essere $A = 0$ perché il termine Ae^{-kx} non è quadrato integrabile nell'intervallo $(-\infty, 0)$, otteniamo dunque la soluzione

$$\psi(x) = Be^{kx} \qquad (x < 0). \tag{2.9}$$

Nella regione $x > 0$, $V(x)$ è nuovamente nullo e la soluzione generale è della forma $\psi(x) = Fe^{-kx} + Ge^{kx}$; questa volta il termine Ge^{kx} non è quadrato integrabile nell'intervallo $(0, \infty)$ dunque ho $G = 0$, quindi la soluzione sarà

$$\psi(x) = Fe^{-kx} \qquad (x > 0). \tag{2.10}$$

L'ultima cosa che rimane da fare è congiungere le due soluzioni (2.9) e (2.10) usando delle appropriate condizioni al contorno a $x = 0$. Le condizioni al contorno standard per lo stato $\psi(x)$:

1. ψ è sempre continua

2. $\frac{d\psi}{dx}$ è continua eccetto nei punti dove il potenziale $V(x)$ è infinito

In questo caso la prima condizione al contorno ci dice che $F = B$, dunque la soluzione generale dell'equazione

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{kx} & \text{se } x \leq 0 \\ Be^{-kx} & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \tag{2.11}$$

Il problema ora sta nel fatto che la seconda condizione al contorno non dice nulla, vediamo dalla figura 2.1 come in $x = 0$ la ψ presenti una discontinuità della derivata prima, dunque non abbiamo nessuna condizione che ci determini la costante B.
Fino ad ora però non abbiamo discusso per nulla la presenza del potenziale a *delta di Dirac* nell'origine, questo è responsabile della discontinuità di $\frac{d\psi}{dx}$ a $x = 0$ ed utilizzando le sue proprietà arriveremo a determinare la costante B.

L'idea è di integrare l'equazione di Schrödinger stazionaria da $-\epsilon$ a ϵ con $\epsilon > 0$ ed analizzare il comportamento per $\epsilon \to 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon}V(x)\psi(x)dx = E\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi(x)dx. \tag{2.12}$$

Il primo integrale è $\frac{d\psi}{dx}$, valutato nei due estremi di integrazione.
L'ultimo integrale è nullo nel limite $\epsilon \to 0$, essendo la $\psi(x)$ una funzione continua (prima condizione al contorno), per il teorema di Weiestrass, nel compatto $[-\epsilon, \epsilon]$ ha massimo M e minimo m dunque

$$m\int_{-\epsilon}^{\epsilon}dx \leq \int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi(x)dx \leq M\int_{-\epsilon}^{\epsilon}dx \tag{2.13}$$

e per il teorema dei due carabinieri segue $lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi(x)dx = 0$.
Dunque si ottiene che

$$\Delta(\frac{d\psi}{dx}) = \frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}V(x)\psi(x)dx \tag{2.14}$$

dove con con $\Delta(\frac{d\psi}{dx})$ si denota il salto che ha la derivata prima nell'origine $\Delta(\frac{d\psi}{dx}) = \frac{d\psi}{dx}(0^+) - \frac{d\psi}{dx}(0^-)$. Ora è evidente il perché se ho un potenziale infinito non posso imporre come condizione al contorno la continuità della derivata prima della ψ.
Infatti se $V(x)$ è limitata per il membro di destra della (2.14) si possono ripetere i ragionamenti simili a quelli che hanno portato alla stima (2.13) e concludere che $\Delta(\frac{d\psi}{dx}) = 0$ da cui segue la continuità di $\frac{d\psi}{dx}$ nel punto $x = 0$, ma se $V(x)$ è infinita nell'origine questa argomentazione cade.
In particolare nel caso della *delta di Dirac* avremo $V(x) = -a\delta(x)$, dunque l'equazione (2.14) diventa

$$\Delta(\frac{d\psi}{dx}) = -\frac{2ma}{\hbar^2}\psi(0). \tag{2.15}$$

Ora dalla (2.11) segue che

$$\begin{cases} \frac{d\psi}{dx} = Bke^{kx} & \text{se } x < 0 \\ \frac{d\psi}{dx} = -Bke^{-kx} & \text{se } x > 0 \end{cases} \tag{2.16}$$

Dunque ho che valgono $\frac{d\psi}{dx}(0^+) = -Bk$ e $\frac{d\psi}{dx}(0^-) = Bk$, ottenendo pertanto $\Delta(\frac{d\psi}{dx}) = \frac{d\psi}{dx}(0^+) - \frac{d\psi}{dx}(0^-) = -2Bk$.
Tenendo ora conto del fatto che $\psi(0) = B$ e della (2.15) ottengo

$$k = \frac{ma}{\hbar^2} \tag{2.17}$$

dunque l'energia permessa sarà dalla (2.7)

$$E = -\frac{\hbar^2k^2}{2m} = -\frac{ma^2}{2\hbar^2}. \tag{2.18}$$

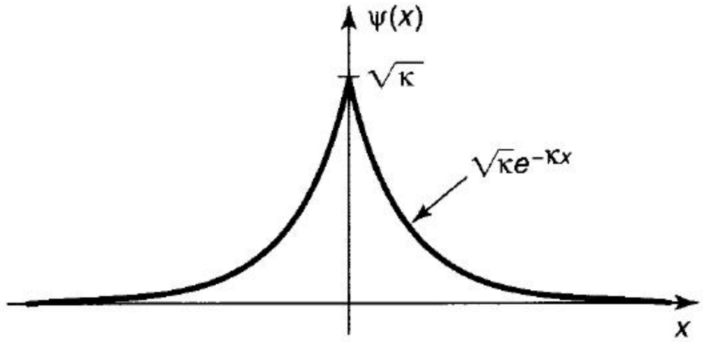

Figura 2.1: Forma della funzione d'onda

Infine normalizzando la ψ

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2|B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = \frac{|B|^2}{k} = 1,$$

quindi scegliendo la radice positiva per comodità

$$B = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{ma}}{\hbar}. \tag{2.19}$$

Dunque il sistema fisico dato da una particella che si muove in un potenziale a *delta di Dirac* ha esattamente uno stato legato la cui energia dipende da a secondo la (2.18). Tale stato è descritto dalla funzione d'onda

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{ma}}{\hbar} e^{-ma|x|/\hbar^2} \qquad \text{con} \qquad E = -\frac{ma^2}{2\hbar^2}, \tag{2.20}$$

il cui grafico è tracciato nella figura 2.1.

Come si era detto la trattazione non formale della *delta di Dirac* porta a conclusioni fisicamente rilevanti, infatti si riescono a determineare quali sono le soluzioni della (2.5), ricavando quali sono gli stati legati possibili e la rispettiva energia (equazione (2.20)).
In questa analisi si è però evitato di considerare il problema che si discuteva nell'introduzione, infatti affinché tutto quello che abbiamo trovato abbia senso bisogna associare all'Hamiltoniano $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - a\delta(x)$ un operatore $\hat{H}$ che sia *autoaggiunto*.
Tale problema non è stato minimamente trattato, infatti abbiamo considerato, come spesso si fa in fisica, la *delta di Dirac* come se fosse una funzione giustificando i passaggi matematici eseguiti in maniera un pò euristica.
Spieghiamo ora il ragionamento non formale che sta alla base della trattazione appena eseguita. Consideriamo l'equazione (2.5) nella forma

$$c\psi(x)'' + d\delta(x)\psi(x) = E\psi(x), \tag{2.21}$$

Nell'intorno dell'origine e supponiamo che la $\psi'(x)$ abbia una discontinuità di tipo salto nell'origine.
Se la derivata prima ha un salto di ampiezza $g\psi(0)$ nell'origine questa può essere formalizzata, in un intorno dell'origine, da una *funzione a gradino di Heaviside* $\theta(x)$ moltiplicata per $g\psi(0)$. Ora deriviamo questa funzione in senso generalizzato, prendiamo una generica funzione $\chi \in C^\infty(\mathbb{R})$ a decrescita rapida (una funzione test) e vediamo per quale $\theta(x)'$ ho $\langle\theta(x)'|\chi\rangle = \langle\theta(x)|\chi'\rangle$. Si ottiene

$$\langle\theta'|\chi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \theta'\chi dx = -\int_{-\infty}^{\infty} \theta\chi' dx = -[\chi(x)]_0^\infty = \chi(0) = \langle\delta|\chi\rangle\,,$$

dunque $\theta(x)' = \delta(x)$. Inserendo nella (2.21) si trova:

$$cg\psi(0)\delta(x) + d\delta(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{2.22}$$

Considerando l'equazione nell'origine, e pensando alla $\delta(x)$ come ad una funzione che seleziona il valore di $\psi(0)$, otteniamo $\psi(0)(cg + d) = \psi(0)E$ semplificando la $\psi(0)$ da entrambi i membri otteniamo l'equazione algebrica $cg+d = E$ che ci permette di definire le costanti.
Come è evidente, oltre a non analizzare per nulla l'autoaggiuntezza dell'operatore Hamiltoniano che si sta considerando, i ragionamenti precedenti sono molto informali e in ultima analisi, vista la vera natura distribuzionale della *Delta di Dirac*, matematicamente errati.
Quello che faremo nel prossimo capitolo è introdurre il *Teorema KLMN* che permetterà di associare all'Hamiltoniano $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - a\delta(x)$ un operatore *autoaggiunto.*
Tutta la Fisica del problema rimarrà comunque inalterata, nel senso che le equazioni (2.20) descriveranno ancora lo stato del sistema e la sua energia.

Capitolo 3

Hamiltoniane definite come forme quadratiche

Prima di introdurre l'enunciato del *Teorema KLMN* diamo una definizione rigorosa di tutti gli oggetti matematici necessari per comprenderlo. Iniziamo col definire la *delta di Dirac*; per questioni di semplicità di notazione esporremo la definizione nel caso $1-$ *dimensionale* tenendo presente che quanto detto è estendibile facilmente al caso *multidimensionale*.
Definiamo il concetto di funzione a decrescita rapida:

Definizione 3.1. Una funzione continua $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ si dice a *decrescita rapida* se:

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |x^n \psi(x)| < +\infty \qquad \forall n \in \mathbb{N} \tag{3.1}$$

Si definisce ora lo spazio delle *funzioni test*:

Definizione 3.2 (Funzioni test)**.** Lo spazio delle funzioni test di Schwartz $S(\mathbb{R})$ è dato dalle funzioni $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ tali che valgono le due seguenti proprietà:

$$\psi \in C^{\infty}(\mathbb{R}) \tag{3.2}$$

$$\psi^{(k)} \text{ è a decrescita rapida} \qquad \forall k \in \mathbb{N} \tag{3.3}$$

Lo spazio $S(\mathbb{R})$ è munito di una topologia che può essere introdotta definendo la convergenza di successioni in $S(\mathbb{R})$.
Sia $(\psi_n)_{n=1}^{\infty} \in S(\mathbb{R})$ una successione in $S(\mathbb{R})$, allora $\lim_{n\to\infty} \psi_n = 0$ se e solo se $\forall j, k \in \mathbb{N}$, $\lim_{n\to\infty} x^j \psi_n^{(k)}(x) = 0$ uniformemente.
Ovviamente ho che $S(\mathbb{R}) \subset L^2(\mathbb{R})$, si dimostra che $S(\mathbb{R})$ è uno spazio completo ([3]) e denso in $L^2(\mathbb{R})$ rispetto alla topologia di quest'ultimo ([7]). Costruito questo spazio analizziamo il suo *duale* ovvero lo sapzio dei funzionali lineari appicati a $S(\mathbb{R})$, gli elementi di questo spazio sono detti *Distribuzioni temperate*:

Definizione 3.3 (Distribuzione temperata)**.** Una *distribuzione temperata* ϕ è un funzionale lineare continuo in $S(\mathbb{R})$ ovvero:

$$\phi : S(\mathbb{R}) \to \mathbb{C} \tag{3.4}$$
$$\psi \to \phi(\psi) = \langle \phi | \psi \rangle \tag{3.5}$$

tali che $\forall \psi_n \to \psi$ per $n \to \infty$ in $S(\mathbb{R})$, si abbia $lim_{n\to\infty} \langle \phi | \psi_n \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$ in $\mathbb{C}$

Lo spazio delle *Distribuzioni temperate* è generalmente indicato con $S'(\mathbb{R})$ ed è lo spazio duale di $S(\mathbb{R})$.Ora in $S'(\mathbb{R})$ è possibile introdurre un topologia detta *topologia debole*.
Anche per lo spazio $S(\mathbb{R})'$ la topologia può essere introdotta definendo la convergenza di successioni.
Sia $(\psi_n)_{n=1}^{\infty} \in S(\mathbb{R})'$ una successione in $S(\mathbb{R})'$, allora $\lim_{n\to\infty} \psi_n = \psi$ in $S(\mathbb{R})'$ se e solo se $\forall \phi \in S(\mathbb{R})$, $\lim_{n\to\infty} \langle \psi_n | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$.
Abbiamo dunque costruito una catena di spazi topologici lineari del tipo:

$$S'(\mathbb{R}) \supseteq L^2(\mathbb{R}) \supseteq S(\mathbb{R}), \tag{3.6}$$

dove ogni spazio è denso nello spazio che lo contiene nella topologia di quest'ultimo; queste tipo di catene verranno analizzate in ambito differente nel prossimo paragrafo, infatti sostituiremo agli spazi $S(\mathbb{R})$ e $S'(\mathbb{R})$ spazi di Hilbert.
Si arriva infine alla definizione della *delta di Dirac* che è una particolare distribuzione temperata:

Definizione 3.4 (delta di Dirac)**.** La *delta di Dirac* δ_a con $a \in \mathbb{R}$ è una distribuzione temperata tale che:

$$\langle \delta_a | \phi \rangle = \phi(a) \tag{3.7}$$

$\forall \phi(x) \in S(\mathbb{R})$ funzioni nello spazio delle funzioni di test. Se $a = 0$ si utilizza la notazione δ.

Come è evidente da questa definizione alla *delta di Dirac* non è possibile associare alcun operatore del tipo $\hat{A} : D(A) \to H$ (dove $D(A)$ è il dominio dell'operatore), perché essa non è una funzione e in generale se $\phi \in S(\mathbb{R})$ ho che $\delta\phi \notin H$.

Diamo ora la definizione di operatore *autoaggiunto*, concetto fondamentale della Meccanica Quantistica essendo gli operatori autoagginuti, per postulato, gli oggetti matematici che descrivono le osservabili fisiche. Per far ciò richiamiamo prima la definizione di operatore aggiunto:

Definizione 3.5 (Aggiunto)**.** Sia A un operatore con dominio $D(A) \subseteq H$ denso nello spazio di Hilbert H. Allora $D(A^+)$ è il sottospazio di H t.c. $\forall\ \eta \in D(A^+)$ esiste un vettore $\chi \in H$ t.c.

$$\langle \eta | A\psi \rangle = \langle \chi | \psi \rangle \qquad\qquad \forall \psi \in D(A) \tag{3.8}$$

e *l'aggiunto hermitiano* A^+ è definito da $A^+\eta = \chi$ cioè:

$$\langle \eta | A\psi \rangle = \langle A^+\eta | \psi \rangle \qquad \forall \psi \in D(A) \qquad \forall \eta \in D(A^+) \tag{3.9}$$

Data la definizione di *aggiunto* si definisce cos'è un operatore *autoaggiunto*, come segue:

Definizione 3.6 (Autoaggiunto)**.** Un operatore A con dominio $D(A)$ densamente definito nello spazio di Hilbert H si dice *autoaggiunto* se valgono le seguenti due proprietà

$$D(A^+) = D(A) \qquad A^+ = A \tag{3.10}$$

Introduciamo ora il concetto di *Forme Quadratiche* in spazi di Hilbert.

Definizione 3.7 (Forme Quadratiche)**.** Sia H uno spazio di Hilbert, una *Forma Quadratica* E con dominio $D(E) = D$ dove D è sottospazio lineare densamente definito in H, è una mappa $E : D \times D \to \mathbb{C}$, che è anti-lineare nella prima variabile e lineare nella seconda. Una forma quadratica E in D è detta:

1. *Simmetrica*, se e solo se $\overline{E(\phi, \psi)} = E(\psi, \phi)$ per ogni $\phi, \psi \in D$
2. *Semi-limitata* (da sotto) se e solo se esiste $\alpha \in \mathbb{R}$ tale che per ogni $\psi \in D$ vale,
$$E(\psi, \psi) \geq \alpha ||\psi||_H^2; \tag{3.11}$$
il numero α è detto *vertice* di E.
3. *Positiva* se e solo se E è *semi-limitata* con *vertice* $\alpha > 0$
4. *Limitata* se e solo se esiste una costante $C \in \mathbb{R}$ tale che $\forall\ \psi, \phi \in D$ vale
$$|E(\phi, \psi)| \leq C ||\phi||_H ||\psi||_H \tag{3.12}$$

Tale definizione può essere generalizzata anche al caso di una forma quadratica come funzione $E : A \times B \to \mathbb{C}$ dove $A \supseteq B$.

Ora in generale dato un operatore $A : H \to H$ resta sempre definito una forma quadratica $b(x, y) = \langle x | Ay \rangle$ con dominio H, in questo caso l'operatore eredita tutte le definizioni date per le forme quadratiche, ad esempio un operatore si dice positivo se la forma quadratica associata ad esso è positiva; il viceversa è pero in generale falso.
Vediamo come il concetto di forme quadratiche sia legato al concetto di operatore tramite i così detti *Teoremi di rappresentazione*, che permettono di associare una forma quadratica ad un operatore e viceversa.
Teoremi di questo tipo verranno analizzati nel capito *Capitolo 4*, enunciamo ora il più semplice di questi teoremi:

Teorema 3.0.1. *Sia H uno spazio di Hilbert e b una forma quadratica limitata con dominio H, allora esiste un unico operatore $A : H \to H$ tale che $b(x, y) = \langle x|Ay\rangle$ per ogni $x, y \in H$.*

dim. Per il lemma di Riesz il più generale funzionale lineare limitato $\phi : H \to \mathbb{C}$ è sempre scrivibile nella forma $\phi(\psi) = \langle\hat{\phi}|\psi\rangle$ con $\hat{\phi} \in H$.
La dimostrazione del teorema è ora immediata, fissato un $y \in H$ ho che la forma $\overline{b(y, x)} = f(x)$ definisce un funzionale lineare limitato essendo la forma quadratica limitata.
Dunque per quanto detto ho che esiste un $\hat{y} \in H$ tale che $f(x) = \langle\hat{y}|x\rangle = \overline{b(y, x)}$ quindi definisco un operatore A tale che $Ay = \hat{y}$, segue $b(x, y) = \langle x|Ay\rangle$. Limitatezza e linearità dell'operatore A sono evidenti vista la limitatezza e linearità della forma $b(x, y)$. $\blacksquare$
Tale teorema può essere facilmente generalizzato al caso in cui la forma quadratica sia una funzione del tipo $E : B \times C \to \mathbb{C}$ dove $B \supseteq C$.

Dunque abbiamo visto un esempio di teorema di rappresentazione, tale teorema ha però delle ipotesi molto stringenti, infatti chiede la limitatezza della forma, mostreremo nel *capitolo 4* come sia possibile formulare teoremi di rappresentazione anche nel caso di forme non limitate.
In virtù di quanto detto diamo quindi la seguente definizione:

Definizione 3.8. Una Forma Quadratica b con dominio $D(b)$ è detta la forma di un operatore se esiste un teorema di rappresentazione che permette di associare alla forma b un operatore A, nel senso $b(f, g) = \langle f|Ag\rangle$, $f, g \in D(b)$. Se tale operatore è autaggiunto allora b si dice la forma di un operatore autoaggiunto.

Spesso le osservabili che appaiono nella formalizzazione matematica di un sistema fisico sono scrivibili come forme quadratiche, ora in linea di principio le forme quadratiche sono oggetti matematici completamente differenti da operatori autoaggiunti. Ma se si riesce a dimostrare che la forma quadratica in esame è la forma di un operatore autoaggiunto allora è lecito formalizzare il problema fisico in termini di forme quadratiche.
Il *Teorema KLMN* è uno dei piu importanti e noti teoremi che fornisce condizioni sufficienti ad una forma quadratica per essere definita la forma di un operatore autoaggiunto.

3.1 Enunciato del Teorema KLMN

In questa sezione enunceremo il *Teorema KLMN* che risulta centrale nella determinazione dell'autoaggiuntezza di operatori Hamiltoniani. Infatti spesso sorge il problema di studiare operatori che hanno la così detta *forma di somma* ovvero operatori del tipo $A = B + C$.
Ora questa situazione si presenta anche nell'operatore di Schrödinger che in generale ha proprio questa forma, ovvero $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V})$, dove all'operatore laplaciano si somma un potenziale.
Ora nell'analisi di un sistema fisico è fondamentale modellizzare il potenziale in modo

tale da determinare quali siano le autofunzioni per descrivere gli gli autostati dell'energia del sistema e qual è lo spettro delle energie associate.
Dunque è fondamentale risolvere il problema agli autovalori $\hat{H}\psi = E\psi$; ora come già visto nel *Capitolo 1* è essenziale che $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V})$ sia un operatore autoaggiunto.
Quindi dei quesiti naturali da porsi sono:

- Affinché l'operatore $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V)$ sia autoaggiunto è condizione necessaria che il potenziale V sia un operatore autoagginto?

- Quali sono le condizioni che deve soddisfare il potenziale V affinché l'operatore $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V)$ sia autoaggiunto ?

La risposta alla prima domanda è negativa, ovvero è possibile che $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V)$ sia operatore autoaggiunto anche quando il potenziale V non è un operatore autoaggiunto.
Mentre la risposta alla seconda domanda è data proprio dal *Teorema KLMN.*
In generale dunque dato B operatore autoaggiunto e C forma quadratica si cercano le ipotesi sotto le quali è possibilie dimostrare che la forma quadratica $A(\phi, \psi) = \langle\phi|B\psi\rangle + C(\phi, \psi)$ sia la forma di un operatore autoaggiunto secondo la *Definizione 3.8.*

Teorema 3.1.1. ***(KLMN)*** *Sia H uno spazio di Hilbert e A un operatore autoaggiunto positivo con dominio $D(A) \subseteq H$, $A : D(A) \to H$, sia $a(f, g) = \langle f|Ag\rangle$ la forma associata all'operatore A, sia $D(a)$ il dominio di tale forma, sia b una forma simmetrica con dominio $D(b)$ tale che $H \supseteq D(b) \supseteq D(a)$. Se per qualche $p \in [0, 1)$ e $q \in \mathbb{R}$ vale*

$$|b(f, f)| \leq p \langle f|Af\rangle + q||f||^2 \tag{3.13}$$

per ogni $f \in D(a)$, allora la forma quadratica $(a + b)(f, g) = \langle f|Ag\rangle + b(f, g)$ definita in $D(a) \cap D(b) = D(a)$ è la forma di un operatore autoaggiunto

Ora è evidente che se si sceglie un dominio appropriato per l'operatore Laplaciano questo teorema descrive perfettamente l'operatore di Schrödinger.
L'operatore di particella libera $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ è positivo e Hermitiano se si considerano funzioni $C^2(\mathbb{R}^d)$ a supporto compatto, il cui spazio è denotato con $C_0^2(\mathbb{R}^d)$.
La positività è immediata $\langle\phi| - \Delta\phi\rangle = \int_\Omega(\nabla\phi)^2dx \geq 0$, $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ è un sottoinsieme compatto.
Analizziamo ora la sua simmetria, consideriamo due funzioni $\phi, \psi : \Omega \to \mathbb{R}^d$ con $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ e tali che $\phi, \psi \in C_0^2(\mathbb{R}^d)$.
Utilizzando la formula di integrazione per parti ([11]), essendo funzione a supporto compatto, ho che:

$$\begin{aligned} < \phi| - \Delta\psi > &= -\int_\Omega \overline{\phi}\Delta\psi dx \\ &= \int_\Omega \overline{\nabla\phi}\nabla\psi dx \\ &= -\int_\Omega \overline{\Delta\phi}\psi dx =< -\Delta\phi|\psi > \end{aligned} \tag{3.14}$$

Dunque $\langle \phi | -\Delta\psi \rangle = \langle -\Delta\phi | \psi \rangle$ quindi l'operatore è Hermitiano. Se il dominio è tutto $\mathbb{R}^d$ posso estendere il dominio dell'operatore Hamiltoniana libera a funzioni $f^{(i)} \in L^2(\mathbb{R}^d)$, con $i = 0, 1, 2$ tali che $\lim_{||x|| \to |\infty|} f^{(j)}(x) = 0$ con $j = 0, 1$.
Ora per determinare l'autoaggiuntezza di questo operatore differenziale bisogna verificare che il dominio dell'operatore e il dominio del suo aggiunto coincidano, ovvero $D(\hat{H}) = D(\hat{H}^+)$ dove con $\hat{H}$ si intende l'operatore di particella libera.
Ora però in generale ho che $D(\hat{H}) \subset D(\hat{H}^+)$, noi non tratteremo in dettaglio l'autoaggiuntezza dell'operatore di particella libera (si veda ([7])), ma ci limiteremo a descrivere qual è la strategia che si utilizza per determinare estensioni autoaggiunte di operatori differenziali simmetrici.
Dato un operatore differenziale H simmetrico, si cerca la sua estensione autoaggiunta definendolo prima su un dominio $D^0(H)$ molto regolare (nel caso dell'operatore di particella libera è $C_0^2(\mathbb{R}^d)$), poi trovare il dominio del suo aggiunto $D^0(H^+)$, ed infine cercare di estendere il dominio di H a $D^0(H) \subset D(H)$, tale che $D(H) = D(H^+)$.
Poichè $D^0(H) \subset D(H) \subset D(H^+) \subset D^0(H^+)$, per trovare $D(H^+)$ bisogna cercare le condizioni aggiuntive da imporre su $\eta \in D^0(H^+)$ affinché $\langle \eta | A\psi \rangle = \langle A^+\eta | \psi \rangle$ per ogni $\psi \in D(H)$, segue che $\eta \in D(H^+)$.
Dunque l'estensione autoaggiunta dell'operatore di particella libera $\hat{H}$ gioca il ruolo dell'operatore A nell'enunciato del *Teorema KLMN*.
Punto cruciale del teorema è che l'operatore dato dalla somma del Laplaciano (operatore di particella libera) con la forma simmetrica che definisce il potenziale è definito in un dominio molto più ampio del dominio dell'operatore Laplaciano.
Come si evince dall'enunciato del *Teorema KLMN* il dominio dell'opertore Hamiltoniano coincide con il dominio della forma associata all'operatore autoaggiunto che in generale è più ampio del dominio dell'operatore: $D(a) \supseteq D(A)$.
Infatti ho che $f \in D(a)$ se esiste $g \in D(a)$ tale che $a(f, g) = \langle f | Ag \rangle \in \mathbb{C}$ che è una condizione meno stringente rispetto alle condizioni necessarie affinché f sia contenuta nel dominio dell'operatore autoaggiunto (vedere sezione *5.1 Commenti al teorema KLMN*).
Se noi ci limitassimo a considerare come dominio dell'operatore Hamiltoniano il dominio dell'estensione autoaggiunta del Laplaciano in molti casi fisicamente rilevanti si escluderebbero dal dominio proprio le autofunzioni del sistema.
Un esempio di quanto detto è proprio l'Hamiltoniana con potenziale a delta di Dirac 1-dimensionale $H = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$, infatti se $f \in D(H)$ ho che $f'' \in L^2(\mathbb{R})$, ma come è evidente l'autofunzione del sistema:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{ma}}{\hbar} e^{-ma|x|/\hbar^2}$$

non appartiene a $D(H)$ in quanto ha una discontinuità della derivata prima nell'origine.
Tale funzione $\psi(x)$ appartiene però al dominio della forma quadratica associato all'operatore in quanto è una funzione continua e limitata (vedere *Capitolo 5*).
Quindi in definitiva il *Teorema KLMN* è molto importante ed utile nel determinare l'autoaggiuntezza di operatori Hamiltoniani. Infatti dato un potenziale descrivibile in generale tramite una forma quadratica, e non tramite un operatore, se la forma in esa-

me soddisfa alle ipotesi del teorema allora l'Hamiltoniana è la forma di un operatore autoaggiunto, dunque un'osservabile del sistema quantistico.
L'esempio piu semplice che verrà trattato in dettaglio nella sezione *5.1 Autoaggiuntezza dell'operatore* $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$ è il caso di un sistema descritto da un potenziale fatto da una *delta di Dirac* in una dimensione. A questo potenziale non è possibile associare un operatore, infatti come si è già detto essa non è una funzione e in generale se $\phi \in S(\mathbb{R})$ ho che $\delta\phi \notin H$, è però possibile associare ad essa una forma quadratica del tipo $b(f,g) = \langle f, \delta g \rangle = \overline{f(0)}g(0)$. Vedremo nella sezione *5.1 Autoaggiuntezza dell'operatore* $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$ come questo potenziale, nel caso unidimensionale, soddisfi le ipotesi del *teorema KLMN*, dunque la forma Hamiltoniana del tipo $(-\Delta + \delta)(f,g) \to \langle f | -\Delta g \rangle + \langle f | \delta g \rangle$ sia la forma di un operatore autoaggiunto, quindi un'osservabile quantistica.
Dunque, sotto le ipotesi del *Teorema KLMN*, le Hamiltoniane di sistemi fisici possono essere descritte da forme quadratiche.

Capitolo 4

Teoremi di rappresentazione

Per arrivare a comprendere più in profondità e a dimostrare il *teorema KLMN* bisogna costruire un formalismo matematico che ci permetta di ampliare la nostra capacità di associare a forme quadratiche operatori, dunque in definitiva abbiamo bisogno di nuovi *Teoremi di rappresentazione* di forme quadratiche.
Come vedremo riusciremo a enunciare e dimostrare teoremi di rappresentazione che non hanno ipotesi forti come la limitatezza della forma richiesta dal *Teorema 3.0.1.*
Prima però di enunciare questi teoremi e di dimostrare il *Teorema KLMN* dobbiamo costruire un nuovo "linguaggio matematico" che è molto potente nell'ambito della rappresentazione delle forme quadratiche, introdurremo cioè le *catene di Hilbert.* Dimostreremo come ad ogni catena di Hilbert sia possibile associare un operatore autoaggiunto, ed infine riusciremo a costruire queste catene partendo da forme quadratiche.
Seguendo il percorso appena descritto si riuscirà dunque a rappresentare operatori autoaggiunti tramite le forme quadratiche passando per la costruzione di questa catena di Hilbert. Nel far ciò però abbiamo bisogno di chiarire bene il concetto di *completezza* di uno spazio ed analizzare le problematiche che sorgono quando si completa uno stesso spazio rispetto a due norme differenti.

4.1 Catene di Hilbert

In questo capitolo si ha l'esigenza di introdurre diversi spazi A ognuno dei quali munito di un proprio prodotto scalare. Dunque non si utilizzerà più la solita notazione $\langle . | . \rangle$, ma il prodotto scalare sarà indicato come $(.,.)_A$, mentre la norma sarà $||.||_A$ dove A è uno spazio lineare. Mentre il simbolo $\langle .,. \rangle$ verrà utilizzato per denotare una coppia di elementi.
Analizziamo ora in dettaglio le *catene di Hilbert.* Consideriamo ad esempio la catena di spazi già costruita $S'(\mathbb{R}) \supseteq L^2(\mathbb{R}) \supseteq S(\mathbb{R})$, ove $L^2(\mathbb{R})$ è lo spazio delle funzioni quadrato integrabili secondo la misura di Lebesgue, $S(\mathbb{R})$ è lo spazio delle funzioni di test di Schwartz e $S'(\mathbb{R})$ è lo spazio delle distribuzioni temperate.
Il ruolo dello spazio $L^2(\mathbb{R})$ è quello di fornire un prodotto scalare $(f,g)_{L^2(\mathbb{R})}$, con $f,g \in L^2(\mathbb{R})$, che può essere esteso per continuità ad una forma quadratica che determina l'a-

zione di una distribuzione $\alpha \in S'(\mathbb{R})$ su una funzione di test $u \in S(\mathbb{R})$. Questa forma quadratica è denotata da $(\alpha, u)_{L^2(\mathbb{R})}$.
Si dice che lo spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ è allargato dagli spazi $S'(\mathbb{R})$ e $S(\mathbb{R})$ tramite la catena di inclusioni $S'(\mathbb{R}) \supseteq L^2(\mathbb{R}) \supseteq S(\mathbb{R})$.
La costruzione di questa catena può avvenire in ambito meno generale sostituendo agli spazi lineari topologico $S'(\mathbb{R})$ e $S(\mathbb{R})$ due spazi di Hilbert, questo porta allo sviluppo delle *catene di Hilbert* che risulteranno centrali nella teoria delle rappresentazioni delle forme quadratiche.

Sia H_0 un spazio di Hilbert munito del prodotto scalare $(.,.)_{H_0}$ e della norma $||.||_{H_0}$. Consideriamo ora un sottospazio $H_+ \subseteq H_0$ che è ancora uno spazio di Hilbert rispetto al nuovo prodotto scalare $(.,.)_{H_+}$, denso in H_0 e sia $||.||_{H_+}$ la norma in H_+ tale che

$$||u||_{H_0} \leq ||u||_{H_+} \qquad (u \in H_+). \tag{4.1}$$

Gli elementi di H_+ giocano un ruolo simile alle funzioni di test nell'esempio gia visto (catena (3.6)).
Ogni elemento $f \in H_0$ genera un funzionale lineare e continuo l_f su H_+ tramite la formula

$$l_f(u) = (f, u)_{H_0} \qquad (u \in H_+). \tag{4.2}$$

Per provare la sua continuità utilizziamo il seguente teorema:

Teorema 4.1.1. *Un funzionale lineare ϕ è continuo su uno spazio di Hilbert $\Leftrightarrow$ ϕ è limitato*

dim.($\Rightarrow$) Sia ϕ continuo e supponiamo che non sia limitato. Allora: $\forall n \; \exists \psi_n$ t.c $|\phi(\psi_n)| > n||\psi_n||$ ma $\hat{\psi}_n = \frac{\psi_n}{n||\psi_n||} \to 0$ per $n \to 0$, d'altronde $|\phi(\hat{\psi}_n)| = \frac{|\phi(\psi_n)|}{n||\psi_n||} > 1$ dunque ho che $lim_{n\to\infty}\phi(\hat{\psi}_n) \neq \phi(lim_{n\to\infty}\hat{\psi}_n)$ il che è un assurdo in quanto si è supposto ϕ continua.
($\Leftarrow$) Sia ϕ limitato e $\psi_n \to \psi$. Allora $|\phi(\psi_n) - \phi(\psi)| \leq M||\psi_n - \psi|| \to 0 \Rightarrow \phi$ è continuo
■
Ora ricordando la disuguaglianza si Schwartz ho che per il funzionale l_f vale la stima:

$$|l_f(u)| = |(f, u)_{H_0}| \leq ||f||_{H_0}||u||_{H_0} \leq ||f||_{H_0}||u||_{H_+}$$

è dunque provata la continuità di l_f.
Introduciamo ora una nuova norma $||.||_{H_-}$ in H_0, prendendo la norma del funzionale l_f corrispondente all'elemento $f \in H_0$, cioè

$$||f||_{H_-} = ||l_f|| = \sup_{u \in H_+} \left\{ \frac{|(f, u)_{H_0}|}{||u||_{H_+}} \right\} \tag{4.3}$$

Dimostriamo che effettivamente questa relazione definisce una norma:

Corollario 4.1.2. *La relazione (4.3) definisce una norma in H_0*

dim.Dimostriamo qui la disuguaglianza triangolare e il fatto che da $||f||_{H_-} = 0$ segue che $f = 0$, le altre proprietà di una norma risultano banalmente verificate.
Iniziamo con la disuguaglianza triangolare ricordiamo una proprietà generale del sup: se A e B sono insiemi di reali allora $\sup(A + B) \leq \sup A + \sup B$. Dunque ho che $\forall f, g \in H_0$:

$$\begin{aligned}
||f+g||_{H_-} &= \sup_{u \in H_+} \left\{ \frac{|(f,u)_{H_0} + (g,u)_{H_0}|}{||u||_{H_+}} \right\} \\
&\leq \sup_{u \in H_+} \left\{ \frac{|(f,u)_{H_0}|}{||u||_{H_+}} + \frac{|(g,u)_{H_0}|}{||u||_{H_+}} \right\} \\
&\leq \sup_{u \in H_+} \left\{ \frac{|(f,u)_{H_0}|}{||u||_{H_+}} \right\} + \sup_{v \in H_+} \left\{ \frac{|(g,v)_{H_0}|}{||v||_{H_+}} \right\} \\
&= ||f||_{H_-} + ||g||_{H_-}.
\end{aligned}$$

Dimostriamo ora che $||f||_{H_-} = 0$ implica $f = 0$. Se $||f||_{H_-} = 0$ allora $(f, u)_{H_0} = 0$ per ogni $u \in H_+$, ora però H_+ è denso in H_0 dunque ogni elemento $g \in H_0$ può essere scritto come limite di una successione di elementi di H_+, dunque per ogni $g \in H_0$ ho che $(f, g)_{H_0} = \lim_{n\to\infty}(f, u_n)_{H_0} = 0$ perché $(f, u_n)_{H_0} = 0$ per ogni $n \in \mathbb{N}$. Da questo segue che f è l'elemento nullo dello spazio di Hilbert H_0, $f = 0$. ■

Completando lo spazio H_0 nella norma (4.3) otteniamo lo spazio H_-.

Definizione 4.1. La catena di inclusioni

$$H_- \supseteq H_0 \supseteq H_+ \tag{4.4}$$

dove ogni spazio di Hilbert è denso nello spazio che lo contiene nella topologia di quest'ultimo, è detta *catena di Hilbert*

Si usa generalmente una notazione del tipo $\alpha, \beta, ... \in H_-$, $f, g, ... \in H_0$ e $u, v, ... \in H_+$.
Abbiamo che in generale se $f \in H_0$ allora $l_f \in (H_+)'$ ovvero il funzionale lineare definito in (4.2) è un elemento del duale di di H_+, quindi in generale lo spazio H_- risulta essere un sottospazio del duale di H_+. Dunque l'espressione $\alpha(u)$ ha senso se intesa come il funzionale $\alpha \in H_-$ che agisce sull'elemento $u \in H_+$. Abbiamo gia visto un caso simile ma più generale di questo, quando si sono introdotte le funzioni generalizzate, in quel caso $\alpha(u) = (\alpha, u)_{L^2(\mathbb{R})}$ dove $\alpha \in S'(\mathbb{R})$ e $u \in S(\mathbb{R})$.
Ora introduciamo la forma quadratica

$$H_- \times H_+ \ni \langle \alpha, u \rangle \to (\alpha, u)_{H_0} \in \mathbb{C} \tag{4.5}$$

che è ottenuta come estensione della forma $H_+ \times H_+ \ni \langle v, u \rangle \to (v, u)_{H_0} \in \mathbb{C}$ a $H_- \times H_+$ per continuità.
La disuguaglianza di Schwartz in questo ambiente ammette la seguente generalizzazione:

$$|(\alpha, u)_{H_0}| \leq ||\alpha||_{H_-} ||u||_{H_+} \qquad (\alpha \in H_-, u \in H_+). \tag{4.6}$$

Proviamo ora una proprietà centrale dello spazio H_-, ovvero che H_- è munito di prodotto scalare ed è uno spazio di Hilbert, nella dimostrazione costruiremo tale prodotto scalare.

Teorema 4.1.3. *Lo spazio H_- è uno spazio di Hilbert*

dim.Consideriamo la forma quadratica

$$H_0 \times H_+ \ni \langle f, u\rangle \to b(f,u) = (f,u)_{H_0} \in \mathbb{C}, \tag{4.7}$$

ora tale forma è limitata rispetto alle due norme $||.||_{H_0}$ e $||.||_{H_+}$, infatti vale la stima $|b(f,u)| \leq ||f||_{H_0}||u||_{H_0} \leq ||f||_{H_0}||u||_{H_+}$.
Perciò è possibile utilizzare il *Teorema 3.0.1*, (nella sua forma più generale $E : B\times C \to \mathbb{C}$ dove $B \supseteq C$) sia sullo spazio di Hilbert H_+ che sullo spazio di Hilbert H_0 ottenendo:

$$b(f,u) = (f, Au)_{H_0} = (A^+ f, u)_{H_+}, \tag{4.8}$$

dove $A : H_+ \to H_0$, $A^+ : H_0 \to H_+$ sono operatori continui uno l'aggiunto dell'altro e dalla (4.7) segue che A è l'operatore di immersione $O : H_+ \to H_0$ e denotiamo $I = O^+$.
Riscriviamo dunque la (4.8) come:

$$\begin{aligned} &(f,u)_{H_0} = (f, Ou)_{H_0} = (If, u)_{H_+}, \qquad (f \in H_0, u \in H_+) \\ &I : H_0 \to H_+. \end{aligned} \tag{4.9}$$

Definiamo ora un prodotto in H_0 dato da:

$$(f,g)_{H_-} := (If, Ig)_{H_+} \qquad (f, g \in H_0). \tag{4.10}$$

Dalla disuguaglianza di Schwartz ottengo che

$$\frac{|(If,u)_{H_+}|}{||u||_{H_+}} \leq \frac{||If||_{H_+}||u||_{H_+}}{||u||_{H_+}} = ||If||_{H_+} \qquad \forall u \in H_+.$$

Da tale disuguaglianza segue dunque:

$$\sup_{u\in H_+}\left\{\frac{|(If,u)_{H_+}|}{||u||_{H_+}}\right\} = ||If||_{H_+}. \tag{4.11}$$

In accordo con (4.3), (4.9), (4.10) e (4.11) ottengo che $\forall f \in H_0$

$$\begin{aligned} ||f||_{H_-} &= \sup_{u\in H_+}\left\{\frac{|(f,u)_{H_0}|}{||u||_{H_+}}\right\} = \sup_{u\in H_+}\left\{\frac{|(If,u)_{H_+}|}{||u||_{H_+}}\right\} \\ &= ||If||_{H_+} = \sqrt{(f,f)_{H_-}} \end{aligned} \tag{4.12}$$

Essendo ora $||.||_{H_-}$ una norma in H_0 dall'uguaglianza appena provata $||f||_{H_-} = \sqrt{(f,f)_{H_-}}$ segue che la $(f,g)_{H_-}$, definita in (4.10), definisce una norma in H_0.

Essendo H_- il completamento di H_0 rispetto alla norma $||.||_{H_-}$, il prodotto (4.10) definisce un prodotto scalare in H_-, che risulta essere così uno spazio di Hilbert. ■
Dalla $||f||_{H_-} = ||If||_{H_+}$ segue subito che I è un'isometria tra lo spazio H_- e lo spazio H_+, definita in un sottospazio denso di H_-.
La chiusura per continuità di I è un operatore isometrico $\bar{I}$ tra tutto lo spazio H_- e lo spazio H_+, ovvero $\bar{I} : H_- \to H_+$.
Inoltre ho che vale la seguente proprietà per l'operatore isometrico $\bar{I}$:

$$(\alpha, u)_{H_0} = (\bar{I}\alpha, u)_{H_+} \qquad\qquad (\alpha \in H_-, u \in H_+). \tag{4.13}$$

Infatti essendo H_0 denso in H_- esiste un successione di funzioni $f_n \in H_0$ tali che $f_n \to \alpha$ per $n \to \infty$. dunque per la (4.6) ho la continuità del prodotto scalare (essendo limitato) e per la (4.9) ho:

$$(\alpha, u)_{H_0} = \lim_{n\to\infty}(f_n, u)_{H_0} = \lim_{n\to\infty}(\bar{I}f_n, u)_{H_+} = (\bar{I}\alpha, u)_{H_+}.$$

L'operatore I risulta dunque essere la restrizione di $\bar{I}$ su H_0, denotiamo tale restrizione con $I = \bar{I}|_{H_0}$.
In generale H_-, per come è stato costruito, è identificato come sottospazio del duale di H_+, ovvero $H_- \subseteq (H_+)'$.
Enunciamo, senza dimostrare, il seguente teorema che permette di dare una migliore identificazione di H_- che risulta essere proprio lo spazio duale di H_+.

Teorema 4.1.4. *Ho l'uguaglianza*

$$H_- = (H_+)',$$

tra lo spazio H_- è il duale H_+

dim.([2])■

Abbiamo dunque descritto il procedimento che si segue per costruire una *catena di Hilbert* partendo da un generico H_0 costruendo gli spazi di Hilbert H_+ ed H_-.
Questa trattazione è del tutto generale e non dipende dalla forma analitica dei prodotti scalari che si introducono in H_0 e in H_+, le uniche richieste che si fanno per poter costruire questo tipo di catene è che valga la stima (4.1) e che il sottospazio $H_+ \subseteq H_0$ sia denso in H_0.
Infine una volta che si conosce H_+ lo spazio H_- è automaticamente individuato dal duale di H_+, in H_- risultano poi definiti sia norma che prodotto scalare tramite la relazione (4.10) .
La teoria appena costruita prende il nome di *Teoria delle catene di Hilbert*, ed è subito evidente l'analogia che questa ha con la *Teoria delle distribuzioni temperate* infatti la costruzione delle due catene $S'(\mathbb{R}) \supseteq L^2(\mathbb{R}) \supseteq S(\mathbb{R})$ e $H_- \supseteq H_0 \supseteq H_+$ è praticamente identica, l'unica cruciale differenza è che gli spazi H_- e H_+ sono di Hilbert, mentre $S(\mathbb{R})$ e $S'(\mathbb{R})$ non sono spazi di Hilbert ma sono piu generalmente spazi vettoriali topologici.

Vista la sua generalità la *Teoria delle catene di Hilbert* ha molte applicazioni ed una delle più importanti è appunto il fatto che molti *teoremi di rappresentazioni delle forme quadratiche* si esprimono nel "linguaggio" delle catene di Hilbert. Il primo passo in questa direzione è quello di dimostrare un lemma che permetterà di associare alle catene di Hilbert un operatore autoaggiunto.

4.2 Lemma sulle catene di Hilbert

Consideriamo una generica catena di Hilbert $H_- \supseteq H_0 \supseteq H_+$, il nostro obbiettivo è ora cercare di dare una rappresentazione al prodotto scalare definito in H_+ in termini di un operatore autoaggiunto, ovvero vogliamo verificare se esiste un operatore autoaggiunto A con dominio $D(A)$ tale che $(v, u)_{H_+} = (v, Au)_{H_0}$ con $u \in D(A)$ e $v \in H_+$.
Prima di enunciare e dimostrare il lemma appena descritto dobbiamo dare una condizione necessaria e sufficiente affinchè un operatore sia autoaggiunto.

Teorema 4.2.1. *Le seguenti affermazioni sono equivalenti:*

1. *l'operatore limitato $A : H \to H$ è autoaggiunto*
2. *la forma quadratica $b_A(x, y) = (x, Ay)_H$ generata dall'operatore A è simmetrica*
3. *la $b_A(x, x) = (x, Ax)_H$ assume solo valori reali.*

dim. Per prima cosa proviamo l'equivalenza di 1 e 2. L'operatore è limitato dunque e autoaggiunto se l'operatore è uguale al suo aggiunto $A = A^+$, quindi vale la relazione

$$b_A(x, y) = (x, Ay) = (Ax, y) = \overline{(Ay, x)} = \overline{b_A(y, x)} \tag{4.14}$$

per ogni $x, y \in H$, ovviamente questa relazione prova anche l'opposto ovvero che se la forma è simmetrica allora l'operatore è autoaggiunto.
Proviamo ora l'equivalenza di 2 e 3, se b_A è simmetrica allora dalla (4.14) risulta che la $b_A(x, x)$ è reale. Proviamo il viceversa, sia $b_A(x, x)$ reale, proviamo che la forma è simmetrica. Per far ciò ricordiamo l'identità di polarizzazione per le forme quadratiche ([1]), e notando che $ib_A(y+ix, y+ix) = ib_A(i(-iy+x), i(-iy+x)) = ib_A(x-iy, x-iy)$

$$\begin{aligned} 4b_A(y, x) &= b_A(y + x, y + x) - b_A(y - x, y - x) + ib_A(y + ix, y + ix) - ib_A(y - ix, y - ix) \\ &= b_A(x + y, x + y) - b_A(x - y, x - y) - ib_A(x + iy, x + iy) + ib_A(x - iy, x - iy) \\ &= \overline{4b_A(x, y)} \end{aligned}$$

■

Possiamo ora enunciare e dimostrare il lemma che, data una *catena di Hilbert* $H_- \supseteq H_0 \supseteq H_+$, associa al prodotto scalare $(.,.)_{H_+}$ un operatore autoaggiunto.
Ricordando la struttura della catena $H_- \supseteq H_0 \supseteq H_+$ e la forma dell'operatore isometrico $\bar{I} : H_- \to H_+$ abbiamo:

Lemma 4.2.2. *Assumiamo* $D(A) = \{u \in H_+ | \bar{I}^{-1}u \in H_0\}$. *In* H_0 *consideriamo l'operatore* $\bar{I}^{-1}$ *ristretto a* $D(A)$*, ovvero* $A = \bar{I}^{-1}|_{D(A)}$*. Allora* A *è autoaggiunto e vale la relazione*

$$(v, u)_{H_+} = (v, Au)_{H_0} \qquad (u \in D(A), v \in H_+). \tag{4.15}$$

dim. H_0 è denso in H_-, lo spazio $D(A)$ è denso in H_+ e di conseguenza risulta essere denso in H_0.
Inoltre dalla (4.13),$(\alpha, u)_{H_0} = (\bar{I}\alpha, u)_{H_+}(\alpha \in H_-, u \in H_+)$, quindi per ovvie proprieta del prodotto scalare $(u, \alpha)_{H_0} = (u, \bar{I}\alpha)_{H_+}$ segue:

$$(v, u)_{H_+} = (v, \bar{I}^{-1}u)_{H_0} \qquad (u, v \in H_+). \tag{4.16}$$

Da (4.16) e dalla definizione di A segue che $(v, u)_{H_+} = (v, Au)_{H_0}(u \in D(A), v \in H_+)$ dunque si ritrova la formula scritta in (4.15).
Manca da dimostrare l'autoaggiuntezza di A, imponendo ora $v = u$, otteniamo che $(u, Au)_{H_0} = (u, u)_{H_+} \geq 0$ da cui segue subito che la forma associata all'operatore assume solo valori reali, inoltre è evidente che l'operatore è limitato, da questo segue che l'operatore è autoaggiunto. ■

4.3 Completezza di uno spazio rispetto a due norme

Prima di introdurre i *teoremi di rappresentazione* delle forme quadratiche bisogna formalizzare con precisione il concetto di *completezza* di uno spazio lineare rispetto ad una norma e mettere in evidenza la relazione che c'è tra due spazi ottenuti completando uno stesso spazio lineare rispetto a due norme diverse.
Nella rappresentazione di forme quadratiche si toglierà l'ipotesi stringente della limitatezza della forma, ma si chiederà che la forma sia chiusa.
Introdurremo il concetto di forma quadratica chiusa nella prossima sezione, prima di arrivare a questa definizione però bisogna analizzare la relazione che intercorre tra due spazi creati partendo da uno stesso spazio lineare completandolo però rispetto a due norme differenti. L'obbiettivo di questa sezione è proprio vedere quale sia il rapporto di inclusione tra questi due spazi.

Sia L uno spazio lineare di funzioni f munito della norma $||f||_E \geq 0$:

Definizione 4.2. Il completamento E di L è dato dalle classi di equivalenza f_E delle successioni di Cauchy di elementi di L, $(f_n)_{n=1}^{\infty}$ $(f_n \in L)$. La relazione di equivalenza $\sim$, attraverso la quale è definita la classe di equivalenza, è la seguente $(f_n)_{n=1}^{\infty} \sim (g_n)_{n=1}^{\infty}$ se e solo se $||f_n - g_n||_E \to 0$ per $n \to \infty$.

E risulta essere uno spazio di Banach e L è immerso in E tramite l'identificazione di $f \in L$ con $(f, f, ...) \in E$.
Prendiamo ora uno spazio lineare di funzioni L, munito di due diverse norme $||.||_{E_1}$ e

$||.||_{E_2}$. Sia E_1 il completamento di L rispetto a $||.||_{E_1}$ con relazione di equivalenza $\sim_{E_1}$ e E_2 il completamento di L rispetto a $||.||_{E_2}$ con relazione di equivalenza $\sim_{E_2}$.
Assumiamo che le due norme siano comparabili nel senso che

$$||f||_{E_1} \leq ||f||_{E_2} \qquad (\forall f \in L). \tag{4.17}$$

Un'argomentazione inaccurata potrebbe portare a concludere che in virtù della (4.17), se una successione è di Cauchy nella norma $||.||_{E_2}$ allora essa è di Cauchy nella norma $||.||_{E_1}$, dunque $E_2 \subseteq E_1$ e la relazione (4.17) diviene $||f||_{E_1} \leq ||f||_{E_2}$ $(\forall f \in E_2)$. Quanto detto è però falso, infatti in generale lo spazio E_2 non è immerso in E_1; analizziamo più precisamente la relazione che lega i due spazi E_1 e E_2.
Per prima cosa notiamo che E_1 ed E_2 hanno la struttura algebrica di *anelli* ([9]) rispetto alle operazioni di somma e prodotto di classi di equivalenza. Dati $f, g \in L$, la classe $f_E + g_E$ è data dalla classe di equivalenza della funzione $f + g \in L$ ed il prodotto $f_E \cdot g_E$ dalla classe di equivalenza di $f \cdot g \in L$.
Sia $(f_n)_{n=1}^{\infty}$ $(f_n \in L)$ di Cauchy rispetto alla norma $||.||_{E_2}$, per la (4.17) essa è di Cauchy anche nella norma $||.||_{E_2}$. Dunque $(f_n)_{n=1}^{\infty} \in f_{E_2}ef_{E_2} \in E_2$ inoltre $(f_n)_{n=1}^{\infty} \in f_{E_1}$ e $f_{E_1} \in E_1$, associamo dunque in questo modo il vettore f_{E_2} al vettore f_{E_1}.
Definiamo questa mappa Q tramite $E_2 \ni f_{E_2} \to Qf_{E_2} = f_{E_1} \in E_1$. Tale mappa ora risulta essere ben definita nel senso che non dipende dal rappresentante che scelgo nella classe di equivalenza f_{E_2}. infatti preso $(g_n)_{n=1}^{\infty} \in f_{E_2}$ ho che $(f_n)_{n=1}^{\infty} \sim_{E_2} (g_n)_{n=1}^{\infty}$, allora dalla (3.28) segue che $||f_n - g_n||_{E_1} \leq ||f_n - g_n||_{E_2}$ quindi, ricordando la *Definizione 4.2*, $(f_n)_{n=1}^{\infty} \sim_{E_1} (g_n)_{n=1}^{\infty}$. Dunque scegliendo un qualsiasi rappresentante in f_{E_2} questo viene mandato tramite Q sempre nella stessa classe di equivalenza f_{E_1}.
Dalla costruzione di Q segue subito la sua linearità rispetto alle operazioni degli anelli E_1 ed E_2, cioè $Q(f_{E_2} \cdot g_{E_2}) = Q(f_{E_2}) \cdot Q(g_{E_2})$ e $Q(f_{E_2} + g_{E_2}) = Q(f_{E_2}) + Q(g_{E_2})$, questo fa sì che Q sia un *omomorfismo di anelli* ([9]).
Ora la costruzione di Q è fondamentale perché in linea di principio E_1 ed E_2 sono due spazi totalmente "scollegati", qundi per metterli in relazione c'è bisogno di una mappa che sia omeomorfa $Q : E_2 \to E_1$ così da porre in relazione l'immagine $Q(E_2)$ con lo spazio E_1.
Analizziamo qual è la struttura dell'immagine di questa mappa, per far ciò ricorreremo al *Teorema fondamentale di omomorfismo di anelli*, che non dimostreremo.
Consideriamo il sottospazio di E_2 definito da:

$$KerQ = \{f \in E_2 | Qf = 0\} \subseteq E_2. \tag{4.18}$$

Introduciamo lo spazio quoziente di E_2 rispetto a $KerQ$, che in questo caso ha una forma molto semplice che è la seguente:

$$E_2/KerQ = \{f + q | f \in E_2, q \in KerQ\}. \tag{4.19}$$

Siamo pronti ora per vedere qual è la forma generale dello spazio $Q(E_2)$ costruendo uno spazio a lui isomorfo dunque che lo identifica univocamente. Enunciamo ora il *Teorema fondamentale di omomorfismo di anelli*

Teorema 4.3.1. *Siano E_1 ed E_2 anelli e $Q : E_2 \to E_1$ un omomorfismo di anelli. Allora l'immagine $Q(E_2)$ è un sottoanello di E_1 e gli anelli $E_2/KerQ$ e $Q(E_2)$ sono isomorfi, ovvero $E_2/KerQ \cong Q(E_2)$*

dim.([9])■

Dunque quello che ingenuamente si pensava, ovvero che $E_2 \subseteq E_1$, è generalmente falso; la relazione di inclusione tra questi spazi è, in virtù del *Teorema 4.3.1*, la seguente:

$$Q(E_2) \cong E_2/KerQ \subseteq E_1 \tag{4.20}$$

Dunque solamente se $KerQ = \{0\}$ abbiamo $E_2/KerQ = E_2$ da cui segue $E_2 \subseteq E_1$ e $||f||_{E_1} \leq ||f||_{E_2}$ $(\forall f \in E_2)$.
Ora è evidente dalla (3.29) che $KerQ = \{f \in E_2 | Qf = 0\} = \{0\}$ se e solo se ogni successione di funzioni $(f_n)_{n=1}^{\infty}$ $(f_n \in L)$ di Cauchy nella norma $||.||_{E_2}$ e che tende a zero nella norma $||.||_{E_1}$ allora tende a zero nella norma $||.||_{E_2}$.
Riassumiamo dunque quanto costruito nel seguente teorema:

Teorema 4.3.2. *Sia L uno spazio lineare di funzioni munito di due norme $||.||_{E_1}$ ed $||.||_{E_1}$, in relazione tra di loro tramite:*

$$||f||_{E_1} \leq ||f||_{E_2} \qquad\qquad (\forall f \in L).$$

Siano E_1 il completamento di L rispetto alla norma $||.||_{E_1}$ e E_2 il completamento di L rispetto alla norma $||.||_{E_2}$. Allora vale

$$E_2 \subseteq E_1 \qquad\qquad ||f||_{E_1} \leq ||f||_{E_2} \qquad\qquad (\forall f \in E_2) \tag{4.21}$$

se e solo se ogni successione di funzioni $(f_n)_{n=1}^{\infty}$ $(f_n \in L)$ di Cauchy nella norma $||.||_{E_2}$ e che tende a zero nella norma $||.||_{E_1}$ allora tende a zero nella norma $||.||_{E_2}$.

4.4 Teoremi di rappresentazione

In questa sezione presenteremo i teoremi di rappresentazione che ci permetteranno dunque di mostrare quando una forma quadratica sia la forma di un operatore autoaggiunto secondo la *definizione 3.8*. Il *teorema 4.4.4* sarà centrale nella dimostrazione del *teorema KLMN* in quanto ci permetterà di concludere che la forma quadratica associata all'hamiltoniana è la forma di un operatore autoaggiunto.
Introduciamo il concetto di *pre-catena di Hilbert*, questo è fortemente correlato sia al concetto di *catena di Hilbert* sia a delle particolari *forme quadratiche*. Infatti, vedremo che la presenza di una *pre-catena di Hilbert* è equivalente alla determinazione di una *forma quadratica* ed inoltre data una *pre-catena di Hilbert* è sempre possibili costruire una *catena di Hilbert*.
Dunque metteremo in relazione le *catena di Hilbert* con delle particolari *forme quadratiche* ed infine grazie al *Lemma 4.2.2* dimostreremo facilmente due teoremi di rappresentazione, riuscendo quindi ad associare a queste *forme quadratiche* degli *operatori*

autoaggiunti.
La stretta relazione che intercorre tra la teoria delle *forme quadratiche* e le *catene di Hilbert* è fondamentalmente basata su queste rappresentazioni.

Sia H_0 uno spazio di Hilbert con prodotto scalare $(.,.)_{H_0}$ e sia L un sottospazio di H_0 denso in H_0 con prodotto scalare $(f,g)_{L_+}$ $(f,g \in L)$ tale che $||f||_{H_0} \leq ||f||_{L_+}$ con $f \in L$, dove la norma $||f||_{L_+}$ è la norma generata dal prodotto scalare in L ovvero $||f||_{L_+} = \sqrt{(f,f)_{L_+}}$.

Definizione 4.3. la relazione di inclusione

$$H_0 \supseteq L \tag{4.22}$$

dove lo spazio L è denso in H_0 e munito di un prodotto scalare è detta *pre-catena di Hilbert.*

Notiamo che in questa definizione non si richiede che L sia uno spazio di Hilbert, dunque non è necessariamente uno spazio completo rispetto alla norma $||.||_{L_+}$.
Denotiamo con L_+ il completamento di L rispetto alla norma $||.||_{L_+}$. Ora siamo proprio nel caso già trattato nella sezione *4.3 Completezza di uno spazio rispetto a due norme* dove questa volta $E_1 = H_0$ e $E_2 = L_+$. Sia $Q : L_+ \to H_0$ la mappa già introdotta.
Abbiamo che, in accordo con la (4.20) e con il *Teorema 4.1.4*, per una data *pre-catena di Hilbert* è possibile costruire la catena di Hilbert

$$(L_+/KerQ)' = H_- \supseteq H_0 \supseteq H_+ = L_+/KerQ. \tag{4.23}$$

Dove con $(L_+/KerQ)'$ si intende il duale di $L_+/KerQ$.

Definizione 4.4. La *pre-catena di Hilbert* (4.22) è *chiusa* se L è completo rispetto ad $||.||_{L_+}$, e *chiudibile* se $KerQ = 0$.

Ora è ovvio che se una *pre-catena di Hilbert* è chiusa allora essa è anche chiudibile. Dunque in virtù del *Teorema 4.3.2* abbiamo il seguente lemma:

Lemma 4.4.1. *La pre-catena di Hilbert (4.22) è chiudibile se e solo se ogni successione di funzioni* $(f_n)_{n=1}^{\infty}$ $(f_n \in L)$ *di Cauchy nella norma* $||.||_{L_+}$ *tendente a zero nella norma* $||.||_{H_0}$ *tende a zero nella norma* $||.||_{L_+}$.

Dunque abbiamo che ogni *pre-catena di Hilbert* chiusa può essere estesa ad una *catena di Hilbert* nel seguente modo:

$$H_- \supseteq H_0 \supseteq H_+ = L_+. \tag{4.24}$$

Ricordiamo ora la definizione (3.7) di *forme quadratiche*, in particolare ricordiamo che una forma quadratica a con dominio $D(a) \in H_0$ è detta *positiva* se esiste un $\alpha \in \mathbb{R}$ e $\alpha > 0$ tale che :

$$a(f,f) \geq \alpha ||f||^2_{H_0}.$$

Vediamo subito che nelle forme positive si ha sempre che $a(f,f)$ è reale e maggiore di zero nel caso in cui $f \neq 0$.
Assumiamo ora $\alpha = 1$, allora in queste condizioni data una *forma quadratica* resta naturalmente associata ad essa una *pre-catena di Hilbert* del tipo (4.22).
Infatti $L = D(a)$ è sottoinsieme denso di H_0, il prodotto scalare $(.,.)_{L_+}$ è dato dalla forma $(f,g)_{L_+} = a(f,g)$ $(f,g \in L)$, inoltre se $\alpha = 1$ allora la forma quadratica definisce una norma $||.||_{L_+} = \sqrt{a(.,.)}$ denotata con $a[.]^{1/2}$ che soddisfa la stima $||f||_{H_0} \leq a[f]^{1/2}$ con $f \in D(a)$.
Dunque grazie a questa identificazione tra forme e pre-catene, è possibile definire il concetto di forma chiusa:

Definizione 4.5. Una *forma quadratica* positiva a è detta chiusa/chiudibile se la corrispondente *pre-catena di Hilbert* è chiusa/chiudibile. Nel caso in cui la a sia chiudibile allora la chiusura $\tilde{a}$ di a è la forma identificata dalla $\tilde{a}(f,g) = (f,g)_{L_+}$ dove $f,g \in D(\tilde{a}) = L_+$, dove L e $(.,.)_{L_+}$ sono costruiti in accordo con la forma a.

Per calcolare La chiusura $\tilde{a}(f,g)$ per $f,q \in D(\tilde{a}) \subseteq H_0$ costruiamo due successioni $(f_n)_{n=1}^{\infty}, (g_n)_{n=1}^{\infty} \in D(a)$ di Cauchy nella norma $a[.]^{1/2}$ e convergenti a $f,g \in H_0$, allora $\tilde{a}(f,g) = \lim_{m,nto\infty} a(f_n, g_m)$.

Ora, in maniera analoga a quanto fatto per le *pre-catena di Hilbert*, enunciamo il lemma che da la condizioni di chiudibilità di una *forma quadratica*:

Lemma 4.4.2. *Una forma quadratica a con dominio $D(a)$ e vertice $\alpha = 1$ è chiudibile se e solo se ogni successione di funzioni $(f_n)_{n=1}^{\infty}$ $(f_n \in D(a))$ di Cauchy nella norma $a[.]^{1/2}$ tendente a zero nella norma $||.||_{H_0}$ tende a zero nella norma $a[.]^{1/2}$.*

Abbiamo così visto come una *forma quadratica chiusa a* di dominio $D(a)$ generi una *Pre-catena di Hilbert chiusa* che crea una *catena di Hilbert* del tipo:

$$(D(a))' \supseteq H_0 \supseteq D(a).$$

A questa *catena di Hilbert* è possibile applicare il *Lemma 4.2.2* e dunque arrivare finalmente ad enunciare il *primo teorema di rappresentazione delle forme quadratiche.*

Teorema 4.4.3. *Sia a una forma quadratica chiusa positiva con vertice $\alpha = 1$ e dominio $D(a)$. Allora esiste un operatore autoaggiunto A con dominio $D(A)$ che agisce nello spazio H_0 tale che:*

$$a(g,f) = (g, Af)_{H_0} \qquad (f \in D(A) \subseteq D(a), g \in D(a)). \tag{4.25}$$

Il dominio $D(A)$ è denso in $D(a)$ rispetto alla norma $a[.]^{1/2}$.

dim. Utilizzando la procedura sopra decritta, passo dalla forma a alla *Pre-catena di Hilbert chiusa* $H_0 \supseteq D(a)$.

Costruisco poi la *catena di Hilbert* $(D(a))' \supseteq H_0 \supseteq D(a)$ alla quale applico il *Lemma 4.2.2.* ■

Ovviamente il *Teorema 4.4.7* vale anche per le forme chiudibili, infatti basta passare da a con dominio $D(a)$ alla sua chiusura $\tilde{a}$ con dominio $D(\tilde{a})$ e formulare la (4.25) in termini della forma chiusa, ovvero $\tilde{a}(f,g) = (Af,g)_{H_0}$ $(f \in D(A) \subseteq D(\tilde{a}), g \in D(\tilde{a}))$.
Dunque per applicare il *Teorema 4.4.3* basta verificare che per la forma quadratica in esame valga il *Lemma 4.4.2* .
Abbiamo enunciato il *Teorema 4.4.3* per una classe molto ristretta di forme quadratiche, cerchiamo ora di ampliare la famiglia delle forme per le quali vale una rappresentazione del tipo (4.25).
Consideriamo una forma con vertice $\alpha > 0$ cioè $a(f,f) \geq \alpha ||f||^2_{H_0}$, ma allora $\frac{1}{\alpha}a(f,f) \geq ||f||^2_{H_0}$, dunque posso applicare il *Teorema 4.4.3* alla forma $\frac{1}{\alpha}a$.
Però notiamo che le due norme $a[.]^{1/2}$ e $\frac{1}{\alpha}a[.]^{1/2}$ differiscono per una costante moltiplicativa, quindi sono due norme equivalenti ([10]). Di conseguenza le due norme sono equivalenti da un punto di vista della convergenza delle successioni, dunque producono la stessa *catena di Hilbert*, ovvero

$$(D(\frac{1}{\alpha}a))' = D(a)' \supseteq H_0 \supseteq D(a) = D(\frac{1}{\alpha}a). \tag{4.26}$$

Dunque il *Teorema 4.4.3* vale anche per forme quadratiche con vertice $\alpha > 0$.

Generalizziamo ora il *Teorema 4.4.3* ad una qualsiasi forma a con dominio $D(a)$ semi-limitata chiusa con vertice $\alpha \in \mathbb{R}$, ovvero una forma per cui vale $a(f,f) \geq \alpha ||f||^2_{H_0}$ con $f \in D(a)$.
Ad una forma semi-limitata a è sempre possibile associare una forma postiva a_p con vertice $\alpha = 1$ tramite la seguente relazione:

$$a_p(f,g) = a(f,g) + (1-\alpha)(f,g)_{H_0} \qquad (f,g \in D(a_p) = D(a)). \tag{4.27}$$

Infatti è immediato vedere che

$$\begin{aligned} a_p(f,f) &= a(f,f) + (1-\alpha)(f,f)_{H_0} \\ &\geq \alpha ||f||^2_{H_0} + (1-\alpha)||f||^2_{H_0} = ||f||^2_{H_0}. \end{aligned}$$

Tutte le definizioni già date per le forme positive si trasportano alle forme semi-limitate a, le definizioni su a sono vere se e solo se sono vere per a_p.
Enunciamo dunque il seguente importante teorema che permette di rappresentare tramite operatori autoaggiunti forme quadratiche semi-limitate.

Teorema 4.4.4 (**Rappresentazione di forme quadratiche semi-limitate**). *Sia a una forma quadratica chiusa con vertice $\alpha \in \mathbb{R}$ e dominio $D(a)$ contenuto in H_0. Allora esiste un operatore autoaggiunto A con dominio $D(A)$ che agisce nello spazio H_0 tale che:*

$$a(g,f) = (g,Af)_{H_0} \qquad (f \in D(A) \subseteq D(a), g \in D(a)). \tag{4.28}$$

Il dominio $D(A)$ è denso in $D(a)$ rispetto alla norma $a_p[.]^{1/2}$.

dim. La relazione (4.28) vale per la forma positiva a_p in virtù del *Teorema 4.4.3.*
Ora chiamiamo A_p l'operatore autoaggiunto associato alla forma a_p, dalla (4.27) segue che otteniamo la (4.28) per la forma a tramite un operatore $A = A_p - (1 - \alpha)\mathbb{1}$.
L'autoaggiuntezza di tale operatore è immediata essendo lui differenza di due operatori autoaggiunti A_p e l'identità $\mathbb{1}$. ■
Ovviamente come nel caso delle forme con vertice $\alpha > 0$ il *Teorema 4.4.4* vale anche per le forme chiudibili, basta passare alla chiusura della forma.

Abbiamo dunque enunciato e dimostrato un teorema di rappresentazione di forme quadratiche ben più generale del *Teorema 3.0.1*, infatti si perde completamente l'ipotesi, molto stringente, di limitatezza della forma quadratica.
Inoltre tramite il *Teorema 4.4.4* si riesce ad associare ad una forma un operatore autoaggiunto, dunque alla forma è possibile associare direttamente un'osservabile del sistema quantistico.

Riassumiamo ora con il seguente diagramma qual è stata la strada che abbiamo seguito per "strutturare" e dimostrare questo teorema di rappresentazione.

$$
\begin{gathered}
Forme\ Quadratiche \\
\Downarrow \\
Pre-Catene\ di\ Hilbert \\
\Downarrow \\
Catene\ di\ Hilbert \\
\Downarrow \\
Operatori\ autoaggiunti
\end{gathered}
$$

Nel diagramma la freccia sta a significare che ad esempio ad una forma quadratica è possibile associare una pre-catena diHilbert e così via, concludendo così che è possibile associare ad una forma quadratica (semi-limitata e chiusa) un operatore autoaggiunto.

4.5 Dimostrazione del teorema KLMN

Dimostriamo ora il *teorema KLMN*; la questione centrale è riuscire a provare che la forma dell'Hamiltoniana sia semi-limitata e chiusa. La parte più delicata della dimostrazione è sicuramente provare che la forma hamiltoniana sia chiusa. Quello che faremo è associare all'operatore autoaggiunto A un forma quadratica a positiva e chiusa , dimostreremo poi che la norma generata dalla forma a e quella generata dalla forma $a + b$ sono equivalenti

([10]), dunque equivalenti da un punto di vista della convergenza di successioni, questo ci farà concludere che la forma $a + b$ è chiusa,
Non essendoci ora la necessità di distinguere prodotti scalari e norme differenti, nello spazio di Hilbert H si denoterà il prodotto scalare con $\langle . | . \rangle$ e la norma con $||.||$.
Prima di dimostrarlo ricordiamo l'enunciato del teorema:

Teorema 4.5.1. ***(KLMN)*** *Sia H uno spazio di Hilbert e A un operatore autoaggiunto positivo con dominio $D(A) \subseteq H$, $A : D(A) \to H$, sia $a(f,g) = \langle f|Ag \rangle$ la forma associata all'operatore A, sia $D(a)$ il dominio di tale forma, sia b una forma simmetrica con dominio $D(b)$ tale che $H \supseteq D(b) \supseteq D(a)$. Se per qualche $p \in [0,1)$ e $q \in \mathbb{R}$ vale*

$$|b(f,f)| \leq p \langle f|Af \rangle + q||f||^2 \tag{4.29}$$

per ogni $f \in D(a)$, allora la forma quadratica $(a+b)(f,g) = \langle f|Ag \rangle + b(f,g)$ definita in $D(a) \cap D(b) = D(a)$ è la forma di un operatore autoaggiunto

dim. Per prima cosa associamo all'operatore autoaggiunto A una forma una forma $a(f,g)$ con dominio $D(A) = D(a)$.
la forma è sicuramente semi-limitata inferiormente essendo l'operatore positivo, infatti $a(f,f) = \langle f|Af \rangle \geq 0$.
Dimostriamo ora la chiusura della forma a. Prendiamo una successione di Cauchy $(f_n)_n^\infty$ con $f_n \in H$ nella norma $a[.]^{1/2}$ che converge a zero nella norma di H ovvero $\lim_{n\to\infty} ||f_n|| = 0$. Questo significa che $\lim_{n\to\infty} f_n = f$ dove f è l'elemento nullo dello spazio di Hilbert H, questo significa che per la linearità del prodotto scalare la successione di funzioni converge a zero nella norma $a[.]^{1/2}$. Infatti abbiamo che ([12]) $\lim_{n\to\infty} a(f_n, f_n) = \lim_{m,n\to\infty} \langle f_m|Af_n \rangle$ ora per la continuità del prodotto scalare abbiamo che $\lim_{m,n\to\infty} \langle f_m|Af_n \rangle = \langle \lim_{m\to\infty} f_m| \lim_{n\to\infty} Af_n \rangle = \langle f| \lim_{n\to\infty} Af_n \rangle$ ed essendo f l'elemento nullo di H segue che $\lim_{n\to\infty} a(f_n, f_n) = \langle f| \lim_{n\to\infty} Af_n \rangle = 0$.
Da questo grazie al *lemma 4.4.2* segue che $a(f,g) = \langle f|Ag \rangle$ è una forma con dominio $D(a)$ positiva e chiusa.
Per una dimostrazione più rigorosa di quanto detto si rimanda a ([12]), dove si mostra che dato A operatore simmetrico densamente definito con dominio $D(A)$ la forma definita da $a(f,g) = \langle f|Ag \rangle$ con dominio $D(a)$ è chiusa.
Ora consideriamo la forma $(a+b)(f,f) = \langle f|Af \rangle + b(f,f)$, si vede subito che dalla (4.29) che $-q||f||^2 \leq -|b(f,f)| + pa(f,f)$, in generale $-|b(f,f)| \leq b(f,f)$ ricordando che $p \in [0,1)$ ho che $\exists \alpha \leq -q$ tale che:

$$\alpha||f||^2 \leq -q||f||^2 \leq b(f,f) + pa(f,f) \tag{4.30}$$

Dunque la forma è semi-limitata con vertice $\alpha \in \mathbb{R}$.
Ricordando la definizione di forma positiva associata ad una forma con vertice α, ottengo:

$$(a+b)_p(f,f) = a(f,f) + b(f,f) + (1-\alpha)||f||^2 \tag{4.31}$$

L'idea ora è di dimostrare che la norma $(a[.])^{1/2}$ e la norma $(a[.]+b[.])^{1/2}$ sono equivalenti. Proviamo dunque che esistono due costanti positive c e C tali che

$$ca(f,f) \leq (a+b)_p(f,f) \leq Ca(f,f) \qquad \forall f \in D(A). \tag{4.32}$$

Ricordiamo che $p \in [0,1)$ e $\alpha \leq -q \Rightarrow -\alpha - q \geq 0$, ottengo:

$$(1-p)a(f,f) \leq (1-p)a(f,f) + (1-\alpha-q)||f||^2$$

Ora dalla (4.29) abbiamo $-pa(f,f) - q||f||^2 \leq -|b(f,f)| \leq b(f,f)$, che porta alla seguente stima

$$\begin{aligned}(1-p)a(f,f) + (1-\alpha-q)||f||^2 &= a(f,f) - pa(f,f) - q||f||^2 + (1-\alpha)||f||^2 \\ &\leq a(f,f) + b(f,f) + (1-\alpha)||f||^2\end{aligned}$$

Dunque abbiamo concluso la prima parte della stima (4.32)

$$(1-p)a(f,f) \leq (a+b)_p(f,f) \tag{4.33}$$

Cerchiamo ora di completare la dimostrazione maggiorando la norma associata alla forma $(a+b)_p$ con la norma della forma a.
Dalla (4.29) abbiamo che $b(f,f) \leq |b(f,f)| \leq pa(f,f) + q||f||^2$, segue

$$a(f,f) + b(f,f) + (1-\alpha)||f||^2 \leq a(f,f) + pa(f,f) + (1-\alpha+q)||f||^2. \tag{4.34}$$

Ora essendo $a(f,f)$ positiva esiste un $\epsilon \in (0,1)$ tale che $a(f,f) \geq \epsilon||f||^2$.
Ottengo dunque la seguente stima

$$(1+p)a(f,f) + (1-\alpha+q)||f||^2 \leq (1+p+\frac{1-\alpha+q}{\epsilon})a(f,f)$$

da cui segue immediatamente dalla (4.34) la stima superiore della (4.32).

$$a(f,f) + b(f,f) + (1-\alpha)||f||^2 \leq (1+p+\frac{1-\alpha+q}{\epsilon})a(f,f). \tag{4.35}$$

Segue quindi l'equivalenza delle norme $(a[.])^{1/2}$ e $(a+b)_p^{1/2}$ avendo provato che vale la stima:

$$(1-p)a(f,f) \leq (a+b)_p(f,f) \leq (1+p+\frac{1-\alpha+q}{\epsilon})a(f,f). \tag{4.36}$$

Ora le due norme $a[.]^{1/2}$ e $(a+b[.])^{1/2}$ sono equivalenti il che significa che creano la stessa topologia sullo spazio $D(A)$.
Questo significa che una successione $(f_n)_{n=1}^{\infty}$ è di Cauchy in $a[.]^{1/2}$ se e solo se è di Cauchy in $(a+b[.])^{1/2}$ e una successione $(f_n)_{n=1}^{\infty}$ converge ad f in $a[.]^{1/2}$ se e solo se converge ad f in $(a+b[.])^{1/2}$.
Ora la forma a è chiusa dunque il *Lemma 3.2.6* vale per la norma $a[.]^{1/2}$ di conseguenza

esso vale per la norma $(a+b[.])^{1/2}$, dunque la forma $a+b$ è chiusa.
Abbiamo dunque dimostrato che la forma $(a+b)(f,f) = \langle f|Af\rangle + b(f,f)$ è semi-limitata e chiusa dunque grazie al *Teorema 4.4.4* esiste un operatore autoaggiunto H con dominio $D(a)$ tale che

$$(a+b)(g,f) = \langle g|Hf\rangle \,. \tag{4.37}$$

Dunque la forma $(a+b)$ è la forma di un operatore autoaggiunto ■

Abbiamo dunque dimostrato il *teorema KLMN* che permette, in ultima analisi, di associare a forme quadratiche Hamiltoniane di osservabili quantistiche.
Come si era detto nel *Capitolo 3* spesso in problemi di fisica ci si torva a lavorare con osservabili che sono forme quadratiche e non operatori autoaggiunti, qundi in linea di principio due oggetti matematici completamente differenti. Ora però grazie al *Teorema KLMN* se si riesce a dimostrare la stima (4.29) allora ad essa resta associato un operatore autoaggiunto secondo la relazione (4.28), dunque si riesce a definire l'Hamiltoniana tramite una forma quadratica.
Un esempio di quanto detto è la forma quadratica data dall'Hamiltoniana $H = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$, questa sicuramente è una forma quadratica, ma non è immediato associare ad essa un operatore autoaggiunto, anzi in una prima analisi questa identificazione potrebbe risultare impossibile in quanto alla $\delta(x)$ non è possibile associare alcun operatore.
Vedremo però (grazie al *Teorema KLMN*) che la forma $H = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$ definita da:

$$H(f,g) = \int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)}(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2g(x)}{dx^2} + \delta(x)g(x))dx,$$

nel dominio $D(a)$, dominio della forma associata all'estensione autoaggiunta del Laplaciano, risulta essere la forma di un operatore autoaggiunto.

Capitolo 5

Analisi del potenziale a Delta di Dirac e commenti

5.1 Autoaggiuntezza di $H = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$

Analizzimo ora se le ipotesi del *Teorema KLMN* sono verificate nel caso dell'operatore $H = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta)$. Per semplicità adimensionalizziamo la H e scriviamola nella forma $H = -\frac{d^2}{dx^2} + \delta$.
Per prima cosa dimostriamo che l'operatore $-\frac{d^2}{dx^2}$ è positivo ed analizziamo la sua autoaggiuntezza, questo avrà il ruolo dell'operatore denotato con A nell'enunciato del *Teorema KLMN*.
Lavoriamo nello spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R})$; l'operatore avrà un dominio $D(-\frac{d^2}{dx^2})$ e sarà definito da $-\frac{d^2}{dx^2} : D(-\frac{d^2}{dx^2}) \to L^2(\mathbb{R})$, $\psi \to -\frac{d^2\psi}{dx^2}$.
Per prima cosa l'operatore deve essere simmetrico, se non lo fosse l'operatore ad essa associato non sarebbe autoaggiunto, quindi ho che le funzioni del dominio devono essere tali da poter eseguire la seguente integrazione per parti:

$$\begin{aligned}
\langle f| - \frac{d^2 g}{dx}\rangle &= -\int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)}\frac{d^2 g(x)}{dx^2}dx \\
&= \int_{\mathbb{R}} \overline{f'(x)}g'dx \\
&= -\int_{\mathbb{R}} \overline{\frac{d^2 f(x)}{dx^2}}g(x)dx = \langle -\frac{d^2 f}{dx}|g\rangle
\end{aligned}$$

Quindi in particolare il dominio conterrà funzioni continue a supporto compatto o più in generale se il dominio non è limitato funzioni continue tali che $\lim_{x\to\pm\infty} f(x) = 0$.
Inoltre come già visto nella sezione *3.1 Enunciato del Teorema KLMN*, l'operatore

Laplaciano è positivo, infatti:

$$\begin{aligned}\langle f| - \frac{d^2 f}{dx}\rangle &= -\int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)}' f(x)' dx = ||f(x)'||^2_{L^2(\mathbb{R})} \geq 0.\end{aligned} \tag{5.1}$$

Ora non ci addentreremo nelle questioni dell'autoaggiuntezza dell'operatore $-\frac{d^2}{dx^2}$, ma ci limiteremo a prendere la sua estensione autoaggiunta (vedi sezione *3.1 Enunciato del Teorema KLMN*) con dominio $D(H) \supseteq D(-\frac{d^2}{dx^2})$.
Dunque abbiamo provato che l'operatore Laplaciano verifica tutte le ipotesi dell'operatore A nell'enunciato del *Teorema KLMN*. Ora consideriamo la forma associata a questo operatore $a(f,g) = \langle f| - \frac{d^2 g}{dx}\rangle$, tale forma ha un dominio $D(a)$ più ampio rispetto al dominio dell'estensione autoaggiunta del Laplaciano, in particolare come già visto contiene funzioni continue e limitate. $D(a)$ in virtù del *Teorema KLMN* sarà il dominio dell'Hamiltonana e contiene funzioni continue e limitate ([8]).

Analizziamo la forma quadratica associata alla δ, essa risulta essere sicuramente una forma simmetrica in quanto $\delta(f,g) = \overline{f(0)}g(0)$ e $\overline{\delta(g,f)} = \overline{\overline{g(0)}f(0)} = \overline{f(0)}g(0)$.
L'ultima ipotesi da verificare è che valga una stima del tipo (4.29).
Ora però questa stima è molto semplice da dimostrare infatti nel caso 1-dimensionale il dominio $D(a)$ della forma associata all'estensione autoaggiunta dell'operatore laplaciano $D(H)$ contiene funzioni continue supporto compatto, o più in generale se il dominio non è limitato funzioni continue tali che $\lim_{x\to\pm\infty} f(x) = 0$, dunque limitate. In particolare ho che: $|f(0)| \in \mathbb{R}$, $||f(x)||_{L^2(\mathbb{R})} \in \mathbb{R}$ e $||f(x)'||_{L^2(\mathbb{R})} \in \mathbb{R}$.
Quindi scelto un qualsiasi $p \in [0,1)$ esiste un $q \geq 0$ tale che:

$$|f(0)|^2 \leq p||f(x)'||^2_{L^2(\mathbb{R})} + q||f(x)||^2_{L^2(\mathbb{R})}. \tag{5.2}$$

Abbiamo dimostrato che la forma quadratica $(a+b)(f,g) = \langle f| - \frac{d^2 g}{dx^2}\rangle + \langle f|\delta g\rangle$ è la forma di un operatore autoaggiunto, quindi descrive un'osservabile quantistica.

Abbiamo dunque risolto il problema che ci si era posti all'inizio di questa tesi, concludiamo quindi che la trattazione non formale fatta nella sezione *2.1 Trattazione non formale* in virtù dell'autoaggiuntezza dell'operatore Hamiltoniano $H = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta)$ porta a risultati fisicamente sensati. Ricordiamo ora la forma del valore spettrale e della funzione d'onda:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{ma}}{\hbar}e^{-ma|x|/\hbar^2} \qquad \text{con} \qquad E = -\frac{ma^2}{2\hbar^2}.$$

L'operatore utilizzato in quella trattazione è effettivamente un'osservabile e il valore spettrale è effettivamente il risultato che ha una misura di energia del sistema su uno stato legato e l'ampiezza quadra della funzione d'onda è la distribuzione di probabilità della posizione della particella.

Tutta la trattazione fatta è valida nel caso 1-dimensionale, in particolare vediamo subito che il *Teorema KLMN* non è utile per dimostrare l'autoaggintezza del potenziale $\hat{H} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \delta)$.
Infatti ripercorrendo la strada fatta nel caso 1-dimensionale arrivo a concludere che in questo caso il dominio $D(-\Delta)$ contiene delle funzioni con delle proprietà completamente differenti rispetto a quelle in $D(-\frac{d^2}{dx^2})$.
Nel caso a più dimensioni abbiamo in particolare che la condizione $-\Delta g \in L^2(\mathbb{R}^d)$ con $g \in D(-\Delta)$, non implica la continuità della g al contrario del caso 1-dimensionale, dove il concetto di derivabilità e differenziabilità si confondono.
Quindi, anche in presenza di un supporto compatto, non si può concludere la limitatezza della funzione, dunque non è piu possibile fare la stima fatta nel caso 1-dimensionale in quanto ora non è più vero che $|g(0)| \in \mathbb{R}$ per ogni $g \in D(-\Delta)$.

5.2 Commenti al teorema KLMN

In questa ultima sezione analizzeremo due aspetti molto importanti del *Teorema KLMN*, ovvero l'estensione del dominio dell'Hamiltoniana e il fenonemeno della cancellazione delle singolarità.
Il primo aspetto importante del teorema è, appunto, il fatto che il dominio di definizione dell'Hamiltoniana del sistema risulta essere molto più ampio del dominio dell'estensione autoaggiunta del Laplaciano e quindi permette di avere autostati del sistema che non appartengono al dominio del Laplaciano, un esempio di questo è appunto il sistema descritto dall'Hamiltoniana $H = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$ (vedere la sezione *3.1 Enunciato del Teorema KLMN*).
Infatti come è evidente dal *Teorema KLMN* il dominio di definizione dell'Hamiltoniana è $D(a)$, che è il dominio della forma quadratica associata all'operatore A, ovvero $a(f,g) = \langle f|Ag\rangle$.
Le condizioni affinché una funzione sia nel dominio della forma quadratica sono meno stringenti delle condizioni necessarie affinchè la funzione sia nel dominio dell'operatore autoaggiunta A, dunque in generale $D(a) \supseteq D(A)$.
Ad esempio prendiamo come spazio di Hilbert le funzioni quadrato integrabili, $H = L^2(\mathbb{R})$ e come operatore $\frac{d^2}{dx^2}$ con dominio $D(\frac{d^2}{dx^2})$. Ora è evidente che una condizione necessaria affinchè $f \in D(\frac{d^2}{dx^2})$ è che f ed f' siano assolutamente continue e $f'' \in L^2(\mathbb{R})$.
Sia ora $a(g,f) = \langle g|f''\rangle$ la forma quadratica associata all'operatore $\frac{d^2}{dx^2}$ con dominio $D(a)$, notiamo che la forma quadratica resta definita anche quando $f'' \notin L^2(\mathbb{R})$, infatti $a(g,f) = \langle g|f''\rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{g} f'' dx \in \mathbb{C}$ non implica $f'' \in L^2(\mathbb{R})$. Dunque è evidente come in generale il dominio della forma quadratica associata ad un operatore è piu ampio del dominio dell'operatore stesso.
In particolare può accadere anche il caso estremo in cui un potenziale descritto da un operatore V abbia un dominio tale che $D(V) \cap D(H_0) = \{0\}$ (H_0 è l'Hamiltoniano di particella libera), dunque formalmente non è possibile definire l'operatore somma $H_0 + V$.

Tramite il *Teorema KLMN* è però possibile passare alle forme quadratiche associate a questi operatori e definire l'operatore somma $H_0 \dot{+} V$ come estensione dell'operatore $H_0 + V$ nel dominio delle forma quadratica associata all'operatore H_0.
Abbiamo dunque spiegato come sia possibile che l'autostato $\psi(x) = \frac{\sqrt{ma}}{\hbar} e^{-ma|x|/\hbar^2}$ del sistema descritto dall'Hamiltoniana $H = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x))$ sia una funzione che presenta una delta di Dirac nella derivata seconda, dunque con $\psi'' \notin L^2(\mathbb{R})$. Anzi vedremo come la presenza di questa singolarità sia essenziale affinchè si verifichi il fenomeno della cancellazione.
Il secondo aspetto importante del *Teorema KLMN* è il già citato fenomeno della cancellazione delle parti singolari. Analizziamo quali sono le ipotesi del *Teorema KLMN* e cerchiamo di capire quali sono i possibili casi che si presentano quando si ha a che fare in generale con una forma Hamiltoniana del tipo $(-\Delta + b)(f, g) = \langle f| - \Delta f\rangle + b(f, f)$ (adimensionalizzando il termine di hamiltoniana libera), con dominio $D(a)$.
Abbiamo ora la forma quadratica $b(f, g)$ può essere scritta formalmente come $b(f, g) = \langle f, V g\rangle$ dove V potrebbe non essere un operatore tra spazi di Hilbert (vedi appunto il caso del potenziale a delta di Dirac).
Sicuramente abbiamo che sia $-\Delta f$ che $V f$ hanno senso se considerate come distribuzioni, le ipotesi del teorema richiedono che $-\Delta f + V f \in L^2(\mathbb{R}^d)$.
Ovviamente questo accade quando $-\Delta f, V f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, ma anche quando ci sono fenomeni di "cancellazione".
Intuitivamente può accadere che sia in $-\Delta f$ che $V f$ non appartengano a $L^2(\mathbb{R}^d)$, ma contengano delle parti singolari, ora però se le parti singolari sono uguali ed opposte quando vado a considerare $-\Delta f + V f$, queste si cancellano.
Un caso evidente di ciò è il già trattato caso della delta di dirac 1-dimensionale, infatti, prendendo una funzione continua, derivabile in $\mathbb{R} - \{0\}$ con un salto della derivata nello zero tale che $f'(0^+) - f'(0^-) = f(0)$ ottengo proprio il fenomeno della cancellazione.
Infatti ho che se considero l'operatore $-\frac{d^2}{dx^2} + \delta(x)$ applicato su questo tipo di funzione ottengo, nell'intorno dello zero, una derivata che ha la forma a *funzione a gradino di Heaviside* $\theta(x)$.
Derivando ulteriormente, come gia visto nella parte finale della sezione *2.1 Trattazione non formale*, ottengo proprio una delta di Dirac.
Facendo agire l'operatore Hamiltoniano otteniamo dunque:

$$-\frac{d^2 f}{dx^2} + \delta(x) f = -f'' - \delta(x) f(x) + \delta(x) f(x)$$

Dove la f'' è la derivata seconda della funzione calcolata nel dominio $\mathbb{R} - \{0\}$.
È dunque evidente in questo caso il fenomeno di cancellazione delle parti singolari.

In conclusione abbiamo analizzato il *Teorema KLMN* che permette di definire Hamiltoniane tramite forme quadratiche.
Questi oggetti sono molto utili nella trattazione dei sistemi quantistici in quanto descrivano valori di aspettazioni di osservabili fisiche e permettono agevolmente di proiettare stati quantistici. Tramite le forme quadratiche si possono svolgere i passaggi analitici dei

prodotti scalari tra gli stati del sistema quantistico senza curarsi del fatto che le osservabili siano effettivamente operatori autoaggiunti. Inoltre le forme forniscono un modo di introdurre le Hamiltoniane molto più fisico, cioè attraverso i loro valori di aspettazione. Dunque è lecito descrivere potenziali quantistici tramite delle forme quadratiche se queste rispettano le ipotesi del *Teorema KLMN*.
Si è anche visto come la definizione di Hamiltoniane tramite forme quadratiche porti ad estendere i domini dell'Hamiltoniana rispetto al dominio dell'operatore di paritcella libera $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$.
Infine, al di la del formalismo matematico del *Teorema KLMN*, abbiamo analizzato come sia effettivamente possibile avere potenziali che non siano operatori autoaggiunti, analizzando appunto il fenomeno della cancellazione delle parti singolari quando si va a sommare all'operatore laplaciano il potenziale del sistema fisico.

Bibliografia

[1] Y. M. Berezansky, Z. G. Sheftel e G. F. Us , *Functional Analysis Vol.1*, Birkhäuser, 1996

[2] Y. M. Berezansky, Z. G. Sheftel, G. F. Us, *Functional Analysis Vol.2*, Birkhäuser, 1996

[3] M. Reed e B. Simon , *Methods of modern mathematical Physics. Functional analysis*, Academic Press, 1970

[4] P. Blanchard e E. Brüning, *Mathematical methods in Physics*, Birkhäuser, 2002

[5] A. F. Borghesani, *Istituzioni di Fisica della Materia*, Libreria Progetto, 2017

[6] D. J. Griffiths, *Introdution to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, 1995

[7] M. C. Abbati R. Cirelli, *Metodi matematici per la fisica. Operatori lineari negli spazi di Hilbert*, Città Studi, 1996

[8] B. Simon, *Hamiltonians Defined as Quadratic Forms*, Commun.math.Phys.21,182-210, 1971

[9] A. Facchini, *Algebra e matematica discreta*, Decibel, 2000

[10] M. Cailotto, *Geometria e topologie elementari*, Web, 2016

[11] G. De Marco, *Analisi 2 teoria ed esercizi*, Zanichelli, 1999

[12] B. K. Driver, *Analysis Tools with Applications*, Springer, 2003

[13] Alberto Maggi, *Metodi matematici delle teorie quantistiche Volume 2*, Tortuga Publisher, 2002