D2. Le due basi $\{|a_k\rangle\}_{k=1}^N$ e $\{|e_k\rangle\}_{k=1}^N$ sono connesse dalla trasformazione $\hat{T}$, ovvero $|a_k\rangle = \hat{T}|e_k\rangle$, $k \in \{1,2,\dots,N\}$, la matrice $T$ rappresenta l'operatore $\hat{T}$ rispetto alla base $\{|e_k\rangle\}_{k=1}^N$, si ha cioè $\hat{T} \overset{e}{\hookleftarrow} T$, quindi

$$|a_k\rangle = \hat{T}|e_k\rangle = T_k^j|e_j\rangle\,, \qquad k \in \{1,2,\dots,N\}\,.$$

Rispetto alla stessa base possiamo rappresentare i vettori della base degli autovettori, si ha

$$|a_k\rangle = a_{(k)}^j|e_j\rangle\,, \qquad k \in \{1,2,\dots,N\}\,.$$

Uguagliando le due espressioni del vettore $|a_k\rangle$ delle relazioni precedenti, entrambe date da combinazioni dei vettori della stessa base, si ottiene l'identità tra i coefficienti omologhi

$$T_k^j = a_{(k)}^j\,, \qquad j,k \in \{1,2,\dots,N\}\,,$$

che rappresenta la relazione che si voleva dimostrare.

D3. Nel caso in cui vi sia degenerazione e quindi si abbiano solo $M < N$ autovalori distinti $\{\mu_j\}_{j=1}^M$, con ordini di degenerazione $\{m_j\}_{j=1}^M \subset \mathbb{N}$, si hanno i raggruppamenti:

$$\mu_j = \alpha_{m_1+\ldots+m_{j-1}+1} = \alpha_{m_1+\ldots+m_{j-1}+1} = \ldots = \alpha_{m_1+\ldots+m_j}\,, \qquad \forall\, j \in \{1,2,\dots,M\}\,.$$

La rappresentazione spettrale diventa

$$\begin{aligned}\hat{A} = \sum_{k=1}^N \alpha_k \hat{P}_{(k)} &= \mu_1\left(\hat{P}_{(1)} + \ldots \hat{P}_{(m_1)}\right) + \mu_2\left(\hat{P}_{(m_1+1)} + \ldots \hat{P}_{(m_1+m_2)}\right) \\ &\quad + \ldots + \mu_M\left(\hat{P}_{(N-m_M+1)} + \ldots \hat{P}_{(N)}\right) \\ &= \sum_{j=1}^M \mu_j \hat{Q}_{(j)}\,,\end{aligned}$$

dove gli operatori $\{\hat{Q}_{(j)}\}_{j=1}^M$ sono proiettori in quanto **somme di proiettori ortogonali**. Inoltre coprono tutto lo spazio poiché lo loro somma coincide con la somma di tutti i proiettori $\{\hat{P}_{(k)}\}_{k=1}^N$.

D4. Dato il polinomio $p(x) = \sum_{h=0}^n p_h x^h$, di grado $n \in \mathbb{N}$ e con coefficienti complessi $\{p_h\}_{h=0}^n \subset \mathbb{C}$, l'operatore $\hat{p}(\hat{A})$ sarà la combinazione

$$\hat{p}(\hat{A}) = \sum_{h=0}^n p_h \hat{A}^h\,.$$

Per calcolare le potenze intere di $\hat{A}$ usiamo: la rappresentazione spettrale dell'operatore, l'ortogonalità e l'idempotenza dei proiettori, si ottiene quindi

$$\hat{A}^h = \left(\sum_{j=1}^M \mu_j \hat{Q}_{(j)}\right)^h = \sum_{j=1}^M \mu_j^h \hat{Q}_{(j)}^h = \sum_{j=1}^M \mu_j^h \hat{Q}_{(j)}\,.$$

Ne consegue che l'operatore polinomio ha la rappresentazione desiderata

$$\hat{p}(\hat{A}) = \sum_{j=1}^M \underbrace{\sum_{h=0}^n p_h \mu_j^h}_{p(\mu_j)}\, \hat{Q}_{(j)} = \sum_{j=1}^M p(\mu_j)\, \hat{Q}_{(j)}\,.$$

D5. Cerchiamo un polinomio $q_k(x)$ tale che

$$q_k(\mu_j) = \delta_{kj}\,, \qquad \forall k,j \in \{1,2,\ldots,N\}\,,$$

ovvero si deve azzerare in corrispondenza degli $(M-1)$ valori $\mu_j$, con $j \in \{1,2,\ldots,k-1,k+1,\ldots,M\}$. Possiamo quindi definire un polinomio $p_k(x)$ di grado $(M-1)$ che abbia come zeri semplici gli autovalori richiesti e normalizzarlo per far sì che sia uguale ad uno in $\mu_k$, cioè

$$p_k(x) = \prod_{j\neq k}^{M} (x-\mu_j)\,, \qquad q_k(x) = \frac{p_k(x)}{p_k(\mu_k)} = \prod_{j\neq k}^{M} \frac{x-\mu_j}{\mu_k-\mu_j}\,.$$

L'operatore che si ottiene valutando il polinomio in $\hat{A}$ coincide con il $k$-esimo proiettore $\hat{Q}_{(k)}$, come volevasi dimostrare, infatti

$$\hat{q}_k(\hat{A}) = \sum_{j=1}^{M} q_k(\mu_j)\hat{Q}_{(j)} = \sum_{j=1}^{M} \delta_{kj}\hat{Q}_{(j)} = \hat{Q}_{(k)}\,, \qquad \forall k \in \{1,2,\ldots,M\}\,.$$

---

#### Invarianti degli operatori diagonalizzabili

Consideriamo un operatore diagonalizzabile $\hat{A} : E_N \to E_N$, con autovalori $\{\alpha_k\}_{k=1}^N$ e autovettori $\{|a_k\rangle\}_{k=1}^M$. L'insieme degli autovettori rappresenta una base dello spazio vettoriale $E_N$, rispetto alla quale l'operatore ha la rappresentazione diagonale

$$A^m_k = \alpha_k \delta^m_k \qquad \Longrightarrow \qquad A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \alpha_2 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & \alpha_N \end{pmatrix}.$$

Lo **spettro discreto** di un operatore, così come il **determinante** e la **traccia** sono **invarianti**, non dipendono, cioè, dalla rappresentazione e valgono le seguenti relazioni:

$$\mathrm{Tr}(A) = \sum_{k=1}^{N} \alpha_k\,, \qquad \det(A) = \prod_{k=1}^{N} \alpha_k\,.$$

Nel caso banale di un operatore di dimensione due, ovvero con range di dimensione due, le relazioni precedenti sono sufficienti a determinare gli autovalori.
L'operatore aggiunto $\hat{A}^\dagger : E_N \to E_N$ dell'operatore diagonalizzabile $\hat{A}$ ha gli stessi autovettori, mentre gli autovalori relativi sono i complessi coniugati di quelli di $\hat{A}$. Ciò si evince dalla rappresentazione spettrale di $\hat{A}^\dagger$, che si ottiene facendo l'aggiunto hermitiano della rappresentazione spettrale dell'operatore origina $\hat{A}$

$$\hat{A}^\dagger = \left(\sum_{k=1}^{N} \alpha_k \hat{P}_{(k)}\right)^\dagger = \sum_{k=1}^{N} \alpha_k^* \hat{P}_{(k)}\,,$$

ne consegue che, avendo gli stessi proiettori, gli autovettori sono gli stessi, mentre gli autovalori sono i complessi coniugati, si hanno quindi le equazioni agli autovalori

$$\hat{A}^\dagger |a_k\rangle = \alpha_k^* |a_k\rangle\,.$$

## 2.28 Operatori normali

Un operatore limitato $\hat{A}$ si dice **normale** $\overset{\text{def.}}{\Longleftrightarrow}$ $[\hat{A},\hat{A}^\dagger]=0$, cioè se commuta con il suo aggiunto.

**Teorema sugli operatori normali.** Un operatore limitato $\hat{A}: E_N \to E_N$ ammette un insieme ON di autovettori $\{|u_k\rangle\}_{k=1}^N \Longleftrightarrow$ è un operatore normale.

**Dim.:** ($\Longrightarrow$) Sia $\{|a_k\rangle\}_{k=1}^N$ un insieme ON di autovettori di $\hat{A}$ con autovalori $\{\alpha_k\}_{k=1}^N$, si hanno quindi, per lo stesso operatore $\hat{A}$ e per il suo aggiunto $\hat{A}^\dagger$, le equazioni agli autovalori

$$\hat{A}|a_k\rangle = \alpha_k|a_k\rangle\,, \qquad \hat{A}^\dagger|a_k\rangle = \alpha_k^*|a_k\rangle\,, \qquad \forall k\in\{1,2,\ldots,N\}\,.$$

Consideriamo l'azione dell'operatore commutatore sui vettori $\{|a_k\rangle\}_{k=1}^N$, che rappresentano una base ON di $E_N$,

$$\begin{aligned}
[\hat{A},\hat{A}^\dagger]|a_k\rangle &= \hat{A}\hat{A}^\dagger|a_k\rangle - \hat{A}^\dagger\hat{A}|a_k\rangle \\
&= \alpha_k^*\hat{A}|a_k\rangle - \alpha_k\hat{A}^\dagger|a_k\rangle \\
&= \alpha_k^*\alpha_k|a_k\rangle - \alpha_k\alpha_k^*|a_k\rangle = |0\rangle\,, \qquad \forall k\in\{1,2,\ldots,N\}\,,
\end{aligned}$$

ovvero l'operatore commutatore è nullo.

**Dim.:** ($\Longleftarrow$) Dimostriamo solo il caso in cui non c'è degenerazione, ovvero si hanno $N$ autovalori distinti. Avendo per ipotesi che l'operatore $\hat{A}$ è normale si dimostra che esiste un insieme ON di autovettori. Sia $\{|a_k\rangle\}_{k=1}^N$ l'insieme degli autovettori di $\hat{A}$ con autovalori $\{\alpha_k\}_{k=1}^N$, si ha quindi

$$\hat{A}|a_k\rangle = \alpha_k|a_k\rangle\,, \qquad \forall k\in\{1,2,\ldots,N\}\,.$$

Per ipotesi il commutatore di $\hat{A}$ e $\hat{A}^\dagger$ è nullo quindi, $\forall k\in\{1,2,\ldots,N\}$,

$$\begin{gathered}
|0\rangle = [\hat{A},\hat{A}^\dagger]|a_k\rangle = \hat{A}\hat{A}^\dagger|a_k\rangle - \hat{A}^\dagger\hat{A}|a_k\rangle = \hat{A}\hat{A}^\dagger|a_k\rangle - \alpha_k\hat{A}^\dagger|a_k\rangle \\
\Downarrow \\
\hat{A}\hat{A}^\dagger|a_k\rangle = \alpha_k\hat{A}^\dagger|a_k\rangle\,.
\end{gathered}$$

Ciò implica che gli $N$ vettori $\hat{A}^\dagger|a_k\rangle$ sono autovettori di $\hat{A}$ relativi agli stessi autovalori $\{\alpha_k\}_{k=1}^N$, sono cioè proporzionali agli omologhi dell'insieme $\{|a_k\rangle\}_{k=1}^N$. Esiste un insieme di coefficienti $\{\rho_k\}_{k=1}^N$, tale che

$$\hat{A}^\dagger|a_k\rangle = \rho_k|a_k\rangle\,, \qquad \forall k\in\{1,2,\ldots,N\}\,,$$

questa è l'equazione agli autovalori per $\hat{A}^\dagger$, che ha quindi gli stessi autovettori di $\hat{A}$. Dimostriamo che gli autovalori di $\hat{A}^\dagger$ sono i complessi coniugati di quelli di $\hat{A}$. Consideriamo, per l'operatore $\hat{A}$, l'equazione per il generico, $k$-esimo, autovalore in forma duale e moltiplichiamo, a destra, per il ket $|a_k\rangle$, mentre, per l'aggiunto $\hat{A}^\dagger$, l'equazione "diretta" e moltiplichiamo a sinistra per il bra $\langle a_k|$,

$$\begin{aligned}
\langle a_k|\hat{A}^\dagger &= \alpha_k^*\langle a_k| & \qquad \hat{A}^\dagger|a_k\rangle &= \rho_k|a_k\rangle \\
\langle a_k|\hat{A}^\dagger|a_k\rangle &= \alpha_k^*\langle a_k|a_k\rangle & \qquad \langle a_k|\hat{A}^\dagger|a_k\rangle &= \rho_k\langle a_k|a_k\rangle\,,
\end{aligned}$$

sottraendo membro a membro e sfruttando la condizione: $|a_j\rangle \neq |0\rangle$ e quindi $\langle a_j|a_j\rangle > 0$, $\forall j\in\{1,2,\ldots,N\}$, si ha

$$0 = (\alpha_k^* - \rho_k)\,\langle a_k|a_k\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \alpha_k^* = \rho_k\,, \qquad \forall k\in\{1,2,\ldots,N\}\,.$$

In definitiva gli operatori $\hat{A}$ e $\hat{A}^\dagger$ hanno gli stessi autovettori $\{|a_k\rangle\}_{k=1}^N$ con autovalori, rispettivamente, $\{\alpha_k\}_{k=1}^N$ e $\{\alpha_k^*\}_{k=1}^N$. Dalle due equazioni agli autovalori $k$-esima e $j$-esima, $\forall k, j \in \{1, 2, \ldots, N\}$, moltiplicate rispettivamente per $\langle a_j|$ e $\langle a_k|$ si ottengono le identità

$$\begin{aligned} \hat{A}|a_k\rangle &= \alpha_k|a_k\rangle & \qquad \hat{A}^\dagger|a_j\rangle &= \alpha_j^*|a_j\rangle \\ \langle a_j|\hat{A}|a_k\rangle &= \alpha_k\langle a_j|a_k\rangle & \qquad \langle a_k|\hat{A}^\dagger|a_j\rangle &= \alpha_j^*\langle a_k|a_j\rangle\,. \end{aligned}$$

Sottraiamo alla prima la complessa coniugata della seconda

$$0 = (\alpha_k - \alpha_j)\langle a_j|a_k\rangle\,, \qquad \forall k, j \in \{1, 2, \ldots, N\}\,,$$

avendo che $\alpha_k \neq \alpha_j$ se $k \neq j$, si ottiene la condizione di ortogonalità desiderata

$$\langle a_j|a_k\rangle = \delta_{jk}\langle a_j|a_j\rangle\,, \qquad \forall k, j \in \{1, 2, \ldots, N\}\,.$$

Infine, possiamo normalizzare i vettori $|a\rangle_k$ definendo i vettori

$$|u_k\rangle = \frac{|a_k\rangle}{\sqrt{\langle a_k|a_k\rangle}}\,,$$

che costituiscono l'insieme ON $\{|u_k\rangle\}_{k=1}^N$.

### Esempi di operatori normali

- Gli **operatori hermitiani** sono operatori normali, sia $\hat{H}$ hermitiano

$$[\hat{H}, \hat{H}^\dagger] = [\hat{H}, \hat{H}] = 0\,.$$

- Gli **operatori unitari** sono anch'essi operatori normali, infatti, sia $\hat{U}$ unitario, quindi tale che: $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$, allora

$$[\hat{U}, \hat{U}^\dagger] = \hat{U}\hat{U}^\dagger - \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I} - \hat{I} = 0\,.$$

### Rappresentazione spettrale con basi ortonormali

Sia $\hat{A} : E_N \to E_N$ un operatore normale che, quindi, ammette un insieme ON di autovettori $\{|a_k\rangle\}_{k=1}^N$, che rappresenta una base di $E_N$ e verifica la relazione di completezza

$$\sum_{k=1}^N |a_k\rangle\langle a_k| = \hat{I}\,.$$

Si ha allora che

$$\hat{A} = \hat{A}\hat{I} = \hat{A}\sum_{k=1}^n |a_k\rangle\langle a_k| = \sum_{k=1}^n \hat{A}|a_k\rangle\langle a_k| = \sum_{k=1}^n \lambda_k|a_k\rangle\langle a_k|\,.$$

Questa è la rappresentazione spettrale dell'operatore normale $\hat{A}$, l'insieme dei proiettori ortogonali è quindi

$$\{\hat{P}_{(k)} = |a_k\rangle\langle a_k|\}_{k=1}^N\,.$$

### 2.28.1 Funzione di un operatore

La nozione di funzione di un operatore o funzione operatoriale generalizza quella di polinomio operatoriale già visto. Consideriamo una funzione $f(z)$ analitica nell'origine e quindi ivi sviluppabile in serie di Taylor con raggio di convergenza $R$, che si ottiene con la formula di Cauchy-Hadamard, cioè

$$f(z)=\sum_{k=0}^{\infty} f_k z^k\,, \qquad |z|<R=\left(\limsup_{k\to\infty}|f_k|^{1/k}\right)^{-1}.$$

Generalizzando quanto visto per un polinomio, si ha che la funzione operatoriale dell'operatore $\hat{A}: E_N \to E_N$ è, almeno formalmente esprimibile coo una serie analoga,

$$\hat{f}(\hat{A})=\sum_{k=0}^{\infty} f_k \hat{A}^k\,,$$

con l'ovvia condizione di convergenza: $\|\hat{A}\|<R$. Consideriamo il caso in cui $\hat{A}$ sia diagonalizzabile allora, valgono, per lo stesso operatore e per la sua potenza $h$-esima, con $h\in\mathbb{N}$, le rappresentazioni spettrali

$$\hat{A}=\sum_{j=1}^{M}\mu_j \hat{Q}_{(j)}\,, \qquad \hat{A}^h=\sum_{j=1}^{M}\mu_j^h \hat{Q}_{(j)}\,.$$

Se gli $M$ autovalori distinti $\{\mu_j\}_{j=1}^{M}$, sono tali da verificare la condizione

$$|\mu_j|<R\,, \qquad \forall\, j\in\{1,2,\ldots,M\}\,,$$

allora la funzione operatoriale è

$$\hat{f}(\hat{A})=\lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n} f_k\hat{A}^k=\lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n} f_k\sum_{j=1}^{M}\mu_j^k\hat{Q}_{(j)}=\sum_{j=1}^{M}\underbrace{\lim_{n\to\infty}\sum_{k=0}^{n} f_k\mu_j^k}_{f(\mu_j)}\hat{Q}_{(j)}=\sum_{j=1}^{M} f(\mu_j)\,\hat{Q}_{(j)}.$$

L'operatore $\hat{f}(\hat{A})$ ha gli stessi autovettori di $\hat{A}$, gli autovalori, invece, sono le immagini tramite $f(z)$ di quelli dello stesso operatore $\hat{A}$. Ovvero si hanno le equazioni agli autovalori

$$\hat{A}|a_j\rangle=\mu_j|a_j\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{f}(\hat{A})|a_j\rangle=f(\mu_j)|a_j\rangle\,, \qquad \forall\, j\in\{1,2,\ldots,N\}\,.$$

## 2.29 Osservabili in Meccanica Quantistica

In meccanica quantistica si definiscono **osservabili** di un sistema fisico tutte le proprietà dello stesso sistema, come: l'energia, il momento, la posizione, ecc., che possono essere **misurate**, ovvero, cui è possibile associare **quantità reali**. Le osservabili sono "rappresentate" da **operatori hermitiani** che agiscono su **spazi di Hilbert**.
Sia $\hat{H}: E_N \to E_N$ un operatore hermitiano, quindi normale, e $\{|\phi_k\rangle\}_{k=1}^{N}$ una base ON dello spazio vettoriale $E_N$ composta da autovettori di $\hat{H}$, con autovalori $\{\lambda_k\}_{k=1}^{N}$, quindi:

$$\hat{H}|\phi_k\rangle=\lambda_k|\phi_k\rangle\,, \qquad \langle\phi_k|\phi_j\rangle=\delta_j^k\,, \qquad \forall\, k,j\in\{1,2,\ldots,N\}\,.$$

Gli autovalori sono gli unici risultati possibili della misura della grandezza corrispondente all'operatore $\hat{H}$ effettuata su un dato sistema fisico.

Se il sistema fisico si trova in uno stato generico caratterizzato dal vettore $|\psi\rangle \in E_N$, l'ampiezza di probabilità di ottenere il valore $\lambda_k$ da una misura della grandezza caratterizzata dall'operatore $\hat{H}$, ovvero di far **collassare il sistema nell'autostato $|\phi_k\rangle$ corrispondente di $\hat{H}$**, coincide con la componente, $c^k = \langle\phi_k|\psi\rangle$, "lungo" $|\phi_k\rangle$ del vettore $|\psi\rangle$. In generale, se indichiamo con $|\psi_i\rangle$ e $|\psi_f\rangle$ due possibili stati per uno stesso sistema, l'ampiezza di probabilità, $\mathscr{A}(i \to f)$, di transizione $|\psi_i\rangle \to |\psi_f\rangle$ è data da: $\mathscr{A}(i \to f) = \langle\psi_f|\psi_i\rangle$ e la probabilità si ottiene come modulo quadro, cioè

$$P(i \to f) = \left|\langle\psi_f|\psi_i\rangle\right|^2 .$$

Questa quantità è reale e, normalizzando ad uno gli stati $|\psi_i\rangle$ e $|\psi_f\rangle$, si ha, come è naturale aspettarsi, che la probabilità è limitata superiormente dalla "certezza", $P = 1$, infatti

$$P(i \to f) = \left|\langle\psi_f|\psi_i\rangle\right|^2 \leq \|\psi_i\|^2 \left\|\psi_f\right\|^2 = 1 .$$

Ne consegue che la probabilità che il sistema passi da uno stato generico $|\psi\rangle$ ad un autostato $|\phi_k\rangle$ di $\hat{H}$, in cui, cioè, il valore della grandezza fisica associata è ben definito e uguale all'autovalore corrispondente $\lambda_k$, è

$$P(\psi \to \phi_k) = |\langle\phi_k|\psi\rangle|^2 = \left|c^k\right|^2 .$$

La probabilità di ottenere uno qualsiasi dei possibili valori $\{\lambda_k\}_{k=1}^N$ deve essere uno, ovvero la certezza, infatti, grazie alla relazione di completezza della base ON $\{|\phi_k\rangle\}_{k=1}^N$ e alla normalizzazione di $|\psi\rangle$, si ha

$$\sum_{k=1}^N \left|c^k\right|^2 = \sum_{k=1}^N \langle\psi|\phi_k\rangle\langle\phi_k|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1 .$$

Si chiama **valore di aspettazione** di una data osservabile, $\hat{H}$, in uno stato $|\psi\rangle$ la quantità

$$\langle\hat{H}\rangle_\psi \equiv \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\phi_j|\hat{H}|\phi_k\rangle c^{j*} c^k = \langle\phi_j|\phi_k\rangle c^{j*} c^k \lambda_k = \sum_{k=1}^N \left|c^k\right|^2 \lambda_k .$$

Si può interpretare come una media di tutti i valori possibili pesata con le probabilità di occorrenza. Se l'operatore $\hat{H}$ è hermitiano i valori di aspettazione sono reali.