

Fisica Quantistica 2

Prof. S. Forte, a.a. 2024-25

Leonardo Cerasi¹, Lucrezia Bioni

GitHub repository: [LeonardoCerasi/notes](#)

¹leo.cerasi@pm.me

Indice

Indice	ii
Introduzione	1
I Meccanica Quantistica in più Dimensioni	2
1 Sistemi Quantistici Multidimensionali	3
1.1 Spazio prodotto diretto	3
1.2 Sistemi multidimensionali	3
1.2.1 Coordinate cartesiane	4
1.3 Separabilità	5
1.3.1 Problemi separabili in coordinate cartesiane	5
1.3.2 Hamiltoniane separabili	5
1.4 Problema dei due corpi quantistico	7
1.4.1 Trasformazioni lineari di coordinate	8
1.5 Problemi centrali	8
2 Momento Angolare	12
2.1 Momento angolare e rotazioni	12
2.2 Proprietà	13
2.2.1 Espressione esplicita	13
2.2.2 Commutatori	13

Introduzione

La fisica quantistica è una teoria stocastica, non probabilistica, poiché permette di prevedere la probabilità che il sistema si trovi in un determinato stato e non le probabilità dei singoli eventi: questi avvengono con la misura, la quale fa cambiare l'informazione sul sistema in modo discontinuo. L'evoluzione temporale dello stato del sistema è data da trasformazioni unitarie che permettono di prevedere lo stato futuro del sistema.

La generalizzazione della meccanica quantistica unidimensionale a sistemi in più dimensioni e con più corpi introduce una notevole complessità nella trattazione che porta a sviluppi formali legati ai principi della fisica quantistica.

La teoria quantistica si sviluppa in direzioni diverse in base a due tipi di sistemi:

- sistemi riducibili, i quali vengono ricondotti a problemi più semplici a bassa dimensionalità (analogamente alla separazione del problema dei due corpi nel problema del baricentro e in quello del moto relativo), introducendo di conseguenza nuove osservabili associate alle trasformazioni possibili del sistema (studio dei gruppi di simmetria del sistema);
- sistemi irriducibili, che invece non possono essere semplificati per via di fenomeni come l'entanglement (*Verschränkung*) che emergono nei sistemi a più corpi.

La trattazione di sistemi complessi può essere semplificata in vari modi:

- limite classico: formulazione completamente diversa della meccanica quantistica introdotta da Feynman e basata sul concetto di integrale di cammino (path integral), permette di capire la relazione tra fisica classica e quantistica;
- metodi perturbativi: permettono di trovare soluzioni approssimate e non esatte; in particolare, si usano due classi di metodi perturbativi in base al sistema considerato:
 - indipendenti dal tempo, importanti per lo studio degli stati legati (es. atomo di elio);
 - dipendenti dal tempo, utilizzati per studiare gli stati del continuo (es. teoria d'urto).

Parte I

Meccanica Quantistica in più Dimensioni

Sistemi Quantistici Multidimensionali

1.1 Spazio prodotto diretto

Per definire formalmente i sistemi quantistici in più dimensioni, è necessario definire prima il prodotto diretto tra spazi di Hilbert.

Definizione 1.1.1. Dati due spazi di Hilbert \mathcal{H} e \mathcal{K} con basi $\{|e_i\rangle\}$ e $\{|\tilde{e}_j\rangle\}$, si definisce il loro prodotto diretto come $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K} := \{|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |e_i\rangle \otimes |\tilde{e}_j\rangle\}$. In questo spazio si definisce il prodotto scalare tra due vettori $|\psi_1\rangle = |e_{i_1}\rangle \otimes |\tilde{e}_{j_1}\rangle$ e $|\psi_2\rangle = |e_{i_2}\rangle \otimes |\tilde{e}_{j_2}\rangle$ come $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle e_{i_1}|e_{i_2}\rangle \langle \tilde{e}_{j_1}|\tilde{e}_{j_2}\rangle$.

Per semplificare la scrittura, si adotta la notazione $|e_i\rangle \otimes |e_j\rangle \equiv |e_i e_j\rangle$ (o si sottintende \otimes).

Si noti che osservabili relative a spazi diversi sono sempre compatibili.

In generale, il generico $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ non è scrivibile come prodotto diretto $|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\tilde{\phi}\rangle$, con $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ e $|\tilde{\phi}\rangle \in \mathcal{K}$, poiché in generale non è detto che c_{ij} sia fattorizzabile in α_i e $\tilde{\alpha}_j$: in questo caso si dice che lo stato è entangled.

Definizione 1.1.2. Uno stato $|\psi\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ si dice entangled se non è fattorizzabile.

Esempio 1.1.1. Dati due qubit, uno stato entangled è $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$, dato che il generico stato fattorizzabile è $(a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle) = ac|00\rangle + ad|01\rangle + bc|10\rangle + bd|11\rangle$.

La probabilità $P_{ij} = |c_{ij}|^2$ è detta probabilità congiunta: in generale essa non è il prodotto delle probabilità dei singoli eventi per i fenomeni di interferenza quantistica, i quali rendono tale probabilità dipendente dallo stato dell'intero sistema.

1.2 Sistemi multidimensionali

Per generalizzare la meccanica quantistica in d dimensioni, si introduce l'operatore posizione $\hat{\mathbf{x}}$:

$$\hat{\mathbf{x}} := \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \vdots \\ \hat{x}_d \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

Ciascuna componente di questo vettore è un operatore hermitiano che agisce su uno spazio di Hilbert, mentre il vettore $\hat{\mathbf{x}}$ agisce sul loro prodotto diretto $\mathcal{H} := \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_d$. Su ciascuno spazio \mathcal{H}_j viene definita la base delle posizioni da $\hat{x}_j |x_j\rangle = x_j |x_j\rangle$, dunque la base delle posizioni in \mathcal{H} sarà $|\mathbf{x}\rangle := |x_1\rangle \otimes \cdots \otimes |x_d\rangle$: data $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, la sua rappresentazione sulla base delle posizioni è

$\langle \mathbf{x} | \psi \rangle \equiv \psi(\mathbf{x})$, con $\psi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$, il cui modulo quadro dà una densità di probabilità d -dimensionale $dP_{\mathbf{x}} = |\psi(\mathbf{x})|^2 d^d \mathbf{x}$.

In questo caso, l'entanglement consiste nel fatto che, in generale, $\psi(\mathbf{x}) \neq \psi_1(x_1) \dots \psi_d(x_d)$.

Tale formalismo è generalizzabile al caso di n corpi in d dimensioni, nel qual caso si ha uno spazio prodotto diretto di nd spazi di Hilbert.

Esempio 1.2.1. Nel caso di 2 corpi in 3 dimensioni, si ha:

$$\hat{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \hat{x}_{1,1} \\ \hat{x}_{1,2} \\ \hat{x}_{1,3} \\ \hat{x}_{2,1} \\ \hat{x}_{2,2} \\ \hat{x}_{2,3} \end{pmatrix}$$

In questo sistema, la funzione d'onda è $\langle \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$.

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle = \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1.2)$$

La $\delta^{(d)}$ è il prodotto di d delte di Dirac ed è definita da $\int_{\mathbb{R}^d} d^d \mathbf{x} \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}')$ come distribuzione.

1.2.1 Coordinate cartesiane

Analogamente al caso monodimensionale, per definire l'operatore impulso si considera una traslazione spaziale; le componenti del vettore operatore impulso $\hat{\mathbf{p}}$ sulla base delle posizioni sono definite da:

$$\langle \mathbf{x} | \hat{p}_j | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(\mathbf{x}) \quad (1.3)$$

In forma vettoriale, è possibile scrivere:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla \quad (1.4)$$

A questo punto, è facile definire le autofunzioni dell'impulso tali per cui $\hat{\mathbf{p}} |\mathbf{k}\rangle = \hbar \mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle$:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \equiv \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (1.5)$$

Il fatto che operatori su spazi diversi commutino tra loro implica che:

$$[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 \quad \forall j, k = 1, \dots, d \quad (1.6)$$

Dal punto di vista matematico, questo è ovvio per il lemma di Schwarz (assumendo una well-behaved ψ), mentre da quello fisico ciò esprime il fatto che traslazioni lungo assi diversi commutano tra loro: ciò non è scontato, infatti ad esempio le rotazioni rispetto ad assi diversi non commutano (dunque le componenti del momento angolare non commuteranno).

È facile vedere che $\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$, dunque è possibile definire l'Hamiltoniana del sistema (e con essa la sua evoluzione temporale):

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \quad (1.7)$$

Ricordando che $\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, si ottiene l'equazione di Schrödinger sulla base delle coordinate:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (1.8)$$

1.3 Separabilità

Nel caso di sistemi non-entangled, è possibile separare il problema multidimensionale in d problemi monodimensionali e scrivere la soluzione come prodotto delle soluzioni dei problemi ridotti.

1.3.1 Problemi separabili in coordinate cartesiane

Proposizione 1.3.1. *In coordinate cartesiane, condizione sufficiente affinché il problema sia separabile è che:*

$$V(\mathbf{x}) = V_1(x_1) + \dots + V_d(x_d) \quad (1.9)$$

In tal caso, l'Hamiltoniana del sistema è somma di d sotto-Hamiltoniane (e di conseguenza lo è anche l'evoluzione temporale):

$$\mathcal{H}_j = \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}_j) \quad (1.10)$$

dunque la determinazione dello spettro dell'Hamiltoniana si riduce a d problemi unidimensionali.

Proposizione 1.3.2. *Data un'Hamiltoniana separabile \mathcal{H} , detti $\langle x_j|\psi_{k_j}\rangle = \psi_{k_j}(x_j)$ gli autostati della j -esima sotto-Hamiltoniana $\mathcal{H}_j|\psi_{k_j}\rangle = E_{k_j}|\psi_{k_j}\rangle$, sono autostati di \mathcal{H} gli stati prodotto:*

$$\langle \mathbf{x}|\psi_{k_1\dots k_d}\rangle = \psi_{k_1\dots k_d}(\mathbf{x}) \equiv \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_d}(x_d) \quad (1.11)$$

Dimostrazione. Si vede facilmente che:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}|\mathcal{H}|\psi_{k_1\dots k_d}\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{k_1}(x_1)}{\partial x_1^2} \psi_{k_2}(x_2) \dots \psi_{k_d}(x_d) + V_1(x_1) \psi_{k_1}(x_1) \psi_{k_2}(x_2) \dots \psi_{k_d}(x_d) + \\ &\quad \vdots \\ &\quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{k_d}(x_d)}{\partial x_d^2} \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_{d-1}}(x_{d-1}) + V_d(x_d) \psi_{k_d}(x_d) \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_{d-1}}(x_{d-1}) \\ &= E_{k_1} \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_d}(x_d) + \dots + E_{k_d} \psi_{k_1}(x_1) \dots \psi_{k_d}(x_d) \\ &= E_{k_1\dots k_d} \psi_{k_1\dots k_d}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

dove è stata definita $E_{k_1\dots k_d} \equiv E_{k_1} + \dots + E_{k_d}$. □

1.3.2 Hamiltoniane separabili

Si può vedere che, per un'Hamiltoniana separabile, le autofunzioni 1.11 sono le più generali. Innanzitutto, il commutatore canonico in d dimensioni si generalizza come:

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad [\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0 \quad [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 \quad (1.12)$$

Da ciò segue che le Hamiltoniane 1.10 commutano tra loro, dunque sono diagonalizzabili simultaneamente e gli autovalori della loro somma sono la somma dei loro autovalori: di conseguenza, gli autostati di dell'Hamiltoniana del sistema sono tutti e soli quelli trovati nella Prop. 1.3.2.

Questo argomento è facilmente generalizzabile: si consideri un'Hamiltoniana generica \mathcal{H} che è possibile separare come somma di Hamiltoniane commutanti tra loro:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \cdots + \mathcal{H}_d \quad [\mathcal{H}_j, \mathcal{H}_k] = 0 \quad (1.13)$$

Le \mathcal{H}_j sono allora diagonalizzabili simultaneamente:

$$\mathcal{H}_j |k_j\rangle = E_{k_j} |k_j\rangle \quad (1.14)$$

e tali autostati formano una base per gli autostati di \mathcal{H} :

$$|k_1 \dots k_d\rangle = |k_1\rangle \otimes \cdots \otimes |k_d\rangle \quad (1.15)$$

mentre i suoi autostati sono:

$$E_{k_1 \dots k_d} = E_{k_1} + \cdots + E_{k_d} \quad (1.16)$$

Esempio 1.3.1. Un esempio tipico di problema tridimensionale separabile è la buca parallelepipedale di potenziale:

$$V_j(x_j) = \begin{cases} 0 & |x_j| < a_j \\ \infty & |x_j| \geq a_j \end{cases}$$

Ricordando la forma esplicita delle autofunzioni:

$$\langle x_j | \psi_{n_j} \rangle = \begin{cases} A_{n_j} \cos(k_{n_j} x_j) & n_j = 2n + 1 \\ B_{n_j} \sin(k_{n_j} x_j) & n_j = 2n \end{cases} \quad k_{n_j} = \frac{n_j \pi}{2a_j}$$

è facile ricavare lo spettro dell'Hamiltoniana:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_{n_1}^2 + k_{n_2}^2 + k_{n_3}^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} + \frac{n_3^2}{a_3^2} \right)$$

Se i valori degli a_j sono commensurabili, è possibile che lo spettro presenti delle degenerazioni: ad esempio, se si considerano $a_1 = a_2 = a_3 \equiv a$, lo stato fondamentale E_{111} non presenta degenerazioni, ma già il primo stato eccitato è triplamente degenere: $E_{211} = E_{121} = E_{112}$.

Esempio 1.3.2. Un esempio di particolare importanza è l'oscillatore armonico tridimensionale: con lo stesso ragionamento di prima, si trova lo spettro:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \left(n_1 \omega_1 + n_2 \omega_2 + n_3 \omega_3 + \frac{1}{2} (\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) \right)$$

Nel caso in cui $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 \equiv \omega$, si ha un potenziale a simmetria sferica $\hat{V}(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{\mathbf{x}}^2$ e lo spettro diventa:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \equiv \hbar \omega \left(N + \frac{3}{2} \right)$$

È possibile calcolare la degenerazione dell' N -esimo stato eccitato: n_1 può essere scelto in $N + 1$ modi, quindi n_2 può essere scelto in $N + 1 - n_1$ e, una volta scelti n_1 ed n_2 , n_3 è fissato, dunque la degenerazione $d(N)$ è:

$$d(N) = \sum_{n_1=0}^N (N + 1 - n_1) = (N + 1)^2 - \frac{1}{2}N(N + 1) = \frac{1}{2}(N + 1)(N + 2)$$

1.4 Problema dei due corpi quantistico

Il problema dei due corpi è un sistema in cui due corpi interagiscono tramite un potenziale che dipende solo dalla loro separazione:

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + \hat{V}(\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2) \quad (1.17)$$

Le variabili canoniche soddisfano la relazione di commutazione:

$$[\hat{x}_{j,a}, \hat{p}_{k,b}] = i\hbar\delta_{jk}\delta_{ab} \quad [\hat{x}_{j,a}, \hat{x}_{k,b}] = 0 \quad [\hat{p}_{j,a}, \hat{p}_{k,b}] = 0 \quad (1.18)$$

dove $a, b = 1, 2$ e $j, k = 1, 2, 3$.

Il problema è separabile definendo le coordinate relative e quelle del baricentro:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} &:= \hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2 \\ \hat{\mathbf{R}} &:= \frac{m_1\hat{\mathbf{x}}_1 + m_2\hat{\mathbf{x}}_2}{m_1 + m_2} \end{aligned} \quad (1.19)$$

A queste vanno associate i rispettivi impulsi congiunti:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} &:= \frac{m_2\hat{\mathbf{p}}_1 - m_1\hat{\mathbf{p}}_2}{m_1 + m_2} \\ \hat{\mathbf{P}} &:= \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 \end{aligned} \quad (1.20)$$

È pura algebra verificare che le variabili così definite soddisfino le relazioni di commutazione canoniche.

È altrettanto facile verificare che l'Hamiltoniana si può scrivere come:

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1.21)$$

dove sono state definite la massa totale $M \equiv m_1 + m_2$ e quella ridotta $\mu^{-1} = m_1^{-1} + m_2^{-1}$. Questa Hamiltoniana è manifestamente separabile come $\mathcal{H} = \mathcal{H}_B(\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}) + \mathcal{H}_r(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_B(\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}) &= \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} \\ \mathcal{H}_r(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad [\mathcal{H}_B, \mathcal{H}_r] = 0 \quad (1.22)$$

Lo spettro è facilmente determinabile poiché sono due problemi unidimensionali.

È importante capire che la scelta di variabili canoniche trasformate non è casuale, ma dettata dalla separabilità del termine potenziale, che fissa $\hat{\mathbf{r}}$, dalle relazioni di commutazione, che per ogni scelta di $\hat{\mathbf{R}}$ fissano gli impulsi coniugati, e dalla separabilità del termine cinetico che va a fissare di conseguenza $\hat{\mathbf{R}}$ poiché rende univoca la scelta degli impulsi.

1.4.1 Trasformazioni lineari di coordinate

È possibile definire una generica trasformazione lineare di coordinate tramite una matrice di trasformazione $M \in \mathbb{R}^{d \times d}$:

$$\hat{\mathbf{x}}' = M\hat{\mathbf{x}} \quad (1.23)$$

ovvero in componenti $\hat{x}'_j = \sum_{k=1}^d M_{jk} \hat{x}_k$.

Proposizione 1.4.1. *Data una trasformazione lineare di coordinate M , gli impulsi coniugati trasformano secondo:*

$$\hat{\mathbf{p}}'^\top = \hat{\mathbf{p}}^\top M^{-1} \quad (1.24)$$

Dimostrazione. Considerando $\hat{\mathbf{p}}'^\top = \hat{\mathbf{p}}^\top N$, in componenti $\hat{p}'_j = \sum_{k=1}^d \hat{p}_k N_{kj}$, dalle relazioni di commutazione canoniche si ha:

$$[\hat{x}'_j, \hat{p}'_k] = \sum_{m=1}^d \sum_{n=1}^d M_{jm} N_{nk} \underbrace{[\hat{x}_m, \hat{p}_n]}_{i\hbar\delta_{mn}} = i\hbar \sum_{n=1}^d M_{jn} N_{nk} \doteq i\hbar\delta_{jk} \iff MN = I_d$$

□

È possibile ricavare la trasformazione 1.24 anche partendo dai principi, costruendo gli impulsi coniugati come generatori di traslazioni spaziali. Nella rappresentazione delle coordinate:

$$\langle \hat{\mathbf{x}} | \hat{\mathbf{p}} | \hat{\mathbf{x}}' \rangle = -i\hbar \nabla_{\mathbf{x}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1.25)$$

Con abuso di notazione si può scrivere $\hat{p}_j = -i\hbar\partial_j$, dunque la relazione di trasformazione è data dalla derivata composta:

$$\hat{p}'_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'_j} = -i\hbar \sum_{k=1}^d \frac{\partial x_k}{\partial x'_j} \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (1.26)$$

Dall'Eq. 1.23 si ha $\frac{\partial x'_j}{\partial x_k} = M_{jk}$, dunque $\frac{\partial x_k}{\partial x'_j} = M_{kj}^{-1}$, ovvero l'Eq. 1.24.

1.5 Problemi centrali

Un generico problema centrale è quello determinato da un'Hamiltoniana del tipo:

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\|\hat{\mathbf{x}}\|) \quad (1.27)$$

Ovvero il potenziale dipende solo dal modulo dell'operatore posizione.

Analogamente al caso classico, l'obiettivo è quello di separare il moto angolare da quello radiale; per fare ciò, è preferibile lavorare in coordinate sferiche:

$$\begin{cases} x_1 = r \sin \theta \cos \phi \\ x_2 = r \sin \theta \sin \phi \\ x_3 = r \cos \theta \end{cases} \quad (1.28)$$

In queste coordinate, si ha $V = V(r)$.

In meccanica classica, dall'identità $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 = \|\mathbf{a}\|^2 \|\mathbf{b}\|^2 - \|\mathbf{a} \times \mathbf{b}\|^2$ si può scomporre il termine cinetico in parte radiale e parte angolare, ottenendo $\mathbf{p}^2 = p_r^2 + \frac{1}{r^2} \mathbf{L}^2$. Quantisticamente, ciò non è così immediato poiché $\hat{\mathbf{x}}$ e $\hat{\mathbf{p}}$ non commutano.

Per capire come procedere, conviene prima dimostrare l'identità vettoriale utilizzata.

Proposizione 1.5.1. *Dati $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^3$, si ha $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 = \|\mathbf{a}\|^2 \|\mathbf{b}\|^2 - \|\mathbf{a} \times \mathbf{b}\|^2$.*

Dimostrazione. Ricordando che $(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} a_j b_k$, si ha:

$$\|\mathbf{a} \times \mathbf{b}\|^2 = \sum_{i,j,k,l,m=1}^3 \epsilon_{ijk} a_j b_k \epsilon_{ilm} a_l b_m = \sum_{i,j,k,l,m=0}^3 (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) a_j b_k a_l b_m = \|\mathbf{a}\|^2 \|\mathbf{b}\|^2 - \|\mathbf{a} \times \mathbf{b}\|^2$$

□

È necessario, inoltre, definire p_r ed \mathbf{L} in ambito quantistico:

$$\tilde{p}_r := \frac{1}{r} \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \quad (1.29)$$

dove il tilde sta ad indicare il fatto che \tilde{p}_r non è un operatore hermitiano, dunque non è associato ad un'osservabile fisica.

Proposizione 1.5.2. *Nella rappresentazione delle coordinate, si ha:*

$$\tilde{p}_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \quad (1.30)$$

Dimostrazione. Nella rappresentazione delle coordinate:

$$\begin{aligned} \tilde{p}_r &= -i\hbar \sum_{j=1}^3 \frac{x_j}{r} \partial_j = -i\hbar \sum_{j=0}^3 \frac{x_j}{r} \left(\partial_j r \frac{\partial}{\partial r} + \partial_j \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \partial_j \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ &= -i\hbar \sum_{j=1}^3 \frac{x_j}{r} \frac{x_j}{r} \frac{\partial}{\partial r} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \end{aligned}$$

dove si è usato il dato che $\sum_{j=1}^3 x_j \partial_j \theta = \sum_{j=1}^3 x_j \partial_j \phi$ ($\nabla \theta, \nabla \phi \perp \mathbf{x} = r \mathbf{e}_r$) e $\partial_j r = \frac{x_j}{r}$. □

Proposizione 1.5.3. $[\hat{r}, \tilde{p}_r] = i\hbar$.

Dimostrazione. $[\hat{r}, \tilde{p}_r] \psi = -i\hbar \left(r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial r} r \right) \psi = i\hbar \psi$. □

Si evince quindi che \tilde{p}_r è canonicamente coniugato a \hat{r} , ovvero genera le traslazioni lungo la coordinata radiale.

A questo punto, è possibile definire l'analogo quantistico di \mathbf{L} :

$$\hat{\mathbf{L}} := \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (1.31)$$

A priori, non si può dire che questo sia l'operatore quantistico associato al momento angolare, ma si dimostrerà essere tale. Sulla base delle coordinate:

$$L_j = -i\hbar \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (1.32)$$

Proposizione 1.5.4. $[\hat{r}, \hat{L}_j] = 0$.

Dimostrazione. Basta dimostrare che $\hat{\mathbf{L}}$ non ha componenti radiali:

$$\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^3 \hat{x}_i \hat{L}_i = \sum_{i,j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{x}_i \hat{x}_j \partial_k = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} [\hat{x}_i, \hat{x}_j] \partial_k = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \delta_{ij} \partial_k = 0$$

□

Utilizzando lo stesso procedimento usato per dimostrare la Prop. 1.5.1:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 &= \sum_{i,j,k,a,b=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{iab} \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_a \hat{p}_b = \sum_{i,j,k,a,b=1}^3 (\delta_{ja} \delta_{kb} - \delta_{jb} \delta_{ka}) \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_a \hat{p}_b = \sum_{j,k=1}^3 (\hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_k \hat{p}_j) \\ &= \sum_{j,k=1}^3 (\hat{x}_j \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{p}_k + \hat{x}_j [\hat{p}_k, \hat{x}_j] \hat{p}_k - \hat{x}_j \hat{x}_k \hat{p}_k \hat{p}_j - \hat{x}_j [\hat{p}_k, \hat{x}_k] \hat{p}_j) \\ &= \hat{\mathbf{x}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - i\hbar \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \sum_{j,k=1}^3 (-\hat{x}_k \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{p}_j + i\hbar \delta_{kk} \hat{x}_j \hat{p}_j) \\ &= \hat{\mathbf{x}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - i\hbar \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} - \sum_{j,k=1}^3 (\hat{x}_k \hat{p}_k \hat{x}_j \hat{p}_j + \hat{x}_k [\hat{x}_j, \hat{p}_k] \hat{p}_j) + 3i\hbar \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ &= \hat{\mathbf{x}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 + 2i\hbar \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} - (\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 - i\hbar \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{x}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 + i\hbar \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \end{aligned}$$

Rispetto al caso classico è presente un termine in più. Ricordando che $\hat{\mathbf{x}}^2 \equiv \hat{r}^2$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}^2 &= \frac{1}{r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 + \frac{1}{r^2} (\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2 - \frac{i\hbar}{r^2} \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 - \frac{\hbar^2}{r^2} r \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hbar^2}{r^2} r \frac{\partial}{\partial r} \\ &= \frac{1}{r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 - \frac{\hbar^2}{r^2} r \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} + 1 \right) - \frac{\hbar^2}{r^2} r \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 - \frac{\hbar^2}{r^2} r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{r^2} r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hbar^2}{r^2} r \frac{\partial}{\partial r} \end{aligned}$$

Data la Prop. 1.5.4, è indifferente l'ordine in cui si applicano $\frac{1}{r^2}$ e $\hat{\mathbf{L}}^2$, dunque:

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{r^2} \quad (1.33)$$

È possibile ricondurre l'Hamiltoniana in Eq. 1.27 alla sua forma separata classica hermitianizzando l'operatore \tilde{p}_r :

$$\tilde{p}_r^\dagger = \hat{\mathbf{p}}^\dagger \cdot \frac{\hat{\mathbf{x}}^\dagger}{\hat{r}^\dagger} = \hat{\mathbf{p}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{x}}}{\hat{r}} = -i\hbar \sum_{i=1}^3 \partial_i \frac{x_i}{r} = -i\hbar \sum_{i=1}^3 \left(\frac{x_i}{r} \partial_i + \partial_i \left(\frac{x_i}{r} \right) \right) = \tilde{p}_r - \frac{2i\hbar}{\hat{r}}$$

Ricordando che l'hermitianizzazione avviene tramite $\hat{a} = \frac{1}{2}(\tilde{a} + \tilde{a}^\dagger)$, si definisce l'impulso radiale autoaggiunto come:

$$\hat{p}_r := \tilde{p}_r - \frac{i\hbar}{\hat{r}} \quad (1.34)$$

ovvero, sulla base delle coordinate:

$$\hat{p}_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (1.35)$$

Per esprimere $\hat{\mathbf{p}}^2$ in funzione di \hat{p}_r , si calcola:

$$\begin{aligned} \hat{p}_r^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} + \frac{1}{r^2} \right) \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} + \frac{1}{r^2} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \end{aligned}$$

Si trova dunque un'espressione che coincide con quella classica:

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hat{r}^2} \quad (1.36)$$

L'Hamiltoniana si separa come:

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \hat{V}(\hat{r}) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2m\hat{r}^2} \quad (1.37)$$

Questa Hamiltoniana non è separata in senso proprio, poiché i due termini non agiscono su spazi separati; tuttavia, si vede che $[\hat{\mathbf{L}}^2, \mathcal{H}] = 0$, dunque sono diagonalizzabili simultaneamente: una volta determinato lo spettro di $\hat{\mathbf{L}}^2$, il problema diventa unidimensionale (radiale).

In questo caso, quindi, le autofunzioni non sono esprimibili come prodotto di autofunzioni su spazi separati, ma la semplificazione del problema deriva da una simmetria: la simmetria per rotazioni.

Momento Angolare

2.1 Momento angolare e rotazioni

Caso classico Per il Th. di Noether, associate alle invarianze per rotazioni attorno ai tre assi coordinati si hanno tre cariche di Noether conservate.

Si considerino $\mathbf{x} = (r \cos \phi, r \sin \phi) \equiv (x_1, x_2)$ nel piano $z = 0$ ed una rotazione attorno all'asse z di un angolo infinitesimo ε : questa causa uno spostamento $\delta \mathbf{x}$ dato da:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{x} &= (r \cos(\phi + \varepsilon), r \sin(\phi + \varepsilon)) - (r \cos \phi, r \sin \phi) \\ &= (-r \varepsilon \sin \phi, r \varepsilon \cos \phi) + o(\varepsilon) = \varepsilon (-x_2, x_1) + o(\varepsilon) \end{aligned}$$

Quindi, per una generica rotazione attorno ad un asse dato dal versore \mathbf{n} si ha:

$$\delta x_i = \varepsilon \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} n_j x_k \iff \delta \mathbf{x} = \varepsilon \mathbf{n} \times \mathbf{x} \quad (2.1)$$

Nel caso di una rotazione attorno al j -esimo asse coordinato $\delta x_i^{(j)} = \varepsilon \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} x_k$, quindi la carica di Noether associata è:

$$q_j := \sum_{i=1}^3 \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \delta x_i^{(j)} = \varepsilon \sum_{i,k=1}^3 \epsilon_{jki} x_k p_i = \varepsilon L_j \quad (2.2)$$

Dunque l'invarianza per rotazioni attorno ad un asse ha come quantità conservata associata la componente del momento angolare lungo tale asse.

Caso quantistico Bisogna innanzitutto verificare che $\hat{\mathbf{L}}$ definito in Eq. 1.31 sia effettivamente il momento angolare, ovvero il generatore delle rotazioni (a meno di un fattore \hbar): questo equivale a verificare che l'operatore \hat{R}_ε , definito come:

$$\hat{R}_\varepsilon = e^{i \frac{\varepsilon}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}} = \mathbf{I}_3 + i \frac{\varepsilon}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} + o(\varepsilon) \quad (2.3)$$

realizzi una rotazione di angolo infinitesimo ε attorno all'asse \mathbf{n} , ovvero:

$$\langle \mathbf{x} | \hat{R}_\varepsilon | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x} + \delta \mathbf{n} \mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) + \delta \mathbf{n} \mathbf{x} \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}) + o(\varepsilon) \quad (2.4)$$

dove $\delta \mathbf{n} \mathbf{x} = \varepsilon \mathbf{n} \times \mathbf{x}$. Calcolando gli elementi di matrice di \hat{R}_ε sulla base delle posizioni:

$$\langle \mathbf{x} | \hat{R}_\varepsilon | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}) + i \frac{\varepsilon}{\hbar} \cdot (-i \hbar) \sum_{i,j,k=1}^3 n_i \epsilon_{ijk} x_j \partial_k \psi(\mathbf{x}) + o(\varepsilon) \quad (2.5)$$

Confrontando le Eq. 2.4 - 2.5, si vede che sono uguali, dunque $\hat{\mathbf{L}}$ è il generatore delle rotazioni.

2.2 Proprietà

2.2.1 Espressione esplicita

Innanzitutto si noti che dalla definizione in Eq. 1.31 discende subito che $\hat{\mathbf{L}}$ è hermitiano:

$$\hat{L}_i^\dagger = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{p}_k \hat{x}_j = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} ([\hat{p}_k, \hat{x}_j] + \hat{x}_j \hat{p}_k) = L_i + i\hbar \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \delta_{jk} = L_i \quad (2.6)$$

È anche possibile calcolare esplicitamente l'espressione di $\hat{\mathbf{L}}$ in coordinate sferiche:

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (2.7)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (2.8)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (2.9)$$

Si ha inoltre:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \equiv \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\sin \theta}{\cos \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (2.10)$$

2.2.2 Commutatori

Sebbene in un sistema invariante per rotazioni il momento angolare commuti con l'Hamiltoniana, le componenti di $\hat{\mathbf{L}}$ non commutano tra loro

Lemma 2.2.1. $\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i = \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$.

Dimostrazione. $\sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{L}_k = \sum_{k,a,b=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{kab} \hat{x}_a \hat{p}_b = \sum_{k,a,b=1}^3 (\delta_{ia} \delta_{jb} - \delta_{ib} \delta_{ja}) \hat{x}_a \hat{p}_b = \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i$. \square

Proposizione 2.2.1. $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$.

Dimostrazione. Usando nell'ultima uguaglianza il Lemma 2.2.1:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= \sum_{a,b,l,m=1}^3 \epsilon_{iab} \epsilon_{jlm} [\hat{x}_a \hat{p}_b, \hat{x}_l \hat{p}_m] = \sum_{a,b,l,m=1}^3 \epsilon_{iab} \epsilon_{jlm} (\hat{x}_l [\hat{x}_a, \hat{p}_m] \hat{p}_b + \hat{x}_a [\hat{p}_b, \hat{x}_l] \hat{p}_m) \\ &= i\hbar \sum_{a,b,l=1}^3 \epsilon_{bia} \epsilon_{jla} \hat{x}_l \hat{p}_b - i\hbar \sum_{a,b,m=1}^3 \epsilon_{iab} \epsilon_{mjb} \hat{x}_a \hat{p}_m \\ &= i\hbar \sum_{a,b,l=1}^3 (\delta_{bj} \delta_{il} - \delta_{bl} \delta_{ji}) \hat{x}_l \hat{p}_b - i\hbar \sum_{a,b,m=1}^3 (\delta_{im} \delta_{aj} - \delta_{ij} \delta_{am}) \hat{x}_a \hat{p}_m \\ &= i\hbar (\hat{x}_i \hat{p}_j - \delta_{ij} \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} - \hat{x}_j \hat{p}_i + \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \delta_{ij}) = i\hbar (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i) = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \end{aligned}$$

\square

Si ricordi che il commutatore tra un operatore hermitiano \hat{G} , generatore della trasformazione (anch'essa hermitiana) $\hat{T} = e^{i\varepsilon\hat{G}}$, ed un generico operatore \hat{A} può essere calcolato da:

$$\hat{A}' = \hat{T}^{-1}\hat{A}\hat{T} = \left(\mathbf{I} - i\varepsilon\hat{G}\right)\hat{A}\left(\mathbf{I} + i\varepsilon\hat{G}\right) = \hat{A} + i\varepsilon[\hat{A}, \hat{G}] \implies [\hat{A}, \hat{G}] = \frac{1}{i\varepsilon}\delta\hat{A} \quad (2.11)$$

Dunque dalla Prop. 2.2.1 è possibile vedere come trasforma \hat{L}_i sotto la rotazione data da \hat{L}_j , e confrontandola con l'Eq. 2.1 si vede che $\hat{\mathbf{L}}$ trasforma proprio come un vettore sotto rotazioni (cosa non scontata).

Ciò suggerisce naturalmente che \hat{L}^2 , essendo invariante per rotazioni, commuti con ciascuna \hat{L}_i :

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = \sum_{k=1}^3 [\hat{L}_k \hat{L}_k, \hat{L}_i] = i\hbar \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{kij} \left(\hat{L}_k \hat{L}_j + \hat{L}_j \hat{L}_k \right) = 0 \quad (2.12)$$

nullo poiché prodotto di simbolo completamente antisimmetrico con operatore simmetrico.