

## Le matrici tridiagonali in matematica e la loro applicazione in fisica Tridiagonal matrices in mathematics and their applications in physics

M. Fanfoni (\*)

*Dipartimento di Fisica, Università di Roma "Tor Vergata"  
Via della Ricerca Scientifica, 1-00133 Roma, Italy*

S. Trapani

*Dipartimento di Matematica, Università di Roma "Tor Vergata"  
Via della Ricerca Scientifica, 1-00133 Roma, Italy*

A. Sgarlata

*Dipartimento di Fisica, Università di Roma "Tor Vergata"  
Via della Ricerca Scientifica, 1-00133 Roma, Italy*

M. Palumbo

*Dipartimento di Fisica, Università di Roma "Tor Vergata"  
Via della Ricerca Scientifica, 1-00133 Roma, Italy*

M. Tomellini

*Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, Università di Roma "Tor Vergata"  
Via della Ricerca Scientifica, 1-00133 Roma, Italy*

**Riassunto.** In questo articolo ci siamo concentrati su alcune applicazioni delle matrici tridiagonali nella fisica. Nella parte preliminare, più prettamente matematica, si è mostrato come determinarne una base ortonormale di autovettori prima in  $\mathbb{C}^n$  poi in  $\mathbb{R}^n$  della generica matrice tridiagonale  $n \times n$ ; il caso  $3 \times 3$  è stato calcolato esplicitamente come esempio. Per quanto concerne le applicazioni fisiche abbiamo descritto il caso di un toro composto di induttanze e condensatori, un anello di masse interagenti con un potenziale elastico ed infine il calcolo degli stati elettronici per un anello di atomi interagenti tra primi vicini noto come modello di Hückel.

**Abstract.** In this paper we have focused on the properties of the tridiagonal matrix in physics. The first paragraph, which is more mathematical, is devoted to show how to determine an orthonormal basis of eigenvectors in  $\mathbb{C}^n$  and then in  $\mathbb{R}^n$  of the generic  $n \times n$  tridiagonal matrix; as an example, the  $3 \times 3$  case has been explicitly calculated. As far as the physics applications are concerned, we have described three cases: the torus made up of inductances and condensers, a ring of masses interacting through an elastic potential and, as last, the electronic states of a ring of nearest-neighbor interacting atoms known as Hückel model.

(\*) E-mail: massimo.fanfoni@roma2.infn.it

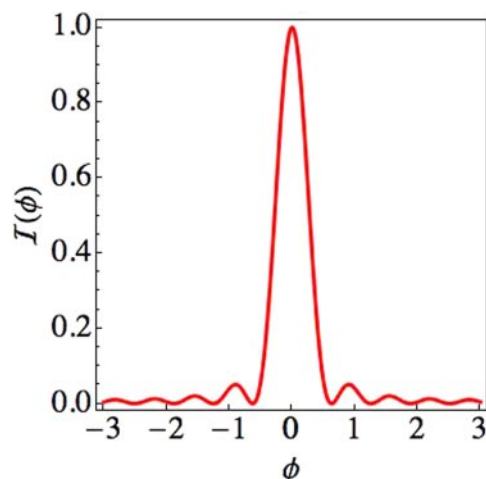


Fig. 1. – funzione polipo.

## 1. Introduzione

La grandezza  $e^{i\varphi}$ , ovvero un numero complesso di modulo unitario che i fisici chiamano *fasore* [1] appare in particolare nella teoria dei circuiti, ma anche in molti altri ambiti della fisica. In ottica, ad esempio, lo si incontra nella teoria della diffrazione. In effetti un'onda piana si scrive  $e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t+\varphi)}$ , dove  $\varphi$  è nota come *costante di fase*, allora sommando  $n$  onde piane isofrequenziali, alla stessa distanza dalla sorgente sfasate una rispetto all'altra della stessa quantità  $\varphi$  si trova

$$(1) \quad I(\varphi) = \sum_{k=0}^{n-1} e^{ik\varphi} = \frac{e^{in\varphi} - 1}{e^{i\varphi} - 1}$$

ed il modulo quadrato di questo segnale, proporzionale all'intensità, è

$$(2) \quad \left| \sum_{k=0}^{n-1} e^{ik\varphi} \right|^2 = \frac{\cos(n\varphi) - 1}{\cos\varphi - 1} = \frac{\sin^2(\frac{n\varphi}{2})}{\sin^2\frac{\varphi}{2}}.$$

Equazione (2) è la funzione *polipo*, il cui andamento, riportato in fig. 1, è ben noto nella teoria della diffrazione da fenditura singola [2].

In questo articolo ci addentreremo in problemi dove l'uso dei fasori è legato alla dinamica di catene chiuse (matematicamente diremmo tori in 1D) di oggetti identici. In particolare analizzeremo tre casi: i) Un toro composto di induttanze e condensatori. ii) Un toro composto di masse identiche interagenti attraverso un potenziale elastico. iii) Il problema elettronico di Hückel per un toro 1D. Questo tipo di problemi è strettamente connesso alle matrici tridiagonali simmetriche  $n \times n$  con  $n \geq 3$  in cui

gli elementi di posto  $1n$  ed  $n1$  sono diversi da zero. Riportiamo qui di seguito la piú semplice di queste

$$(3) \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & \vdots & 1 & 0 & \ddots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & 0 & \dots & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

## 2. Autovettori

Prima di addentrarci nello studio degli autovettori della matrice (eq. (3)), analizzeremo alcune proprietà dei fasori. Sia  $f_k = e^{ik\varphi}$ , dove  $k \in \mathbb{N}$  e  $\varphi = \frac{2\pi}{n}$  con  $n \in \mathbb{N}$ . Evidentemente  $(f_k)^n \equiv f_k^n = 1 \ \forall k \in [1, n]$ ; inoltre  $f_n = e^{in\varphi} = e^{i2\pi} = 1$ , quindi  $k = n$  è equivalente a  $k = 0$ .  $f_k$  per  $k \in [1, n]$  fornisce  $n$  fasori simmetricamente disposti sulla circonferenza di raggio unitario, essi sono le  $n$  soluzioni dell'equazione ciclotomica  $f_k^n - 1 = 0$ , ossia  $f_k = \sqrt[n]{1}$ .

L'insieme  $F = \{f_k\}$  possiede le seguenti proprietà:

$$\forall k, k', k'' \in [1, n]$$

1.  $f_k f_{k'} = f_{k+k'}$ ;
2.  $f_k f_{k'} f_{k''} = f_{k+k'} f_{k''} = f_{k+k''} f_{k'} = f_{k'+k''} f_k$  (proprietà distributiva);
3.  $f_k f_{k'} = f_{k'} f_k$  (proprietà commutativa);
4.  $f_n f_k = f_k f_n = f_k$  (esiste l'elemento neutro);
5.  $f_k f_{-k} = f_{-k} f_k = f_1$  (esiste l'elemento inverso).

Cosa è  $f_{-k}$ ? Per rispondere determiniamo:  $f_{n-k} = e^{i\frac{2\pi}{n}(n-k)} = e^{i2\pi} e^{-i\frac{2\pi}{n}k} = f_{-k}$ ; quindi l'inverso di  $f_k$  è  $f_{n-k}$ . Le proprietà 1-5 definiscono  $F$  come un gruppo abeliano [3]. Il gruppo  $F_n \equiv (f_1, f_2, \dots, f_n)$  fornisce una base per lo spazio vettoriale  $\mathbb{C}^n$ . In particolare per  $h$  intero compreso tra 0 ed  $n - 1$  verificheremo che i seguenti

vettori,

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{e}}_0 &= \frac{1}{\sqrt{n}} \{1, 1, \dots, 1\}, \\
 \hat{\mathbf{e}}_1 &= \frac{1}{\sqrt{n}} \{f_1, f_1^2, f_1^3, \dots, f_1^n\}, \\
 &\vdots \\
 \hat{\mathbf{e}}_h &= \frac{1}{\sqrt{n}} \{f_1^h, f_1^{2h}, f_1^{3h}, \dots, f_1^{nh}\} \\
 &\vdots \\
 \hat{\mathbf{e}}_{n-1} &= \frac{1}{\sqrt{n}} \{f_1^{n-1}, f_1^{2(n-1)}, f_1^{3(n-1)}, \dots, f_1^{n(n-1)}\},
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

formano un insieme completo di autovettori ortonormali della matrice eq. (3).

Cominciamo col notare che se  $z$  è un numero complesso diverso da 1 tale che  $z^n = 1$ , allora

$$\sum_{j=0}^{n-1} z^j = 0,
 \tag{5}$$

da cui si ottiene anche

$$\sum_{j=1}^n z^j = z \left( \sum_{j=0}^{n-1} z^j \right) = 0.
 \tag{6}$$

Equazione (5) segue subito dalla fattorizzazione  $x^n - 1 = (x - 1) \sum_{j=0}^{n-1} x^j = \frac{x-1}{x} \sum_{j=1}^n x^j$ . Analogamente vale  $\sum_{j=1}^n z^{-j} = \sum_{j=1}^n (z^{-1})^j = 0$ . Da quanto sopra otteniamo subito che i vettori  $\{\hat{\mathbf{e}}_h\}$  formano una base ortonormale rispetto al prodotto hermitiano canonico di  $\mathbb{C}^n$ . Infatti  $(\hat{\mathbf{e}}_h, \hat{\mathbf{e}}_h) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f_1^{hj} \overline{f_1^{hj}} = \frac{1}{n} n = 1$ , la notazione  $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ , indica il prodotto hermitiano canonico, mentre la barra in testa indica il complesso coniugato. Inoltre, se  $1 \leq h_1 \neq h_2 \leq n$ , abbiamo  $(\hat{\mathbf{e}}_{h_1}, \hat{\mathbf{e}}_{h_2}) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f_1^{h_2 j} \overline{f_1^{h_1 j}} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f_1^{(h_2-h_1)j} = 0$  grazie all'eq. (6), dove si è posto  $z = f_1^{(h_2-h_1)}$ . Vediamo ora quali sono le regole che devono soddisfare gli autovettori della matrice tridiagonale eq. (3). Per semplicità riscriviamo  $\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2$ , dove

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}
 \tag{7}$$

e

$$(8) \quad \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

anche l'equazione agli autovalori si separa  $\mathbf{A}\mathbf{v} = \mathbf{A}_1\mathbf{v} + \mathbf{A}_2\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ . L'azione di  $\mathbf{A}_1$  ed  $\mathbf{A}_2$  e la loro somma sono esplicitamente

$$(9) \quad \mathbf{A}_1 \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_n \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ v_1 \end{pmatrix},$$

$$(10) \quad \mathbf{A}_2 \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_2 \\ v_1 + v_3 \\ v_2 + v_4 \\ \vdots \\ v_{j-1} + v_{j+1} \\ \vdots \\ v_{n-2} + v_n \\ v_{n-1} \end{pmatrix},$$

da cui si ricava

$$(11) \quad \mathbf{A} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_n \\ 0 \\ \vdots \\ v_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v_2 \\ v_1 + v_3 \\ \vdots \\ v_{n-1} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}.$$

In altri termini l'equazione  $\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$  equivale al sistema di equazioni

$$(12) \quad \begin{cases} v_2 + v_n = \lambda v_1, \\ v_1 + v_{n-1} = \lambda v_n, \\ v_{j-1} + v_{j+1} = \lambda v_j, \quad 2 \leq j \leq n-1. \end{cases}$$

Mostriamo ora che l'insieme  $\{\hat{\mathbf{e}}_n\}$  è una base di autovettori di  $\mathbf{A}$ . La componente  $j$ -esima del vettore  $\sqrt{n}\hat{\mathbf{e}}_n$  è  $f_1^{hj}$ . Affiché siano autovettori di  $\mathbf{A}$  esse devono soddisfare

l'eq. (12). La terza equazione del sistema di equazioni (12) diviene  $f_1^{(j-1)h} + f_1^{(j+1)h} = \lambda f_1^{jh}$ , da cui dividendo per  $f_1^{jh}$  si ottiene

$$(13) \quad \lambda = \lambda_h = f_1^{-h} + f_1^h = 2 \cos \left( \frac{2h\pi}{n} \right),$$

mentre la prima e la seconda equazione del sistema (12) sono, rispettivamente

$$(14) \quad f_1^{2h} + f_1^{nh} = \lambda f_1^h,$$

$$(15) \quad f_1^h + f_1^{(n-1)h} = \lambda f_1^{nh},$$

che sono ambedue verificate poiché  $f_1^n = 1$  e grazie alla eq. (13). Segue dunque che  $\hat{\mathbf{e}}_h$  è autovettore di  $\mathbf{A} \nabla h$ . L'insieme  $\{\hat{\mathbf{e}}_h\}$  è una base ortonormale di autovettori di  $\mathbf{A}$  in  $\mathbb{C}^n$ , nel prosieguo mostreremo come ricavare una base ortonormale reale di autovettori di  $\mathbf{A}$ . Cominciamo col notare che  $\lambda_h = 2$  se e soltanto se  $h = 0$ , quindi l'autovalore  $\lambda_0$  ha molteplicità algebrica 1, perciò esso ha anche molteplicità geometrica 1 e una base reale del relativo autospazio  $V_0$  è data dal vettore reale  $\hat{\mathbf{e}}_0$ . D'altra parte  $\lambda_h = -2$  se e soltanto se  $n$  è pari ed  $h = \frac{n}{2}$ . Quindi anche in questo caso la molteplicità algebrica e geometrica dell'autovalore  $\lambda_{n/2}$  è uguale ad 1 e il vettore reale  $\hat{\mathbf{e}}_{n/2} = \frac{1}{\sqrt{n}}(e^{i\pi}, e^{i2\pi}, \dots) = \frac{1}{\sqrt{n}}(-1, 1, -1, 1, \dots, 1)$  è una base reale per il relativo autospazio  $V_{n/2}$ . Inoltre se  $h \leq k$  compresi tra 0 ed  $n-1$  si ha  $\lambda_h = \lambda_k$  se e solo se  $h = k$  oppure  $h = n - k$ . Perciò per  $0 < h < \frac{n}{2}$  consideriamo i due vettori  $\mathbf{u}_h^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{e}}_h + \hat{\mathbf{e}}_{n-h})$  e  $\mathbf{u}_h^{(2)} = \frac{-i}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{e}}_h - \hat{\mathbf{e}}_{n-h})$  e riscriviamoli in forma trigonometrica:

$$\mathbf{u}_h^{(1)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{n}} \left\{ \cos \left[ \left( \frac{2\pi}{n} \right) h \right], \cos \left[ \left( \frac{2\pi}{n} \right) 2h \right], \cos \left[ \left( \frac{2\pi}{n} \right) 3h \right], \dots, \cos \left[ \left( \frac{2\pi}{n} \right) nh \right] \right\}$$

e

$$\mathbf{u}_h^{(2)} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{n}} \left\{ \sin \left[ \left( \frac{2\pi}{n} \right) h \right], \sin \left[ \left( \frac{2\pi}{n} \right) 2h \right], \sin \left[ \left( \frac{2\pi}{n} \right) 3h \right], \dots, \sin \left[ \left( \frac{2\pi}{n} \right) nh \right] \right\}.$$

Quindi i vettori  $\mathbf{u}_h^{(1)}$  e  $\mathbf{u}_h^{(2)}$  sono reali, essi sono inoltre di norma unitaria e tra loro ortogonali, infatti  $(\mathbf{u}_h^{(1)}, \mathbf{u}_h^{(1)}) = \frac{1}{2}([\hat{\mathbf{e}}_h + \hat{\mathbf{e}}_{n-h}], [\hat{\mathbf{e}}_h + \hat{\mathbf{e}}_{n-h}]) = \frac{1}{2}([\hat{\mathbf{e}}_h + \tilde{\hat{\mathbf{e}}}_h], [\hat{\mathbf{e}}_h + \tilde{\hat{\mathbf{e}}}_h]) = \frac{1}{2}([\hat{\mathbf{e}}_h, \hat{\mathbf{e}}_h] + [\tilde{\hat{\mathbf{e}}}_h, \tilde{\hat{\mathbf{e}}}_h]) = 1$ , similmente  $(\mathbf{u}_h^{(2)}, \mathbf{u}_h^{(2)}) = 1$  ed infine  $(\mathbf{u}_h^{(1)}, \mathbf{u}_h^{(2)}) = \frac{i}{2}([\hat{\mathbf{e}}_h + \tilde{\hat{\mathbf{e}}}_h], [\hat{\mathbf{e}}_h - \tilde{\hat{\mathbf{e}}}_h]) = 0$ . Va da sé che  $\mathbf{u}_h^{(1)}$  e  $\mathbf{u}_h^{(2)}$  sono entrambi autovettori di  $\mathbf{A}$  con autovalore  $\lambda_h$ . Notiamo che se  $n$  è dispari il vettore  $\hat{\mathbf{e}}_{n/2}$  non compare. Ricordiamo inoltre che per una matrice reale e simmetrica gli autovettori corrispondenti ad autovalori distinti sono sempre ortogonali. Ricapitolando, la base reale cercata si ottiene secondo la seguente regola: se  $n = 2k + 1$  per  $h \in [1, k]$ , gli autospazi  $V_h$  sono di dimensione 2 e sono generati da  $\mathbf{u}_h^{(1)}$  e  $\mathbf{u}_h^{(2)}$ , c'è poi l'autospazio  $V_0$  di dimensione 1 generato da  $\hat{\mathbf{e}}_0$ . Tutti questi vettori messi insieme costituiscono una base ortonormale reale di autovettori di  $\mathbf{A}$ . Se  $n = 2k + 2$  per  $h \in [1, k]$  ci sono autospazi  $V_h$  di dimensione 2 che sono generati da  $\mathbf{u}_h^{(1)}$  e  $\mathbf{u}_h^{(2)}$ , mentre l'autospazio  $V_{k+1}$  di dimensione 1 è

generato da  $\hat{\mathbf{e}}_{k+1}$  e l'autospazio  $V_0$  di dimensione 1 è generato da  $\hat{\mathbf{e}}_0$ . Anche in questo caso mettendo insieme tutti questi vettori si ottiene una base ortonormale reale di autovettori di  $\mathbf{A}$ . Perciò se consideriamo più in generale una matrice tridiagonale della forma

$$\mathbf{A}(t, \alpha) = \begin{pmatrix} \alpha & t & 0 & \dots & 0 & t \\ t & \alpha & t & \dots & \dots & 0 \\ 0 & t & \alpha & t & \dots & 0 \\ 0 & \vdots & t & \alpha & \ddots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \ddots & t \\ t & 0 & \dots & \dots & t & \alpha \end{pmatrix},$$

con  $t$  diverso da 0, allora abbiamo  $\mathbf{A}(t, \alpha) = t\mathbf{A} + \alpha\mathbf{I}$  dove  $\mathbf{I}$  è la matrice identità  $n \times n$ , quindi gli autovettori di  $\mathbf{A}(t, \alpha)$  coincidono con quelli di  $\mathbf{A}$  mentre i corrispondenti autovalori sono rispettivamente  $t\lambda_h + \alpha$  con  $h$  intero compreso tra 0 ed  $n - 1$ .

Segue l'esempio esplicito per  $n = 3$ .

### 3. Caso $3 \times 3$

$$(16) \quad \mathbf{A}^{(3 \times 3)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Gli autovalori ed una base ortonormale reale di autovettori della eq. (16) sono rispettivamente  $\{2, -1, -1\}$  e

$$(17) \quad \left\{ \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right\}, \left\{ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}(-1/2, -1/2, 1) \right\}, \left\{ \sqrt{2}(1/2, -1/2, 0) \right\} \right\}.$$

In forma matriciale la eq. (17) si scrive

$$(18) \quad \mathbf{R}^{(3 \times 3)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 \end{pmatrix}.$$

Inoltre in accordo alla eq. (4)

$$(19) \quad \begin{aligned} \hat{\mathbf{e}}_0 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\{1, 1, 1\}, \\ \hat{\mathbf{e}}_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left\{e^{i\frac{2\pi}{3}}, e^{-i\frac{2\pi}{3}}, 1\right\}, \\ \hat{\mathbf{e}}_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left\{e^{-i\frac{2\pi}{3}}, e^{i\frac{2\pi}{3}}, 1\right\}. \end{aligned}$$

Sviluppando gli esponenziali della eq. (19) ed usando la notazione matriciale si ha

$$(20) \quad \mathbf{C}^{3 \times 3} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{3} \left( \frac{-\sqrt{3}}{2} + \frac{3i}{2} \right) & \frac{1}{3} \left( \frac{-\sqrt{3}}{2} - \frac{3i}{2} \right) \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{3} \left( \frac{-\sqrt{3}}{2} - \frac{3i}{2} \right) & \frac{1}{3} \left( \frac{-\sqrt{3}}{2} + \frac{3i}{2} \right) \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}.$$

Esiste allora la matrice  $\mathbf{M}^{3 \times 3}$  tale che

$$(21) \quad \mathbf{R}^{3 \times 3} \mathbf{M}^{3 \times 3} = \mathbf{C}^{3 \times 3}.$$

Grazie alla eq. (20) ed alla eq. (18) si trova

$$(22) \quad \mathbf{M}^{3 \times 3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Notiamo che  $\mathbf{M}^{3 \times 3}$  e  $\mathbf{C}^{3 \times 3}$  sono matrici unitarie mentre  $\mathbf{R}^{3 \times 3}$  è una matrice reale ortogonale.

## 4. Applicazioni fisiche

### 4.1. Anello di induttanze e condensatori

Consideriamo una catena chiusa di induttanze (tutte uguali) e capacità (tutte uguali) connesse come in fig. 2 in cui è mostrata l' $m$ -esima maglia. Sulla base del riferimento riportato in fig. 2 ed alla direzione delle correnti, vale la seguente equazione:

$$(23) \quad (i_m - i_{m-1})X_C + i_m X_L - (i_{m+1} - i_m)X_C = 0.$$

$X_C$  ed  $X_L$  sono rispettivamente la reattanza capacitiva e la reattanza induttiva.

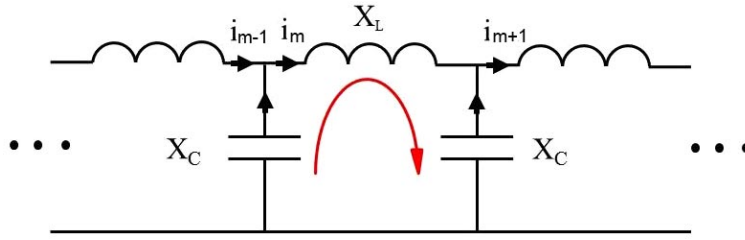


Fig. 2. – Toro 1D composto da induttanze e condensatori.

Dalla eq. (23) si giunge facilmente a

$$(24) \quad i_{m+1} - 2ai_m + i_{m-1} = 0,$$

dove  $a = 1 + 1/2X_L/C$  e  $X_L/C = X_L/X_C = \frac{\omega L}{-1/\omega C} = -\omega^2 LC$ . Provando per la eq. (24) una soluzione del tipo  $i_m^k = (e^{im\varphi})^k$ , si trova  $\cos(k\varphi) - 1 = \frac{1}{2}X_L/C$  che si può anche scrivere  $-4\sin^2(\frac{k\varphi}{2}) = -\omega^2 LC$ , da cui la funzione di dispersione dell'anello

$$(25) \quad \omega_k = \frac{2}{\sqrt{LC}} \left| \sin\left(\frac{k\varphi}{2}\right) \right|.$$

Il sistema (23) è un sistema omogeneo ed ammette soluzioni non banali se e solo se il determinante dei termini noti è nullo. La matrice dei termini noti è tridiagonale ed ha la seguente forma:

$$(26) \quad \mathbf{B}_{n \times n} = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & -2a & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 1 & -2a & 1 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & 1 & -2a & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

#### 4.2. Anello di masse elasticamente interagenti

Analizzeremo adesso un anello composto di  $n$  masse che interagiscono tra loro attraverso un potenziale elastico che si fa sentire solo tra i primi vicini [4] (fig. 3).

L' $m$ -esima massa interagisce con la massa  $(m - 1)$ -esima ed  $(m + 1)$ -esima; l'equazione del moto è

$$(27) \quad m\partial_t^2 s_m = k(s_{m+1} - s_m) - k(s_m - s_{m-1}) = k(s_{m+1} - 2s_m + s_{m-1}),$$

$$\partial_t^2 s_m = \frac{k}{m}(s_{m+1} - 2s_m + s_{m-1}),$$

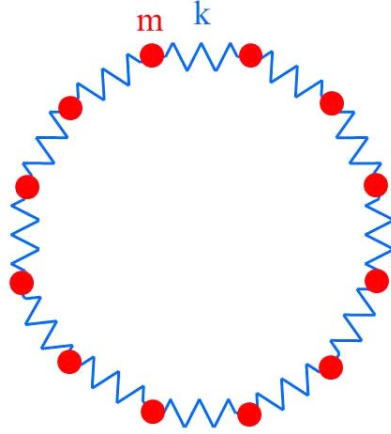


Fig. 3. – Toro 1D composto da masse interagenti elasticamente.

$s_n$  è lo spostamento dalla posizione di equilibrio dell'  $m$ -sima massa. Posto

$$(28) \quad s_m = \tilde{s}_m e^{-i\omega t},$$

si ha

$$(29) \quad 0 = \tilde{s}_{(m+1)} - 2 \left( 1 - \frac{\omega^2 m}{2k} \right) \tilde{s}_m + \tilde{s}_{(m-1)} = \tilde{s}_{m+1} - 2b\tilde{s}_m + \tilde{s}_{m-1}.$$

Qui  $b = 1 - \frac{\omega^2 m}{2k}$  e l' eq. (29) è equivalente alla eq. (23). A questo punto proviamo una soluzione  $\tilde{s}_m^p = e^{inp\varphi}$ ; si trova  $e^{inp\varphi}(e^{ip\varphi} - 2b + e^{-ip\varphi}) = 0$  da cui  $\cos(p\varphi) - b = 0$  che conduce  $\omega^2 = \frac{2k}{m}(\cos(p\varphi) - 1)$ , ovvero  $\omega^2 = \frac{4k}{m} \sin^2\left(\frac{p\varphi}{2}\right)$ ,

$$(30) \quad \omega_p = \left| \sqrt{\frac{4k}{m}} \sin\left(\frac{p\varphi}{2}\right) \right|.$$

Equazione (30) è in tutto simile alla eq. (25) e il grafico del modulo della funzione  $\sin\left(\frac{p\varphi}{2}\right)$  con  $\varphi = \frac{2\pi}{n}$  nell' intervallo  $p \in \left[-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}\right]$ , per il caso  $n = 30$ , è riportato in fig. 4.

Ricapitolando:  $a = 1 - \frac{LC}{2}\omega^2$ ;  $b = 1 - \frac{1}{2}\frac{m}{k}\omega^2$ . Allora in generale definiamo la grandezza  $q = 1 - \frac{g}{2}\omega^2$  che conduce alla soluzione

$$(31) \quad \omega_k = \pm \sqrt{\frac{4}{g}} \sin\left(\frac{k\varphi}{2}\right).$$

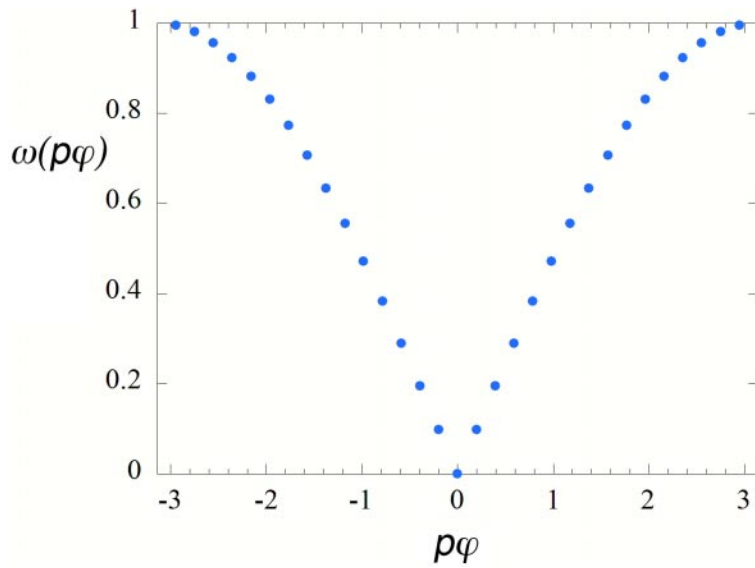


Fig. 4. – Rappresentazione della funzione di dispersione.

La matrice associata, di dimensione  $n$ , è

$$\begin{aligned}
 (32) \quad \mathbf{T} &= \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & -2q & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 1 & -2q & 1 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & 1 & -2q & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & -2 & 1 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 1 & -2 & 1 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & 1 & -2 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & g\omega^2 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & g\omega^2 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & 0 & g\omega^2 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

in forma compatta

$$T_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} + g\omega^2\delta_{\mu\nu} = 0.$$

Questa è la matrice dei termini noti del sistema  $T_{\mu\nu}x_\nu = 0$ , la soluzione del quale ha senso se  $\text{Det}[H_{\mu\nu} + g\omega^2\delta_{\mu\nu}] = 0$ ; ma quest'ultima equazione equivale alla diagonalizzazione della matrice  $H_{\mu\nu}$  in cui gli autovalori sono  $\lambda = -g\omega^2$  e per la eq. (31),  $\lambda_k = -4\sin^2(\frac{k\varphi}{2})$ , con  $\varphi = \frac{2\pi}{n}$  e  $k = [-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}]$ .

### 4.3. Modello di Hückel

Si tratta di un modello per il calcolo degli stati elettronici delle molecole con doppi legami alternati [5]. In buona sostanza sono molecole in cui è presente l'ibridizzazione  $sp^2$  [5] (dunque ibridizzazione planare) ovvero dove uno dei tre orbitali di simmetria  $p$  non viene coinvolto nel processo di ibridizzazione, per tradizione il  $p_z$ . Il modello fornisce gli stati pieni ad energia più alta (stati di valenza) e gli stati vuoti ad energia più bassa del sistema, tutti dovuti all'interazione tra gli elettroni presenti sugli orbitali  $p_z$  (uno per orbitale). L'anello paradigmatico di questo modello è quello del benzene ( $C_6H_6$ ). Il modello è piuttosto rozzo; si tratta di un LCAO (Linear Combination of Atomic Orbital) [5] con interazione tra primi vicini in cui la matrice di sovrapposizione è la matrice identità. Inoltre, sebbene si stia parlando di un problema a molti elettroni (più in generale, molti corpi), l'equazione di Schrödinger associata è di singolo elettrone il cui spettro viene riempito dagli elettroni del problema con un semplice processo di Aufbau.

Consideriamo  $n$  atomi tutti uguali disposti su un anello e per i quali l'hamiltoniana media di singola particella è

$$(33) \quad \hat{h} = -\frac{\nabla^2}{2} + V(\mathbf{r}).$$

La funzione d'onda della particella è  $\psi(\mathbf{r})$  e se indichiamo con  $u_k(\mathbf{r})$  le funzioni di sito (ovvero le funzioni d'onda degli stati  $p_z$ ) le possiamo usare come base su cui sviluppare la  $\psi(\mathbf{r})$  (LCAO), cioè possiamo scrivere  $\psi(\mathbf{r}) = \sum_k c_k u_k(\mathbf{r})$ . Il modello parametrizza gli integrali notevoli:

$$(34) \quad \begin{aligned} \langle u_k | \hat{h} | u_k \rangle &= \alpha, \\ \langle u_k | \hat{h} | u_{k\pm m} \rangle &= t\delta_{m1} \quad (\text{integrale di salto}) \\ \langle u_k | u_j \rangle &= \delta_{kj} \quad (\text{integrale di sovrapposizione}). \end{aligned}$$

Perché il sistema dia soluzioni non banali il determinante della matrice dei coefficienti ha da essere nullo, ovvero  $\text{Det}(\hat{h} - E\delta_{\mu\nu}) = 0$  dove

$$(35) \quad \hat{h} - E\hat{I} = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & t \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \alpha - E & t & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & t & \alpha - E & t & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \alpha & t & \alpha - E & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ t & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = 0,$$

da cui l'equazione ricorsiva

$$\begin{aligned} c_{k-1}t - 2c_k \frac{(\alpha - E)}{2} + c_{k+1}t &= 0, \\ c_{k-1} - 2c_k \frac{(\alpha - E)}{2t} + c_{k+1} &= 0. \end{aligned}$$

Si tenga presente che  $c_n \equiv c_0$ ,  $c_{n-1} \equiv c_{-1}$  e che  $k \in \{0, n-1\}$ ; ponendo  $c_k^p = (e^{ik\phi})^p$ , con  $\phi = \frac{2\pi}{n}$  e  $p \in \{0, n-1\}$ , si ha  $e^{-ip\phi} - 2\frac{(\alpha-E)}{2t} + e^{ip\phi} = \cos p\phi - \frac{\alpha-E}{2t} = 0$ , da cui

$$(36) \quad E_p = \alpha - 2t \cos(p\phi),$$

ci sono  $n$  autovalori e all'autovalore  $E_p$  corrisponde l'autovettore  $c_k^p$  o l'autofunzione

$$(37) \quad \psi_p(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{n-1} c_k^p u_k(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{n-1} e^{ikp\phi} u_k(\mathbf{r}).$$

Va detto che nella fisica dei cristalli, ad esempio, l'infinità del cristallo viene simulata attraverso l'introduzione delle cosiddette "Condizioni al contorno di Born-Von Karman" [4]. Quest'ultime altro non sono che la riduzione ad un anello (nelle tre dimensioni) del cristallo in esame.

#### 4.4. Il teorema di Bloch (caso 1D)

Un reticolo monodimensionale è composto di atomi equispaziati (sia  $a$  la distanza tra due atomi prim vicini) e si estende tra meno infinito e più infinito (di fatto è isomorfo all'insieme dei numeri interi relativi  $\mathbb{Z}$ ). Vediamo che forma deve avere una funzione definita su un reticolo composto di  $n$  siti in cui siano imposte le condizioni periodiche di Born-Von Karman.

Definiamo l'operatore di traslazione discreta  $\hat{T}$  tale che  $\hat{T}\psi(m) \equiv \psi(m+1) = \lambda\psi(m)$  allora

$$(38) \quad \hat{T}^n\psi(m) = \psi(m+n) = \psi(m) = \lambda^n\psi(m).$$

Segue che  $\lambda^n = 1$  e quindi  $\lambda = \sqrt[n]{1} = e^{ik\alpha}$ , ove  $k = 0, 1, \dots, n-1$ . Nella eq. (38) è stata usata la condizione di Born-Von Karman. Poniamo  $\alpha = \frac{2\pi}{n}$ .

Esistono  $n$  funzioni che etichettiamo con  $k$ :  $\psi_k(n)$ ;

$$(39) \quad \hat{T}\psi_k(m) = \psi_k(m+1) = e^{ik\alpha}\psi_k(m).$$

Dalla eq. (39)  $\psi_k(m+1)e^{-ik\alpha(m+1)} = e^{-ik\alpha m}\psi_k(m) = u_k(m)$  e  $u_k(m) = u_k(m+1)$  è periodica.

In definitiva la forma delle funzioni è

$$(40) \quad \psi_k(m) = u_k(m)e^{ik\alpha m},$$

che è equivalente alla forma delle funzioni ottenute per il modello di Hückel (eq. (37)); inoltre, usando il simbolismo della sez. 2, l'eq. (40) si può riscrivere

$$\psi_k(m) = u_k(m)f_k^m.$$

Le autofunzioni dell'operatore di traslazione discreto, in questo caso le  $\psi_k(m)$ , sono dette *funzioni di Bloch*.

### Bibliografia

- [1] REPETTO M. e LEVA S., *ELETTROTECNICA: elementi di teoria ed esercizi* (Città Studi, Torino) 2014.
- [2] ROSSI B., *Ottica* (Tamburini, Milano) 1971.
- [3] HAMERMESH M., *Group Theory and its application to physical problems* (Addison-Wesley, Palo Alto, London) 1964.
- [4] GROSSO G. e PASTORI G., *Solid State Physics* (Academic Press) 2000.
- [5] ATKINS P. W. e FRIEDMAN R. S., *Meccanica Quantistica Molecolare* (Zanichelli, Bologna) 2004.