METODI MATEMATICI PER L'INGEGNERIA ELETTRONICA

Corso di 5 Crediti
Corso di Laurea Specialistica in Ingegneria Elettronica
A.A. 2007-2008

Cornelis VAN DER MEE

Dipartimento di Matematica e Informatica
Università di Cagliari
Viale Merello 92, 09123 Cagliari
070-6755605 (studio), 070-6755601 (FAX), 335-5287988 (cell.)

cornelis@krein.unica.it
http:\\bugs.unica.it\∼cornelis
oppure: http:\\krein.unica.it\∼cornelis

L'altra condizione $u(L) = 0$ conduce alla condizione

$$\cos(kL) = 0 \Leftrightarrow kL = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots.$$

Quindi gli autovalori $\lambda_n = k_n^2 = ((n - \frac{1}{2})\pi/L)^2$ e le autofunzioni $\varphi_n(x) \sim \cos((n - \frac{1}{2})\pi x/L)$ per $n = 1, 2, 3, \ldots$. Ortonormalizzando le autofunzioni in $L^2(0, L)$ otteniamo

$$\lambda_n = \left(\frac{\left(n - \frac{1}{2}\right)\pi}{L}\right)^2, \qquad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{\left(n - \frac{1}{2}\right)\pi x}{L}\right), \tag{I.21}$$

dove $n = 1, 2, 3, \ldots$. Le autofunzioni formano una base ortonormale di $L^2(0, L)$.

e. Condizioni periodiche. Le soluzioni non banali sono quelle periodiche. Dunque abbiamo la base ortonormale di autofunzioni (con corrispondenti autovalori)

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = \dfrac{1}{\sqrt{L}}, & \lambda_0 = 0, \\ \varphi_n^c(x) = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\cos\left(\dfrac{2n\pi x}{L}\right), & \lambda_n = \left(\dfrac{2n\pi}{L}\right)^2, \\ \varphi_n^s(x) = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\left(\dfrac{2n\pi x}{L}\right), & \lambda_n = \left(\dfrac{2n\pi}{L}\right)^2, \end{cases} \tag{I.22}$$

dove $n = 1, 2, 3, \ldots$. Quindi l'autovalori zero è semplice mentre gli altri autovalori hanno moltiplicità 2.

f. Condizione di Dirichlet in $x = 0$ e mista in $x = L$. Per trovare una soluzione non banale del problema al contorno supponiamo che $k \geq 0$. Utilizzando la condizione $u(0) = 0$ si ottiene

$$u(x) \sim \sin(kx).$$

L'altra condizione $(\cos\alpha)u(L) + (\sin\alpha)u'(L) = 0$ conduce alla condizione

$$\cos\alpha\,\sin(kL) + k\sin\alpha\,\cos(kL) = 0, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots.$$

Escludendo i casi già trattati, cioè $\alpha = 0$ [Dirichlet] e $\alpha = (\pi/2)$ [Dirichlet in $x = 0$ e Neumann in $x = L$], risultano $k > 0$, $\sin(kL) = 0$ e $\cos(kL) \neq 0$. Arriviamo all'equazione transcedentale

$$\tan(kL) = -k\tan\alpha, \tag{I.23}$$

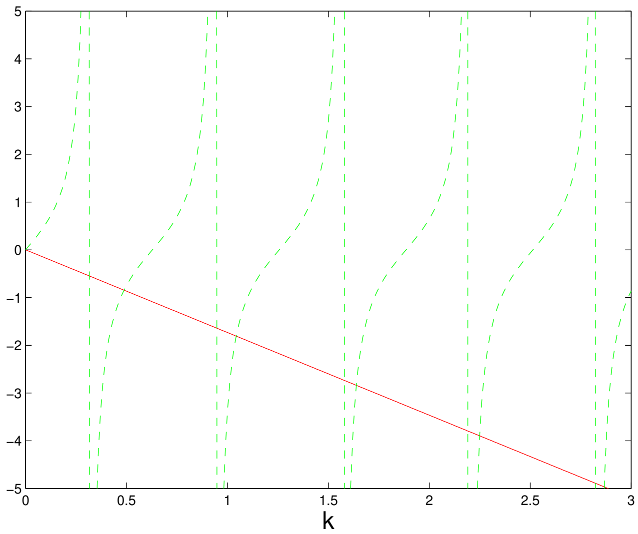

Figura I.1: Il plot contiene i grafici delle funzioni $y = \tan(xL)$ e $y = -k\tan\alpha$ per $L = 5$ e $\alpha = \frac{\pi}{3}$. Gli autovalori sono i valori di $k > 0$ corrispondenti ai loro punti di intersezione.

dove $\tan\alpha > 0$. Cercando i punti di intersezione positivi tra il grafico della funzione $k \mapsto \tan(kL)$ e la retta $k \mapsto -k\tan\alpha$ con coefficiente angolare negativo, troviamo una successione infinita di autovalori $\lambda_n = k_n^2$ $(n = 1, 2, 3, \ldots)$. Le corrispondenti autofunzioni si possono normalizzare in $L^2(0, L)$, risultando in una base ortonormale di $L^2(0, L)$.

g. Condizioni Miste Diverse. Ci limitiamo al caso in cui $\alpha, \beta \in (0, \frac{\pi}{2})$. In tal caso la soluzione

$$u(x) \sim c_1 \cos(kx) + c_2 \frac{\sin(kx)}{k}$$

per le opportune costanti c_1, c_2 e per $k > 0$ soddisfa alle due condizioni

$$c_1 \cos\beta - c_2 \sin\beta = 0, \tag{I.24}$$

$$c_1 \left[\cos\alpha\cos(kL) - k\sin\alpha\sin(kL)\right] + c_2 \left[\cos\alpha\frac{\sin(kL)}{k} + \sin\alpha\cos(kL)\right] = 0. \tag{I.25}$$

L'esistenza di una soluzione non banale conduce alla condizione

$$\cos\beta\left[\cos\alpha\frac{\sin(kL)}{k} + \sin\alpha\cos(kL)\right] + \sin\beta\left[\cos\alpha\cos(kL) - k\sin\alpha\sin(kL)\right] = 0,$$

e dunque [vedi la (A.10) nell'Appendice A]

$$W[J_\nu, J_{-\nu}](x) = \frac{-2\nu}{x\Gamma(\nu+1)\Gamma(-\nu+1)} + \underbrace{O(x)}_{=0}$$

$$= \frac{-2\nu}{x\Gamma(\nu+1)\Gamma(-\nu+1)} = \frac{-2\,\sin(\nu\pi)}{\pi x}.$$

Quindi $J_\nu(x)$ e $J_{-\nu}(x)$ sono linearmente indipendenti [cioè, il Wronskiano non si annulla per $x \neq 0$] se e solo se ν non è un intero. Se $\nu \in \mathbb{Z}$, risulta $J_{-\nu}(x) = (-1)^\nu J_\nu(x)$.

Per $\nu = n$ ($n = 0, 1, 2, \cdots$) esiste una soluzione dell'equazione di Bessel linearmente indipendente della $J_n(x)$. Per trovarela definiamo la *funzione di Bessel di seconda specie*

$$\boxed{Y_\nu(x) = \frac{J_\nu(x)\cos(\nu\pi) - J_{-\nu}(x)}{\sin(\nu\pi)}}$$

per $\nu \notin \mathbb{Z}$. Siccome sia il numeratore che il denominatore sono funzioni analitiche di $\nu \in \mathbb{C}$ e $(d/d\nu)\sin(\nu\pi) = \pi\,\cos(\nu\pi) \neq 0$ per $\nu = 0, 1, 2, \cdots$, il limite di $Y_\nu(x)$ per $\nu \to n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ esiste ed è uguale all'espressione

$$Y_n(x) = \frac{1}{\pi}\left[\frac{\partial J_\nu(x)}{\partial\nu}\right]_{\nu=n} - (-1)^n \left[\frac{\partial J_{-\nu}(x)}{\partial\nu}\right]_{\nu=n}.$$

Calcolando la derivata della serie di potenza per $J_\nu(x)$ rispetto a ν ed introducendo la funzione $\psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ otteniamo per $x \geq 0$

$$\begin{aligned}
Y_0(x) &= \frac{2}{\pi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k(z/2)^{2k}}{(k!)^2}\left[\log\frac{z}{2} - \psi(k+1)\right] \\
&= \frac{2}{\pi}J_0(x)\log\frac{x}{2} - \frac{2}{\pi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k(z/2)^{2k}}{(k!)^2}\psi(k+1), \\
Y_n(x) &= -\frac{1}{\pi}\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(n-k-1)!}{k!}\left(\frac{z}{2}\right)^{2k-n} \\
&\quad + \frac{1}{\pi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k(z/2)^{n+2k}}{k!(n+k)!}\left[2\,\log\frac{z}{2} - \psi(k+1) - \psi(k+n+1)\right] \\
&= \frac{2}{\pi}J_n(x)\log\frac{x}{2} - \frac{1}{\pi}\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(n-k-1)!}{k!}\left(\frac{x}{2}\right)^{2k-n} \\
&\quad - \frac{1}{\pi}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k(z/2)^{n+2k}}{k!(n+k)!}\left[\psi(k+1) + \psi(k+n+1)\right].
\end{aligned}$$

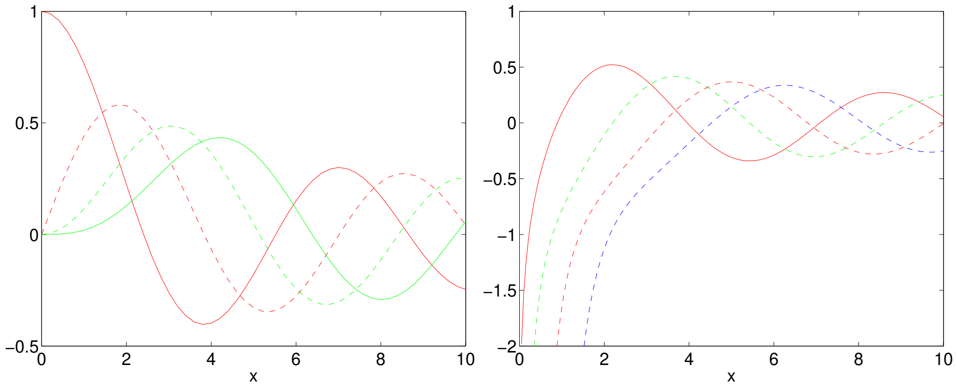

Figura II.1: Panello sinistro: le funzioni di Bessel $J_\nu(x)$, $\nu = 0,1,2,3$. Panello destro: le funzioni di Neumann $Y_\nu(x)$, $\nu = 0,1,2,3$.

Quest'espressione conduce alle rappresentazioni asintotiche per $x \to 0^+$

$$\boxed{Y_n(x) \sim \begin{cases} \dfrac{2}{\pi}\log\dfrac{x}{2}, & n=0 \\ -\dfrac{(n-1)!}{\pi}\left(\dfrac{x}{2}\right)^{-n}, & n=1,2,\cdots, \end{cases}} \tag{II.42}$$

implicando che $|Y_n(x)| \to +\infty$ se $x \to 0$.

Per ragioni di linearità le funzioni di Bessel di seconda specie soddisfano alle stesse formule di ricorrenza di quelle di prima specie. In particolare

$$Y_\nu'(x) = Y_{\nu-1}(x) - \frac{\nu}{x}Y_\nu(x) = -Y_{\nu+1}(x) + \frac{\nu}{x}Y_\nu(x);$$

$$\frac{d}{dx}\left[x^\nu Y_\nu(x)\right] = x^\nu Y_{\nu-1}(x), \qquad \frac{d}{dx}\left[x^{-\nu} Y_\nu(x)\right] = -x^{-\nu} Y_{\nu+1}(x);$$

$$Y_0'(x) = -Y_1(x); \qquad Y_{\nu+1}(x) - \frac{2\nu}{x}Y_\nu(x) + Y_{\nu-1}(x) = 0.$$

4.3 Ortogonalità e zeri

La seguente proposizione ci importa nei casi $\alpha = 1$ e $\beta = 0$ (cercando gli zeri) e $\alpha = 0$ e $\beta = 1$ (cercando i valori estremi).

Proposizione II.4 *Per $\alpha, \beta \geq 0$ con $\alpha + \beta > 0$, siano μ_1 e μ_2 zeri reali dell'equazione*

$$\alpha J_\nu(\mu) + \beta\mu J_\nu'(\mu) = 0, \tag{II.43}$$

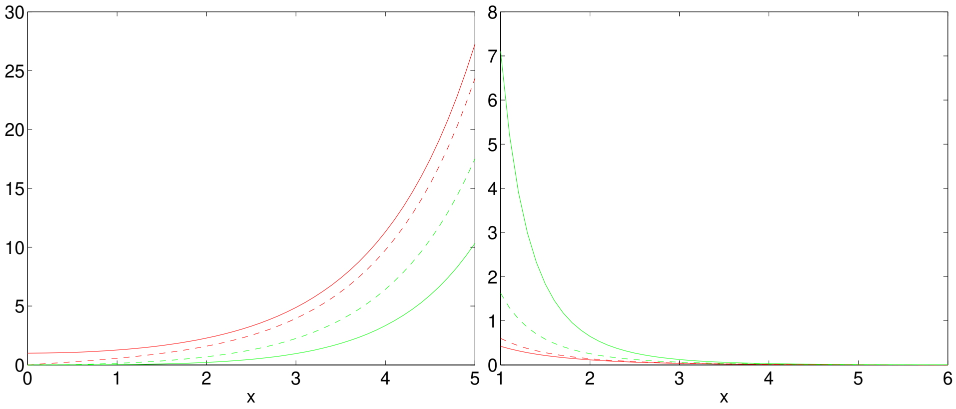

Figura II.2: Panello sinistro: le funzioni di Bessel immaginarie $I_\nu(x)$ per $\nu = 0, 1, 2, 3$. Panello destro: le funzioni di MacDonald $K_\nu(x)$ per $\nu = 0, 1, 2, 3$.

Le dimostrazioni delle formule asintotiche (II.52)-(II.56) si trovano nell'Appendice C. Analogamente, utilizzando la (II.39), si ottiene per $x \to 0^+$

$$\begin{cases} H_0^{(1)}(x) \approx -\dfrac{2i}{\pi} \ln \dfrac{1}{x}, & H_0^{(2)}(x) \approx \dfrac{2i}{\pi} \ln \dfrac{1}{x}, \\[2ex] Y_0(x) \approx -\dfrac{2}{\pi} \ln \dfrac{1}{x}, & K_0(x) \approx \ln \dfrac{1}{x}. \end{cases}$$

Calcoliamo ora

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{2} \left(I_{-\nu}(z) - I_\nu(z) \right) &= \frac{\pi}{2} \left(e^{\nu\pi i/2} J_{-\nu}(iz) - e^{-\nu\pi i/2} J_\nu(iz) \right) \\ &= \frac{\pi}{2} e^{\nu\pi i/2} \left(J_{-\nu}(iz) - e^{-\nu\pi i} J_\nu(iz) \right) \\ &= \frac{\pi}{2} e^{\nu\pi i/2} \left(-[J_\nu(iz)\cos(\nu\pi) - J_{-\nu}(iz)] + i\, \sin(\nu\pi) J_\nu(iz) \right) \\ &= \frac{\pi}{2} e^{\nu\pi i/2} \sin(\nu\pi) \left(J_\nu(iz) + iY_\nu(iz) \right) \\ &= \frac{\pi i}{2} e^{\nu\pi i/2} H_\nu^{(1)}(iz) \sin(\nu\pi) = K_\nu(z) \sin(\nu\pi), \end{aligned}$$

implicando che[5]

$$\boxed{K_\nu(z) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)}{\sin(\nu\pi)}.}$$

[5]In [20, Sec. 17.71] la funzione di MacDonald $K_\nu(z)$ viene definita in modo diverso: $K_\nu(z) = \frac{\pi}{2}(I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)) \cot(\nu\pi)$.

Per $\nu = n \in \mathbb{Z}$ bisogna calcolare il limite se $\nu \to n$.

Troviamo ora le equazioni differenziali per le funzioni $I_\nu(x)$ e $K_\nu(x)$. Sostituendo $x \mapsto ix$ nella (II.34), otteniamo l'equazione differenziale

$$\boxed{x^2u'' + xu' - (x^2+\nu^2)u = 0.} \tag{II.57}$$

Dal Teorema II.5 segue che per $\nu > -1$ le funzioni di Bessel immaginarie $I_\nu(x)$ e le loro derivate prime non hanno zeri reali (con l'eccezione di $x = 0$ se $\nu > 0$).

4.5 Funzioni sferiche di Bessel

Le funzioni di Bessel $J_{\pm(l+\frac{1}{2})}(x)$, dove $l = 0, 1, 2, \ldots$, appaiono nello studio dello scattering quantistico e dello scattering della luce. Per questo motivo vengono introdotte le seguenti funzioni:

$$j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, J_{l+\frac{1}{2}}(z), \tag{II.58}$$

$$y_l(z) = (-1)^{l+1} n_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, Y_{l+\frac{1}{2}}(z), \tag{II.59}$$

$$h_l^{(1)}(z) = j_l(z) + i y_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, H^{(1)}_{l+\frac{1}{2}}(z), \tag{II.60}$$

$$h_l^{(2)}(z) = j_l(z) - i y_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, H^{(2)}_{l+\frac{1}{2}}(z). \tag{II.61}$$

Le funzioni $j_l(z)$, $y_l(z) = (-1)^{l+1} n_l(z)$ e $h_l^{(1,2)}(z)$ si dicono *funzioni sferiche di Bessel* di prima, seconda e terza specie. Quindi

$$\begin{aligned}
j_0(z) &= \frac{\sin(z)}{z}, \\
j_1(z) &= \frac{\sin(z)}{z^2} - \frac{\cos(z)}{z}, \\
j_2(z) &= \left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z}\right)\sin(z) - \frac{3}{z^2}\cos(z), \\
y_0(z) &= -n_0(z) = -\frac{\cos(z)}{z}, \\
y_1(z) &= n_1(z) = -\frac{\cos(z)}{z^2} - \frac{\sin(z)}{z}, \\
y_2(z) &= -n_2(z) = \left(-\frac{3}{z^3} + \frac{1}{z}\right)\cos(z) - \frac{3}{z^2}\sin(z).
\end{aligned}$$

Si vede facilmente che

$$y_l(z) = (-1)^{l+1} n_l(z) = (-1)^{l+1} j_{-l-1}(z). \tag{II.62}$$

Consideriamo ora le funzioni sferiche sulla sfera S^2 $(n = 3)$. In coordinate sferiche abbiamo per $y_l(x) = r^l Y_l(\theta, \varphi)$

$$\frac{1}{\operatorname{sen}\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{1}{\operatorname{sen}\varphi}\frac{\partial Y_l}{\partial\varphi}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\varphi}\frac{\partial^2 Y_l}{\partial\theta^2} + l(l+1)Y_l(\theta,\varphi) = 0, \qquad \text{(II.71)}$$

dove $\theta \in [0, 2\pi]$, $\varphi \in [0, \pi]$ e $l = 0, 1, 2, \cdots$. Cerchiamo le soluzioni della (II.71) in $C^\infty(S^2)$. Introduciamo prima $\xi = \cos\varphi$ e scriviamo (II.71) nella forma

$$\frac{1}{1-\xi^2}\frac{\partial^2 Y_l}{\partial\theta^2} + \frac{\partial}{\partial\xi}\left((1-\xi^2)\frac{\partial Y_l}{\partial\xi}\right) + l(l+1)Y_l(\theta,\xi) = 0. \qquad \text{(II.72)}$$

Applicando la separazione delle variabili

$$Y_l(\theta,\varphi) = \mathcal{P}(\xi)\Theta(\theta),$$

otteniamo

$$\Theta(\theta) = \begin{cases} \text{costante}, & m = 0 \\ c_1\cos m\theta + c_2 \operatorname{sen} m\theta, & m = 1, 2, 3, \cdots, \end{cases}$$

dove abbiamo sfruttato la periodicità della $\Theta(\theta)$: $\Theta(\theta + 2\pi) \equiv \Theta(\theta)$. Dunque $\Theta''(\theta) = -m^2\Theta(\theta)$. Risulta l'equazione differenziale

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{d\mathcal{P}}{d\xi}\right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right]\mathcal{P}(\xi) = 0. \qquad \text{(II.73)}$$

Quest'equazione si può scrivere nella forma

$$-\left[(1-\xi^2)\mathcal{P}'\right]' + \frac{m^2}{1-\xi^2}\mathcal{P} = l(l+1)\mathcal{P}.$$

Le soluzioni di quest'equazione nei punti ± 1 debbono assumere valori finiti.

5.2 Polinomi di Legendre

I polinomi di Legendre $P_l(\xi)$ si possono definire nei seguenti modi:

1. tramite la formula generatrice

$$\frac{1}{\sqrt{1-2\xi h + h^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\xi)h^l, \qquad |h| < 1,$$

2. tramite l'equazione differenziale,

$$\boxed{-[(1-x^2)P_l']'(x) = l(l+1)P_l(x),} \; -1 < x < +1; \qquad \boxed{P_l(1) = 1,}$$

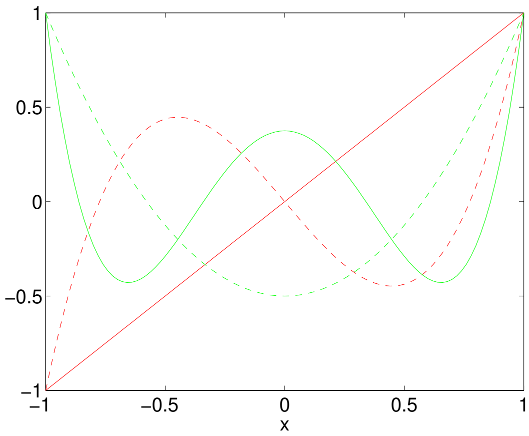

Figura II.3: I polinomi di Legendre di grado 1, 2, 3 e 4. Si osservi che il numero degli zeri è uguale al grado del polinomio.

3. tramite l'ortogonalità: $P_l(\xi)$ sono i polinomi in ξ di grado l con coefficiente principale positivo tali che

$$\boxed{\int_{-1}^{1} P_l(\xi)P_{l'}(\xi)\,d\xi = \delta_{ll'}\frac{2}{2l+1},}$$

4. tramite la formula di Rodrigues

$$\boxed{P_l(\xi) = \frac{1}{2^l\,l!}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^l (\xi^2-1)^l,}$$

5. tramite la formula di ricorrenza

$$\boxed{(2l+1)\xi P_l(\xi) = (l+1)P_{l+1}(\xi) + lP_{l-1}(\xi), \quad P_0(\xi)=1, \quad P_1(\xi)=\xi.}$$

Noi dimostriamo l'equivalenza tra queste definizioni.

4 $\Rightarrow$ **2**. Consideriamo l'equazione differenziale

$$-\,[(1-x^2)u']'(x) = \lambda u(x), \qquad -1 < x < +1, \tag{II.74}$$

sotto le condizioni iniziali che i limiti di $u(x)$ per $x \to \pm 1$ esistano finiti. Questo problema al contorno ha soluzioni polinomiali per $\lambda = l(l+1)$ dove $l = 0, 1, 2, \cdots$. Verifichiamo se i polinomi

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l\,l!}\left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l, \qquad l = 0, 1, 2, \cdots, \tag{II.75}$$

Confrontando i coefficienti di z^{n+1} nella (II.87) otteniamo $0 = 2c_n - c_{n+1}$, mentre $c_0 = 1$. Quindi $c_n = 2^n$. Infine si arriva alla seguente formula di ortogonalità:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} H_n(z)H_m(z)e^{-z^2}\,dz = 2^n(n!)\sqrt{\pi}\,\delta_{n,m},} \tag{II.88}$$

dove $\delta_{n,m}$ è la delta di Kronecker.

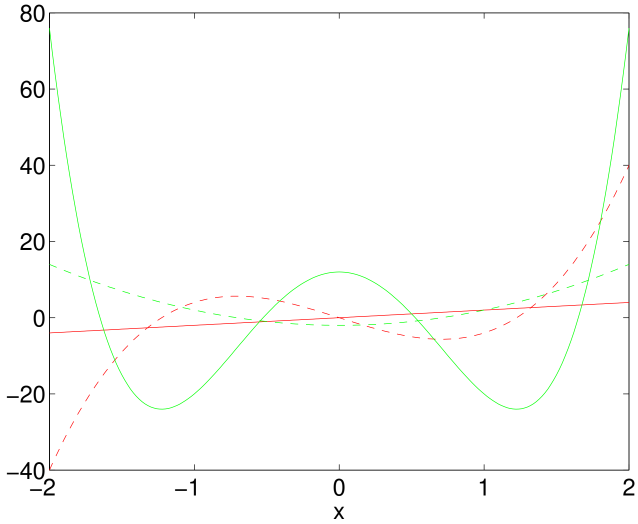

Figura II.4: I polinomi di Hermite di grado 1, 2, 3 e 4. Osserviamo che il numero degli zeri è uguale al grado del polinomio.

Derivando la (II.86) rispetto a z e scrivendo il risultato come un'equazione differenziale per v' si ottiene

$$(v')'' - 2z(v')' + 2(n-1)(v') = 0.$$

Dunque $H_n'(z)$ e $H_{n-1}(z)$ sono soluzioni della stessa equazione differenziale che ha soltanto una singola soluzione polinomiale linearmente indipendente. Di conseguenza, $H_n'(z) = \text{cost.}H_{n-1}(z)$. Siccome $H_n(z) = 2^n\,z^n + \ldots$ e $H_{n-1}(z) = 2^{n-1}\,z^{n-1} + \ldots$, risulta $n\,2^n = \text{cost.}2^{n-1}$ e quindi cost. $= 2n$. In altre parole,

$$\boxed{H_n'(z) = 2n\,H_{n-1}(z).} \tag{II.89}$$

Dalle equazioni (II.87) e (II.89) arriviamo alla formula di ricorrenza

$$\boxed{2zH_n(z) = H_{n+1}(z) + 2nH_{n-1}(z),} \tag{II.90}$$

dove $H_0(z) = 1$ e $H_1(z) = 2z$.

Dimostriamo ora la formula generatrice

$$e^{2zt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!}\, t^n, \qquad t \in \mathbb{C}. \tag{II.91}$$

Infatti, ponendo $F(z,t) = e^{2zt-t^2}$ e scrivendo

$$F(z,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h_n(z)}{n!}\, t^n \tag{II.92}$$

per opportuni coeffienti $h_n(z)$, risultano

$$\frac{\partial F}{\partial z} = 2tF(z,t),$$
$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{h_n'(z)}{n!} t^n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2h_{n-1}(z)}{(n-1)!}\, t^n.$$

Quindi $h_n(z)$ è un polinomio in z di grado n e

$$h_n'(z) = 2nh_{n-1}(z). \tag{II.93}$$

Dalla (II.92) risulta che $h_n(0)$ coincide con la derivata n-esima di e^{-t^2} per $t = 0$, cioè con 0 se n è dispari, e con $(-1)^{n/2}(n!)/(n/2)!$ se n è pari. Dalla formula di Rodriguez (II.85) si vede facilmente che $H_n(0) = h_n(0)$ per $n = 0, 1, 2, \ldots$. Utilizzando le espressioni (II.89) e (II.93) arriviamo alla identità $H_n(z) = h_n(z)$ e quindi alla formula generatrice (II.91).

7 Polinomi di Laguerre

I *polinomi di Laguerre* si definiscono tramite la seguente formula di Rodriguez:

$$\boxed{L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{x^{-\alpha}e^x}{n!} \left(\frac{d}{dx}\right)^n \{x^{n+\alpha}e^{-x}\}.} \tag{II.94}$$

Si dimostra facilmente che la (II.94) rappresenta un polinomio di grado n per ogni $\alpha \in \mathbb{R}$. La regola di Leibnitz ci dà subito la rappresentazione $L_n^{(\alpha)}(x) = (-1)^n(x^n/n!) + \ldots$. Ci limitiamo al caso $\alpha > -1$.

La funzione $w(x) = x^{n+\alpha}e^{-x}$ soddisfa l'equazione differenziale

$$xw' + (x - n - \alpha)w = 0. \tag{II.95}$$

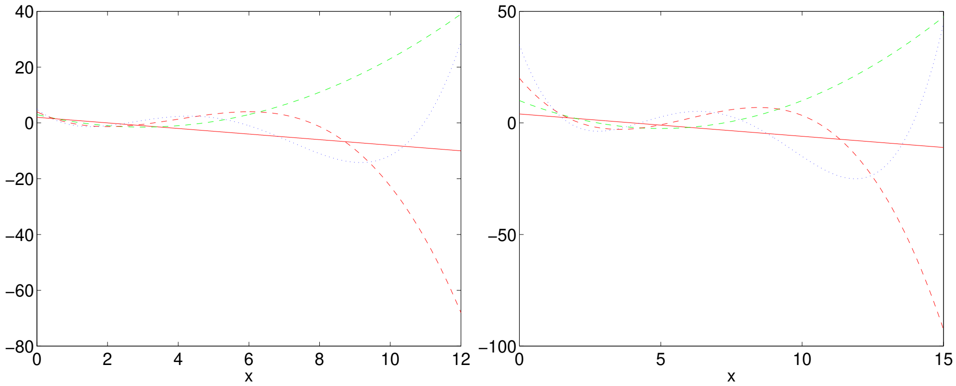

Figura II.5: I polinomi di Laguerre di grado 1, 2, 3 e 4 per $\alpha = 1$ (panello sinistro) e $\alpha = 3$ (panello destro). Osserviamo che il numero degli zeri è uguale al grado del polinomio.

dove $n = 1, 2, 3, \ldots$ e A_n, B_n e C_n sono opportune costanti da determinare. Calcoliamo ora il seguente integrale:

$$
\begin{aligned}
C_n^{(\alpha)} &= \int_0^\infty xL_n^{(\alpha)}(x)L_{n+1}^{(\alpha)}(x)\, x^\alpha e^{-x}\, dx \\
&= \frac{1}{(n+1)!}\int_0^\infty xL_n^{(\alpha)}(x)\left(\frac{d}{dx}\right)^{n+1}\{x^{n+1+\alpha}e^{-x}\}\, dx \\
&= \left[\frac{1}{(n+1)!}\sum_{j=1}^{n+1}(-1)^{j-1}(xL_n^{(\alpha)})^{(j-1)}(x)\left(\frac{d}{dx}\right)^{n+1-j}\{x^{n+1+\alpha}e^{-x}\}\right]_{x=0}^{\infty} \\
&+ \frac{(-1)^{n+1}}{(n+1)!}\int_0^\infty\left(\left(\frac{d}{dx}\right)^{n+1}\{xL_n^{(\alpha)}(x)\}\right)x^{n+1+\alpha}e^{-x}\, dx \\
&= \left[\frac{(-1)^n}{(n+1)!}\sum_{j=1}^{n+1}(xL_n^{(\alpha)})^{(j-1)}(x)(n+1-j)!x^{\alpha+j}e^{-x}L_{n+1-j}^{(\alpha+j)}(x)\right]_{x=0}^{\infty} \\
&+ \frac{(-1)^{n+1}}{(n+1)!}\left(\left(\frac{d}{dx}\right)^{n+1}\{xL_n^{(\alpha)}(x)\}\right)\int_0^\infty x^{n+1+\alpha}e^{-x}\, dx \\
&= -\frac{\Gamma(n+\alpha+2)}{n!},
\end{aligned}
$$

dove abbiamo utilizzato $xL_n^{(\alpha)}(x) = (-1)^n(x^{n+1}/n!) + \ldots$. Poi calcoliamo l'integrale:

$$D_n^{(\alpha)} = \int_0^\infty xL_n^{(\alpha)}(x)^2\, x^\alpha e^{-x}\, dx$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{n!}\int_0^\infty xL_n^{(\alpha)}(x)\left(\frac{d}{dx}\right)^n \{x^{n+\alpha}e^{-x}\}\,dx \\
&= \left[\frac{1}{n!}\sum_{j=1}^n (-1)^{j-1}(xL_n^{(\alpha)})^{(j-1)}(x)\left(\frac{d}{dx}\right)^{n-j}\{x^{n+\alpha}e^{-x}\}\right]_{x=0}^\infty \\
&+ \frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\infty \left(\left(\frac{d}{dx}\right)^n\{xL_n^{(\alpha)}(x)\}\right)x^{n+\alpha}e^{-x}\,dx \\
&= \left[\frac{1}{n!}\sum_{j=1}^n (-1)^{j-1}(xL_n^{(\alpha)})^{(j-1)}(x)(-1)^{n-j}(n-j)!x^{\alpha+j}e^{-x}L_{n-j}^{(\alpha+j)}(x)\right]_{x=0}^\infty \\
&+ \frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\infty \left(\left(\frac{d}{dx}\right)^n\{xL_n^{(\alpha)}(x)\}\right)x^{n+\alpha}e^{-x}\,dx \\
&= \frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\infty ((n+1)!\,x - n(n+\alpha)n!)\,x^{n+\alpha}e^{-x}\,dx \\
&= \frac{(n+1)\Gamma(n+\alpha+2) - n(n+\alpha)\Gamma(n+\alpha+1)}{n!} \\
&= \frac{(2n+1+\alpha)\Gamma(n+\alpha+1)}{n!},
\end{aligned}
$$

dove abbiamo utilizzato $xL_n^{(\alpha)}(x) = (-1)^n((x^{n+1} - n(n+\alpha)x^n)/n!) + \ldots$. Dalla (II.102) e le espressioni per $C_n^{(\alpha)}$ e $D_n^{(\alpha)}$ seguono $A_n^{(\alpha)} = -(n+1)$, $B_n^{(\alpha)} = 2n+1+\alpha$ e $C_n^{(\alpha)} = -(n+\alpha)$. Dunque risulta la formula di ricorrenza

$$
\boxed{(2n+1+\alpha-x)L_n^{(\alpha)}(x) = (n+1)L_{n+1}^{(\alpha)}(x) + (n+\alpha)L_{n-1}^{(\alpha)}(x),} \qquad \text{(II.103)}
$$

dove $L_0^{(\alpha)}(x) = 1$ e $L_1^{(\alpha)}(x) = 1+\alpha-x$.

Per dimostrare la validità della formula generatrice

$$
(1-t)^{-(1+\alpha)}\exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{n=0}^\infty L_n^{(\alpha)}(x)t^n, \qquad |t|<1, \qquad \text{(II.104)}
$$

partiamo dalla serie di funzioni

$$
F(x,t) = (1-t)^{-(1+\alpha)}\exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{n=0}^\infty c_n(x)t^n, \qquad |t|<1, \qquad \text{(II.105)}
$$

dove $c_n(x)\,n!$ è la derivata parziale n-esima di $F(x,t)$ rispetto a t per $t=0$. Sostituendo la serie (II.105) nella equazione

$$
(1-t)^2\frac{\partial F}{\partial t} + [x - (1+\alpha)(1-t)]\,F = 0,
$$

otteniamo le seguenti espressioni per i coefficienti t^n $(n = 1, 2, 3, \ldots)$ e per il coefficiente di t^0:

$$\begin{cases} (n+1)c_{n+1}(x) + (x - 2n - \alpha - 1)c_n(x) + (n+\alpha)c_{n-1}(x), \\ c_1(x) + (x - \alpha - 1)c_0(x) = 0, \end{cases}$$

dove $c_0(x) = 1$. Quindi $c_n(x) = L_n^{(\alpha)}(x)$ per $n = 0, 1, 2, \cdots$ (vedi la (II.103)).

Infine, per esprimere i polinomi di Hermite in quelli di Laguerre riscriviamo i prodotti scalari tra quest'ultimi utilizzando la trasformazione $x = t^2$:

$$\int_0^\infty L_n^{(\alpha)}(x) L_m^{(\alpha)}(x) x^\alpha e^{-x}\, dx = \int_{-\infty}^\infty L_n^{(\alpha)}(t^2) L_m^{(\alpha)}(t^2) |t|^{2\alpha+1} e^{-t^2}\, dt, \tag{II.106}$$

$$\int_0^\infty L_n^{(\alpha)}(x) L_m^{(\alpha)}(x) x^\alpha e^{-x}\, dx = \int_{-\infty}^\infty t L_n^{(\alpha)}(t^2) t L_m^{(\alpha)}(t^2) |t|^{2\alpha-1} e^{-t^2}\, dt. \tag{II.107}$$

Per fare scomparire i fattori $|t|^{2\alpha\pm1}$ in (II.106) e (II.107) scegliamo $\alpha = -\frac{1}{2}$ in (II.106) e $\alpha = \frac{1}{2}$ in (II.107). Quindi $H_{2n}(t)$ è proporzionale a $L_n^{(-\frac{1}{2})}(t^2)$ e $H_{2n+1}(t)$ è proporzionale a $tL_n^{(\frac{1}{2})}(t^2)$. Confrontando i coefficienti principali otteniamo

$$H_{2n}(t) = 2^{2n}\, n! (-1)^n L_n^{(-\frac{1}{2})}(t^2), \tag{II.108}$$

$$H_{2n+1}(t) = 2^{2n+1}\, n! (-1)^n\, t L_n^{(\frac{1}{2})}(t^2). \tag{II.109}$$

8 Polinomi di Chebyshev

I polinomi di Chebyshev di prima specie $T_n(x)$ e di seconda specie $U_n(x)$ si definiscono nel seguente modo:[8]

$$\boxed{T_n(x) = \cos(nt),} \qquad \boxed{U_n(x) = \frac{\sin((n+1)t)}{\sin t},} \tag{II.110}$$

where $x = \cos(t)$. In tal caso $T_n(x)$ e $U_n(x)$ sono polinomi di x di grado n che hanno le seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, \quad T_1(x) = x, \quad\ \ T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x) = 2xT_n(x), \\ U_0(x) &= 1, \quad U_1(x) = 2x, \quad U_{n+1}(x) + U_{n-1}(x) = 2xU_n(x). \end{aligned}$$

[8]Per $x \in \mathbb{R} \setminus [-1, 1]$ si hanno le definizioni alternative $T_n(x) = \cosh(nt)$ e $U_n(x) = \sinh((n+1)t)/\sinh t$ per $x = \cosh t$.

La formula di ricorrenza è facile da verificare:

$$\begin{aligned}
T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x) &= \cos((n+1)t) + \cos((n-1)t) \\
&= 2\cos(t)\cos(nt) = 2xT_n(x), \\
U_{n+1}(x) + U_{n-1}(x) &= \frac{\sin((n+2)t)}{\sin(t)} + \frac{\sin(nt)}{\sin(t)} \\
&= \frac{2\cos(t)\sin((n+1)t)}{\sin(t)} = 2xU_n(x).
\end{aligned}$$

Si vede subito che $-1 \leq T_n(x) \leq +1$ per $x \in [-1,1]$, mentre $T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \ldots$ e $U_n(x) = 2^n x^n + \ldots$ per $n \in \mathbb{N}$.

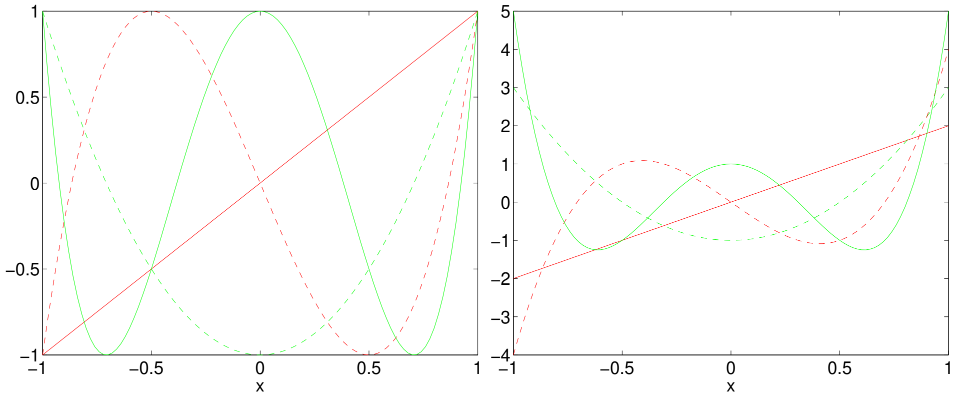

Figura II.6: I polinomi di Chebyshev di prima e seconda specia di grado 1, 2, 3 e 4. Nel panello sinistro si trovano i grafici dei polinomi di Chebyshev di prima specie e nel panello destro quelli di seconda specie. Osserviamo che il numero degli zeri è uguale al grado del polinomio. Inoltre, i polinomi di Chebyshev di prima specie hanno ± 1 come i loro valori estremi.

Sono verificate le relazioni di ortogonalità

$$\begin{aligned}
\int_0^\pi \cos(nt)\cos(mt)\,dt &= \frac{\pi}{2}(1+\delta_{n,0})\delta_{n,m}, \\
\int_0^\pi \sin((n+1)t)\sin(m+1)t)\,dt &= \frac{\pi}{2}\delta_{n,m}.
\end{aligned}$$

Sostituendo $x = \cos(t)$ otteniamo

$$\boxed{\int_{-1}^1 T_n(x)T_m(x)\,\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{2}(1+\delta_{n,0})\delta_{n,m},} \tag{II.111}$$

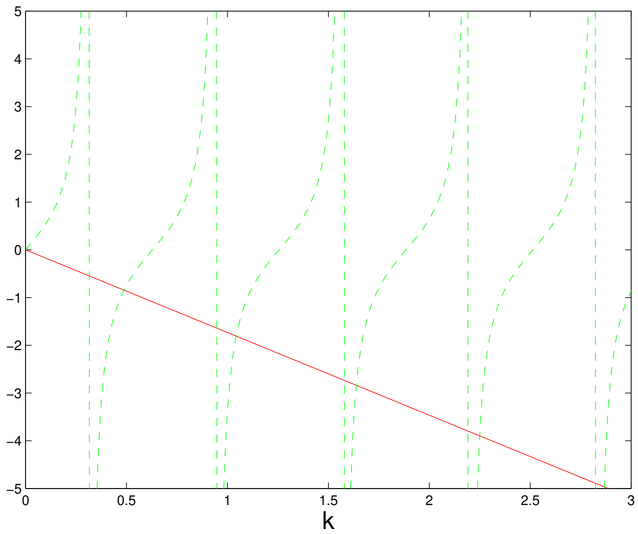

Figura IV.1: Il plot contiene i grafici delle funzioni $y = \tan(xL)$ e $y = -k \tan \alpha$ per $L = 5$ e $\alpha = \frac{\pi}{3}$. Gli autovalori sono i valori di $k > 0$ corrispondenti ai loro punti di intersezione.

con la condizione che $\lambda = 0$ non sia un autovalore dell'operatore L è equivalente all'equazione integrale

$$u(x) = \lambda \int_0^\ell \mathcal{G}(x,y)u(y)\,dy + \int_0^\ell \mathcal{G}(x,y)f(y)\,dy, \qquad u \in L^2(0,\ell), \quad \text{(IV.18)}$$

dove $\mathcal{G}(x,y)$ è la funzione di Green dell'operatore L. Inoltre, le soluzioni u dei problemi equivalenti (IV.17) *e* (IV.18) *appartengono ad $\mathcal{M}_L$.*

Dimostrazione. Se $u(x)$ è una soluzione del problema al contorno (IV.17), allora

$$u(x) = (G[\lambda u + f])(x) = \int_0^\ell \mathcal{G}(x,y)[\lambda u(y) + f(y)]\,dy, \qquad 0 \le x \le \ell,$$

cioè $u(x)$ soddisfa l'equazione integrale (IV.18).

Inversamente, supponiamo che la funzione $u_0 \in L^2(0,\ell)$ soddisfi l'equazione integrale (IV.18). Se G denota l'operatore integrale con nucleo $\mathcal{G}(x,y)$, allora $u_0 = G(\lambda u_0 + f) \in D(\overline{L})$ e $\overline{L}u_0 = \lambda u_0 + f$. Dall'uguaglianza

$$u_0(x) = -\frac{v_1(x)\displaystyle\int_x^\ell v_2(y)[\lambda u_0(y) + f(y)]\,dy + v_2(x)\displaystyle\int_0^x v_1(y)[\lambda u_0(y) + f(y)]\,dy}{p(0)w(0)}$$

segue che $u_0 \in C[0,\ell]$, poichè le funzioni sotto il segno degli integrali appartengono ad $L^1(0,\ell)$. In tal caso segue dall'equazione precedente che $u_0 \in C^1[0,\ell]$ con derivata

$$u_0'(x) = -\frac{v_1'(x)\displaystyle\int_x^\ell v_2(y)[\lambda u_0(y)+f(y)]\,dy + v_2'(x)\displaystyle\int_0^x v_1(y)[\lambda u_0(y)+f(y)]\,dy}{p(0)w(0)}.$$

Da quell'ultima equazione segue che $u_0 \in C^2[0,\ell]$. Inoltre, dalla (IV.6) segue che $u_0(x)$ soddisfa le condizioni al contorno (IV.2). Dunque $u_0 \in \mathcal{M}_L$. Di conseguenza, $Lu_0 = \overline{L}u_0 = \lambda u_0 + f$. □

Applicando il teorema precedente al caso $f = 0$, concludiamo che ogni autofunzione dell'operatore L (in principio appartenente a $D(\overline{L})$) appartiene ad $\mathcal{M}_L$. Inoltre, tutte le autofunzioni appartengono a $C[0,\ell]$. Quindi il problema al contorno per $f = 0$ (cioè, il problema agli autovalori) è equivalente a quello agli autovalori dell'equazione integrale omogenea

$$u(x) = \lambda \int_0^\ell \mathcal{G}(x,y)u(y)\,dy \tag{IV.19}$$

in $C[0,\ell]$ oppure in $L^2(0,\ell)$, a condizione che $\lambda = 0$ non sia autovalore dell'operatore L.

Eliminiamo ora l'ipotesi che $\lambda = 0$ non sia un autovalore dell'operatore L. Per farlo, sia $\mu_0 \in \mathbb{R}$ un numero che non è un autovalore. Allora $\mu = 0$ non è un autovalore del problema di Sturm-Liouville

$$L_1 u \equiv -(pu')' + (q-\mu_0)u = \mu u, \tag{IV.20}$$

$$h_1 u(0) - h_2 u'(0) = 0, \qquad H_1 u(\ell) + H_2 u'(\ell) = 0. \tag{IV.21}$$

Ma $\mathcal{M}_L = \mathcal{M}_{L_1}$ e $D(\overline{L}) = D(\overline{L_1})$. Quindi il problema di Sturm-Liouville (IV.1)-(IV.2) è equivalente all'equazione integrale

$$u(x) = (\lambda - \mu_0)\int_0^\ell \mathcal{G}_1(x,y)u(y)\,dy, \tag{IV.22}$$

dove $\mathcal{G}_1(x,y)$ è la funzione di Green dell'operatore L_1.

1.3 Proprietà degli autovalori e delle autofunzioni

Abbiamo dunque stabilito l'equivalenza tra il problema di Sturm-Liouvville omogeneo ed il problema agli autovalori per l'equazione integrale omogenea

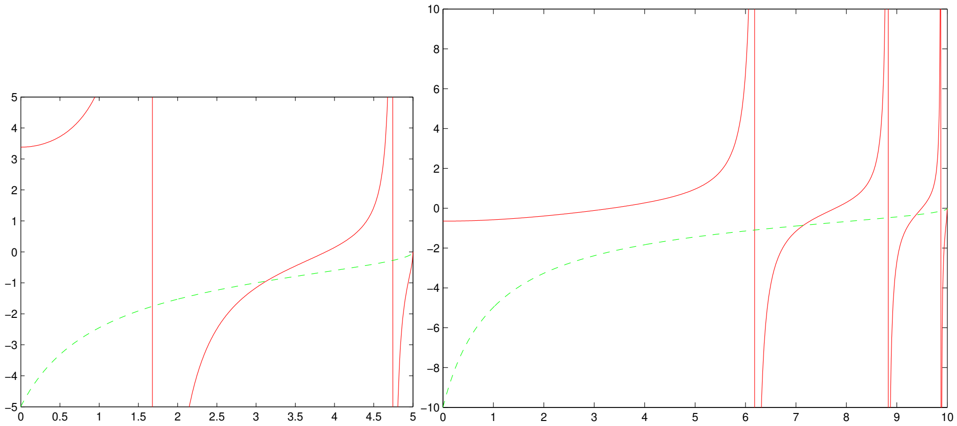

Figura VI.1: Per $l = 0$ e per $r_0\sqrt{V_0} = 5$ (pannello sinistro) o 10 (pannello destro) vengono calcolati graficamente i valori di $z = \kappa r_0$ per cui l'equazione di Schrödinger per la buca sferica ha stato limite.

dove $\int_0^\infty |S(r)|^2 dr < \infty$, $S(0) = 0$[2] e S è di classe C^1 in $r = r_0$. Per $r > r_0$ risulta $S(r) \sim e^{-\kappa r}$. Quindi ci vuole $(S'/S)(r_0) = -\kappa < 0$.

Se $0 \leq V_0 < \kappa^2$, per $0 < r < r_0$ risulta $S(r) \sim \sinh(r\sqrt{\kappa^2 - V_0})$ [grazie alla condizione $S(0) = 0$] per $0 < r < r_0$ e quindi è impossibile avere $(S'/S)(r_0) < 0$. Per $\kappa = \sqrt{V_0}$ risulta $S(r) \sim r$ [grazie alla condizione $S(0) = 0$] e quindi $(S'/S)(r_0) = (1/r_0) > 0$. Di conseguenza, siamo costretti a limitarci al caso $0 < \kappa < \sqrt{V_0}$. In tal caso la condizione $S(0) = 0$ conduce a $S(r) \sim \sin(r\sqrt{V_0 - \kappa^2})$ per $0 < r < r_0$. Dalla condizione di derivabilità continua in $r = r_0$ si trova

$$\sqrt{V_0 - \kappa^2}\,\frac{\cos(r_0\sqrt{V_0 - \kappa^2})}{\sin(r_0\sqrt{V_0 - \kappa^2})} = -\kappa.$$

Per studiare quest'ultima equazione, poniamo $\xi = r_0\sqrt{V_0 - \kappa^2}$ (che appartiene all'intervallo $(0, r_0\sqrt{V_0})$ e scriviamo l'equazione nella forma

$$\frac{\xi}{\tan(\xi)} = -\sqrt{V_0 r_0^2 - \xi^2}, \qquad 0 < \xi < r_0\sqrt{V_0},$$

oppure

$$\tan(\xi) = -\frac{\xi}{\sqrt{V_0 r_0^2 - \xi^2}}, \qquad 0 < \xi < r_0\sqrt{V_0}.$$

Per $n = 1, 2, 3, \ldots$ e $(n - \frac{1}{2})\pi < r_0\sqrt{V_0} \leq (n + \frac{1}{2})\pi$ ci sono n soluzioni ξ di quest'equazione e quindi n stati limite.

[2] Una condizione tecnica mai spiegata dal punto di vista fisico per costringere ad una successione finita di autovalori.

2.2 Oscillatore armonico

a. Utilizzando le coordinate sferiche. In tal caso

$$V(r) = \frac{1}{2}\gamma r^2, \tag{VI.20}$$

dove $\gamma > 0$ è una costante. Ponendo $c = \sqrt{\gamma/8}$ e $R(r) = e^{-cr^2}\phi(r)$, la (VI.11) si riduce all'equazione differenziale

$$\phi''(r) + \left(\frac{2}{r} - 4cr\right)\phi'(r) + \left(k^2 - 6c - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\phi(r) = 0. \tag{VI.21}$$

Sostituendo la serie di potenze

$$\phi(r) = r^\alpha \sum_{s=0}^{\infty} c_s r^s, \tag{VI.22}$$

dove α è un parametro da stabilire, troviamo

$$\begin{aligned}&\sum_{s=0}^{\infty} [\{(\alpha+s)(\alpha+s-1) + 2(\alpha+s) - l(l+1)\}c_s \\ &+ \{(k^2-6c) - 4c(\alpha+s-2)\}c_{s-2}]\, r^{\alpha+s-2} = 0,\end{aligned}$$

dove $c_{-1} = c_{-2} = 0$. Supponendo che il coefficiente di $r^{\alpha-2}$ sia diverso da zero, si trova

$$\alpha(\alpha-1) + 2\alpha - l(l+1) = 0,$$

e quindi $\alpha = l$ oppure $\alpha = -(l+1)$. La condizione al contorno (VI.12) se $r \to 0^+$ implica che $\alpha = l$. In tal caso $c_1 = 0$ e

$$s(s+2l+1)c_s + \{(k^2-6c) - 4c(s+l-2)\}c_{s-2} = 0. \tag{VI.23}$$

Dunque $c_1 = c_3 = c_5 = \cdots = 0$ e

$$c_s = \frac{4c(s+l-2) - (k^2-6c)}{s(s+2l+1)} c_{s-2},$$

dove $s = 2, 4, 6, \cdots$. Il rapporto $c_s r^2/c_{s-2} \sim (4cr^2/s)$ se $s \to +\infty$. Quindi scegliamo k^2 tale che $c_s = 0$ per qualche $s = 2, 4, 6, \cdots$, cioè

$$k^2 = 4c(s+l-2) + 6c, \qquad s = 2, 4, 6, \cdots.$$

Quindi abbiamo trovato gli autovalori e le autofunzioni

$$\begin{cases} k_{l,n}^2 = 2c(2n+3), & l = n, n-2, n-4, \ldots,\ l = 0, 1, 2, \cdots, \\ \psi_{l,n}(r,\theta,\varphi) = e^{-cr^2}\phi_{l,n}(r) Y_l^m(\theta,\varphi), & m = -l, -l+1, \cdots, l, \end{cases} \tag{VI.24}$$

coincide con l'insieme di tutte le λ per cui l'equazione di Schrödinger $\Delta\psi = \lambda\psi$ ha una soluzione limitata non banale. Si può anche mostrare che $\mathcal{L}$ è la chiusura dell'insieme di tutti gli autovalori $\Lambda_n(k)$ dei problemi al contorno per l'equazione di Schrödinger con condizioni k-periodiche. L'insieme $\mathcal{L}$ si chiama l'*insieme di stabilità condizionale*. I sottoinsiemi $\mathcal{L}_n$ sono i cosiddetti *bandi*. I bandi $\mathcal{L}_n$ sono tutti intervalli chiusi, dove i punti interni sono autovalori ma gli estremi dell'intervallo spesso non lo sono.

Se $\lambda \in \mathcal{L}$, esistono soluzioni limitate non banali dell'equazione di Schrödinger del tipo

$$\psi(x) = p(x)e^{ic\cdot x}, \tag{VI.49}$$

dove $p(x) \not\equiv 0$ soddisfa alle condizioni periodiche (VI.39) e c è un vettore reale costante. Soluzioni del tipo (VI.49) si chiamano *onde di Bloch* oppure *funzioni di Bloch*. Tranne per un fattore costante, le onde di Bloch sono le autofunzioni $\psi(x;\boldsymbol{t})$ dell'equazione di Schrödinger con condizioni $\boldsymbol{t}$-periodiche.

Per ogni $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ vale la cosiddetta *formula di Gelfand*:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^2\, dx = \left(\frac{1}{2}\right)^n \sum_{j=0}^{\infty} \int |\alpha_n(\boldsymbol{t})|^2\, d\boldsymbol{t},$$

dove

$$\alpha_j(\boldsymbol{t}) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x)\overline{\psi_j(x;\boldsymbol{t})}\, dx.$$

Utilizzando la formula di Gelfand si può dimostrare che le autofunzioni $\psi_n(x;\boldsymbol{t})$ (per $n = 0, 1, 2, \ldots$ e tutti i $\alpha_j(\boldsymbol{t})$ costituiscono una base dello spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Se il potenziale $V(x)$ è reale, continuo e periodico, allora il corrispondente operatore di Schrödinger $L = -\frac{d^2}{dx^2} + V$ (definito su un opportuno dominio denso in $L^2(\mathbb{R}^n)$) è autoaggiunto e quindi il suo spettro è reale. Lo spettro consiste in autovalori e spettro continuo. Purtroppo, gli autovalori possono, magari, avere una moltiplicità infinita, un fenomeno che non si vede nei problemi unidimensionali. Si può infatti dimostrare la non esistenza di autovalori di moltiplicità finita. Lo spettro è composto di bandi. La distanza tra due bandi consecutivi tende a zero se $n \to \infty$.

Abbiamo ora discusso lo spettro dell'operatore differenziale di Schrödinger in $L^2(\mathbb{R}^n)$. Lo spettro dello stesso operatore in $L^2(A)$ (sotto condizioni $\boldsymbol{t}$-periodiche) oppure in $L^2(A(k))$ (sotto condizioni k-periodiche) è molto diverso e consiste esclusivamente in autovalori di moltiplicità finita.

d. Reticolato reciproco e zona di Brillouin. Siano a_j $(j = 1, 2, 3)$ i tre vettori che generano il parallelogramma periodo A. Sia

$$\boldsymbol{A} = \mathrm{col}(a_1, a_2, a_3)$$

la matrice non singolare con colonne a_1, a_2, a_3. Per $e_1 = (1,0,0)^T$, $e_2 = (0,1,0)^T$ e $e_3 = (0,0,1)^T$ si ha $a_1 = \boldsymbol{A}e_1$, $a_2 = \boldsymbol{A}e_2$ e $a_3 = \boldsymbol{A}e_3$. Ora definiamo $b_j = (\boldsymbol{A}^T)^{-1}e_j$ $(j = 1,2,3)$. Allora

$$(b_k, a_j) = \left((\boldsymbol{A}^T)^{-1}e_k, \boldsymbol{A}e_j\right) = \left(e_k, \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}e_j\right) = (e_k, e_j) = \delta_{k,j}, \qquad j,k = 1,2,3. \tag{VI.50}$$

Il reticolato $\{m_1b_1 + m_2b_2 + m_3b_3 : m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}\}$ si chiama il *reticolato reciproco* $\mathcal{R}$. Per un punto $b \in \mathcal{R}$ qualsiasi abbiamo

$$\exp(2\pi i b \cdot a_j) = 1, \qquad j = 1,2,3. \tag{VI.51}$$

Allora la *zona di Brillouin* (vedi [2]) associata ai vettori a_1, a_2, a_3 è l'insieme

$$Z = \left\{x \in \mathbb{R}^3 : \|x\|_2 \leq \|x - 2\pi b\|_2 \text{ per ogni } 0 \neq b \in \mathcal{R}\right\}, \tag{VI.52}$$

cioè i punti $x \in \mathbb{R}^3$ più vicino all'origine che a tutti i punti dl $2\pi\mathcal{R}$ diversi dall'origine. Per trovare Z si construiscono i non più di 18 piani $\{x \in \mathbb{R}^3 : \|x\|_2 = \|x - 2\pi b\|_2\}$, dove b è uno dei punti $m_1b_1 + m_2b_2 + m_3b_3$ con $m_1, m_2, m_3 \in \{-1,0,1\} \setminus \{(0,0,0)\}$. Questi piani dividono $\mathbb{R}^3$ in domini poliedrali. La zona di Brillouin Z è il poliedro chiuso che contiene l'origine.

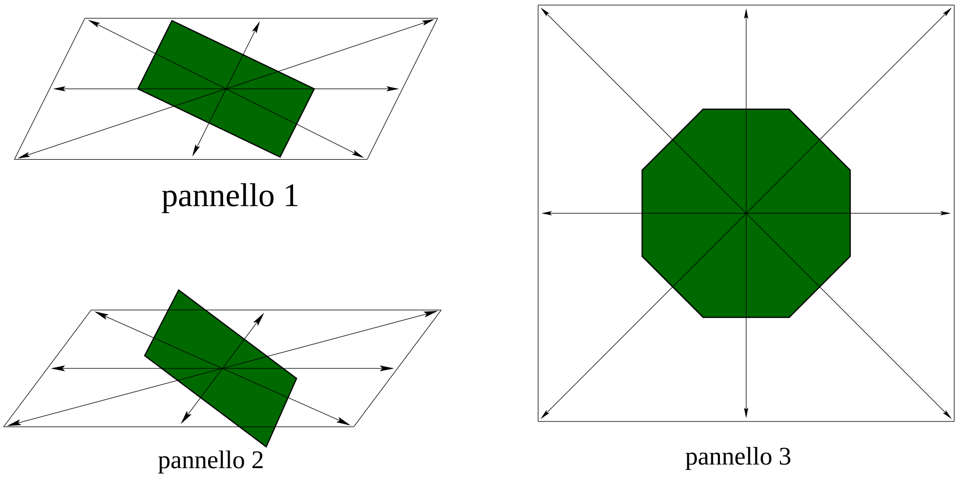

Figura VI.2: La zona di Brillouin in due dimensioni. Le freccie corrispondono ai punti $\pm 2\pi b_1$, $\pm 2\pi b_2$, $\pm 2\pi(b_1 + b_2)$ e $\pm 2\pi(b_1 - b_2)$, dove b_1 e b_2 sono proporzionali a $(5,0)$ e $(1,2)$ nel pannello 1, a $(12,0)$ e $(3,4)$ nel pannello 2, e a $(1,0)$ e $(0,1)$ nel pannello 3.

Per $c \in \mathbb{R}^3$ equidistante da due punti di $2\pi\mathcal{R}$, sia $2\pi b_0$ uno dei punti di $2\pi\mathcal{R}$ più vicino a c. In tal caso $c_0 = c - 2\pi b_0 \in Z$ e $\|c_0\|_2 \leq \|c - 2\pi b\|_2$ per ogni $b \in \mathcal{R}$. D'altra parte, se c non è equidistante da due punti di $2\pi\mathcal{R}$, sia $2\pi b_0$ il