

# Fisica Quantistica 2

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

Leonardo Cerasi<sup>1</sup>, Lucrezia Bioni

GitHub repository: [LeonardoCerasi/notes](#)

<sup>1</sup>[leo.cerasi@pm.me](mailto:leo.cerasi@pm.me)

---

# Indice

<b>Indice</b>	<b>ii</b>
<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
<b>I Meccanica Quantistica in più Dimensioni</b>	<b>2</b>
<b>1 Sistemi Quantistici Multidimensionali</b>	<b>3</b>
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
<b>2 Momento Angolare</b>	<b>12</b>
2.1 Momento angolare e rotazioni . . . . .	12
2.2 Proprietà . . . . .	13
2.2.1 Espressione esplicita . . . . .	13
2.2.2 Commutatori . . . . .	13
2.3 Spettro del momento angolare . . . . .	14
2.3.1 Costruzione dello spettro . . . . .	14
2.3.2 Autofunzioni sulla base delle coordinate . . . . .	16
2.4 Spin . . . . .	18
2.4.1 Spin 1 . . . . .	18
2.4.2 Spin $\frac{1}{2}$ . . . . .	20
2.5 Composizione di momenti angolari . . . . .	21
2.5.1 Coefficienti di Clebsch-Gordan . . . . .	22
<b>3 Sistemi Tridimensionali</b>	<b>24</b>
3.1 Equazione di Schrödinger radiale . . . . .	24
3.1.1 Condizioni al contorno . . . . .	25
3.2 Particella libera . . . . .	26

---

3.3	Oscillatore armonico isotropo . . . . .	26
3.3.1	Stati con $\ell = 0$ . . . . .	27
3.3.2	Stati con $\ell$ generico . . . . .	27
3.3.3	Degenerazione dello spettro . . . . .	29
3.3.4	Simmetria dell'oscillatore armonico isotropo . . . . .	30
3.4	Potenziale coulombiano . . . . .	31
3.4.1	Modello di Bohr . . . . .	32
3.4.2	Simmetrie del problema di Keplero . . . . .	33

---

# 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  $\alpha_i$  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  $\psi$ ), 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:*

$$\hat{\mathbf{p}}'^T = \hat{\mathbf{p}}^T M^{-1} \quad (1.24)$$

*Dimostrazione.* Considerando  $\hat{\mathbf{p}}'^T = \hat{\mathbf{p}}^T N$ , 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:

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

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:

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

dove si è usato il dato che  $\sum_{j=1}^3 x_j \partial_j \vartheta = \sum_{j=1}^3 x_j \partial_j \varphi$  ( $\nabla \vartheta, \nabla \varphi \perp \mathbf{x} = r \mathbf{e}_r$ ) 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  $\mathbf{x} = (r \cos \varphi, r \sin \varphi) \equiv (x_1, x_2)$  nel piano  $z = 0$  ed una rotazione attorno all'asse  $z$  di un angolo infinitesimo  $\varepsilon$ : questa causa uno spostamento  $\delta \mathbf{x}$  dato da:

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

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  $\hat{R}_\varepsilon$ , 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  $\varepsilon$  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  $\hat{R}_\varepsilon$  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:

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

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

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

Si ha inoltre:

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

### 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.

## 2.3 Spettro del momento angolare

Sebbene le componenti del momento angolare non commutano tra loro, e quindi non sono diagonalizzabili simultaneamente, è possibile trovare una terna di operatori compatibili: l'Hamiltoniana  $\mathcal{H}$ , il modulo del momento angolare  $\hat{L}^2$  e la componente  $\hat{L}_z$ ; in realtà poteva essere scelta qualsiasi componente del momento angolare, ma convenzionalmente si sceglie  $\hat{L}_z$ , principalmente per la sua semplice espressione in coordinate sferiche (Eq. 2.9).

Si definisce lo spettro di autofunzioni comuni di  $\hat{L}_z$  ed  $\hat{L}^2$  come l'insieme di stati  $|\ell, m\rangle$  tali che:

$$\hat{L}_z |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle \quad (2.13)$$

$$\hat{L}^2 |\ell, m\rangle = \lambda_\ell |\ell, m\rangle \quad (2.14)$$

È inoltre lecito supporre che tali stati siano normalizzati in senso proprio, dato che l'operatore momento angolare, visto come operatore differenziale, agisce su un dominio compatto (una superficie omeomorfa a  $\mathbb{S}^2$ ), quindi:

$$\langle \ell', m' | \ell, m \rangle = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm} \quad (2.15)$$

### 2.3.1 Costruzione dello spettro

Per determinare lo spettro, è conveniente definire i seguenti operatori:

$$\hat{L}_\pm := \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (2.16)$$

**Proposizione 2.3.1.**  $(\hat{L}_\pm)^\dagger = \hat{L}_\mp$ .

*Dimostrazione.* Banale ricordando che ogni  $\hat{L}_i$  è hermitiana (Eq. 2.6). □

**Proposizione 2.3.2.**  $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$ .

*Dimostrazione.*  $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = [\hat{L}, \hat{L}_x] \pm i[\hat{L}, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_y \pm i(-i\hbar\hat{L}_x) = \pm\hbar(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y) = \pm\hbar\hat{L}_\pm$ . □

Questi sono operatori di scala.

**Proposizione 2.3.3.**  $\hat{L}_z \hat{L}_\pm |\ell, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{L}_\pm |\ell, m\rangle$ .

*Dimostrazione.*  $\hat{L}_z \hat{L}_\pm |\ell, m\rangle = \hat{L}_\pm \hat{L}_z |\ell, m\rangle + [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] |\ell, m\rangle = \hat{L}_\pm \hat{L}_z |\ell, m\rangle \pm \hbar \hat{L}_\pm |\ell, m\rangle$ .  $\square$

Con questi operatori si dimostra che la scala degli stati si arresta in entrambe le direzioni.

**Proposizione 2.3.4.** Fissato  $\ell \in \mathbb{R}$ , la successione  $\{|\ell, m\rangle\}_{m \in \mathbb{R}}$  ha cardinalità finita.

*Dimostrazione.* Si definisca  $|\phi_\pm\rangle \equiv \hat{L}_\pm |\ell, m\rangle$ ; naturalmente:

$$\begin{aligned}\langle \phi_+ | \phi_+ \rangle &= \langle \ell, m | \hat{L}_- \hat{L}_+ | \ell, m \rangle \geq 0 \\ \langle \phi_- | \phi_- \rangle &= \langle \ell, m | \hat{L}_+ \hat{L}_- | \ell, m \rangle \geq 0\end{aligned}$$

Considerando che:

$$\hat{L}_\pm \hat{L}_\mp = (\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)(\hat{L}_x \mp i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \mp i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \pm \hbar \hat{L}_z$$

si ha:

$$0 \leq \langle \phi_+ | \phi_+ \rangle + \langle \phi_- | \phi_- \rangle = 2 \langle \ell, m | \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 | \ell, m \rangle = \lambda_\ell^2 - \hbar^2 m^2$$

Si ha quindi:

$$-\frac{|\lambda_\ell|}{\hbar} \leq m \leq \frac{|\lambda_\ell|}{\hbar}$$

che dimostra la tesi.  $\square$

Dunque, per  $\ell$  fissato devono esistere degli stati limite  $|\ell, m_{\min}\rangle, |\ell, m_{\max}\rangle$  tali che:

$$\begin{aligned}\hat{L}_- |\ell, m_{\min}\rangle &= 0 \\ \hat{L}_+ |\ell, m_{\max}\rangle &= 0\end{aligned} \tag{2.17}$$

Ciò determina univocamente i valori ammessi sia di  $\lambda_\ell$  che di  $m$ . Infatti, applicando  $\hat{L}_\pm$  alle Eq. 2.17:

$$\begin{aligned}0 &= \hat{L}_+ \hat{L}_- |\ell, m_{\min}\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) |\ell, m_{\min}\rangle = (\lambda_\ell - \hbar^2 m_{\min}^2 + \hbar^2 m_{\min}) |\ell, m_{\min}\rangle \\ 0 &= \hat{L}_- \hat{L}_+ |\ell, m_{\max}\rangle = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z) |\ell, m_{\max}\rangle = (\lambda_\ell - \hbar^2 m_{\max}^2 - \hbar^2 m_{\max}) |\ell, m_{\max}\rangle\end{aligned}$$

Sottraendo le due equazioni si ottiene:

$$m_{\max}(m_{\max} + 1) - m_{\min}(m_{\min} - 1) = 0$$

le cui soluzioni sono

$$m_{\max} = \frac{-1 \pm (2m_{\min} - 1)}{2} \in \{m_{\min} - 2, -m_{\min}\}$$

L'unica soluzione sensata è  $m_{\max} = -m_{\min}$ . Dato che  $\hat{L}_\pm$  sono operatori di scala, si deve avere  $m_{\max} = m_{\min} + N$ ,  $N \in \mathbb{N}$ , dunque

$$m_{\max} = \frac{N}{2}$$

che può essere intero o semi-intero.

Si ha inoltre che  $\lambda_\ell = \hbar^2 m_{\max}(m_{\max} + 1)$ , quindi, definendo  $\ell \equiv \frac{N}{2}$  (fin'ora era arbitrario), si può scrivere:

$$\lambda_\ell = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$$

In definitiva:

$$\hat{L}^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) |\ell, m\rangle \quad \ell = \frac{N}{2}, N \in \mathbb{N} \quad (2.18)$$

$$\hat{L}_z |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle \quad -\ell \leq m \leq \ell \quad (2.19)$$

La normalizzazione propria degli stati è data da:

$$\langle \ell', m' | \ell, m \rangle = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm} \quad (2.20)$$

Per normalizzare correttamente le autofunzioni, si calcola:

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ \hat{L}_- |\ell, m\rangle &= \hbar^2 (\ell(\ell + 1) - m(m - 1)) |\ell, m\rangle \\ \hat{L}_- \hat{L}_+ |\ell, m\rangle &= \hbar^2 (\ell(\ell + 1) - m(m + 1)) |\ell, m\rangle \end{aligned}$$

Ricordando la Prop. 2.3.3, si può definire pienamente la scala delle autofunzioni a  $\ell$  fissato:

$$|\ell, m \pm 1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{\ell(\ell + 1) - m(m \pm 1)}} \hat{L}_\pm |\ell, m\rangle \quad (2.21)$$

**Quantizzazione** È necessario fare delle osservazioni sugli autovalori di  $\hat{L}_z$  e  $\hat{L}^2$  trovati. Innanzitutto, si vede che  $L_z$  è quantizzato in multipli interi o semi-interi di  $\hbar$ , il che è alquanto notevole, soprattutto se comparato alla fisica classica: quantisticamente, quindi, sebbene non abbia senso parlare di traiettorie ( $\hat{x}$  e  $\hat{p}$  non commutano), si possono descrivere le orbite quantizzate dei corpi, corrispondenti a valori discreti del momento angolare.

Un'altro fatto che viene confermato è che le componenti del momento angolare non sono compatibili tra loro: se è completamente determinata  $L_z$ ,  $L_x$  ed  $L_y$  sono completamente indeterminate (e quindi non avrebbe senso parlare di un vettore tridimensionale); ciò è confermato dal fatto che, quando  $L_z$  assume il suo valore massimo  $\hbar\ell$ , questo è comunque strettamente minore del modulo del momento angolare  $\hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)}$  (mentre classicamente si avrebbe  $L_z^{(\max)} = L$ ).

### 2.3.2 Autofunzioni sulla base delle coordinate

È possibile definire le autofunzioni del momento angolare sulla base delle coordinate come:

$$\langle \vartheta, \varphi | \ell, m \rangle := Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) \quad (2.22)$$

Ricordando l'espressione di  $\hat{L}_z$  sulla base delle coordinate (Eq. 2.9), l'Eq. 2.19 diventa un'equazione differenziale:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) \quad (2.23)$$

È possibile scrivere la soluzione generale come:

$$Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) = \mathcal{N}_{\ell, m} e^{im\varphi} P_{\ell, m}(\cos \vartheta) \quad (2.24)$$

Queste sono dette armoniche sferiche.

**Fase** L'autovalore  $m$  di  $\hat{L}_z$  determina un fattore di fase nell'autofunzione. Se si impone la condizione che la funzione d'onda sia monodroma, così da avere uno spazio degli stati fisici semplicemente connesso, è necessario che  $Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi + 2\pi) = Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi)$ , ovvero:

$$e^{im2\pi} = 1 \quad (2.25)$$

Questa condizione è soddisfatta solo se  $m$ , e di conseguenza  $\ell$ , è intero: nel caso di momento angolare con autofunzioni monodrome si parla di momento angolare orbitale.

È possibile determinare esplicitamente le armoniche sferiche senza risolvere l'equazione agli autovalori per  $\hat{L}^2$ , che è una PDF di second'ordine, utilizzando invece la condizione  $\hat{L}_- |\ell, m_{\min}\rangle = 0$ . Innanzitutto:

$$\begin{aligned} \hat{L}_- &= i\hbar \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \hbar \left( -\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= \hbar e^{-i\varphi} \left( -\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Si vede subito che il fattore di fase fa abbassare di un'unità  $m$ . Si ha quindi l'equazione:

$$\hbar e^{-i\varphi} \left( -\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{\ell,-\ell}(\vartheta, \varphi) = 0 \quad (2.27)$$

Dall'Eq. 2.24:

$$\left( -\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \ell \frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} \right) e^{-i\ell\varphi} P_{\ell,-\ell}(\cos \vartheta) = 0 \quad (2.28)$$

Per la chain rule  $\partial_{\vartheta} = \cos \vartheta \partial_{\sin \vartheta}$ , dunque:

$$\frac{\partial}{\partial \sin \vartheta} P_{\ell,-\ell}(\cos \vartheta) = \frac{\ell}{\sin \vartheta} P_{\ell,-\ell}(\cos \vartheta) \quad (2.29)$$

Questa può essere riscritta come:

$$\frac{dP_{\ell,-\ell}(\cos \vartheta)}{P_{\ell,-\ell}(\cos \vartheta)} = \ell \frac{d \sin \vartheta}{\sin \vartheta} \quad (2.30)$$

La soluzione è immediata:

$$P_{\ell,-\ell}(\cos \vartheta) = (\sin \vartheta)^\ell \quad (2.31)$$

Tutte le altre armoniche sferiche ad  $\ell$  fissato possono essere trovate con i ladder operators:

$$Y_{\ell,-\ell+k}(\vartheta, \varphi) = \mathcal{N}_{\ell,-\ell+k} \hat{L}_+^k Y_{\ell,-\ell}(\vartheta, \varphi) \quad (2.32)$$

Svolgendo i calcoli:

$$P_{\ell,k} \sim (\sin \vartheta)^k (\cos \vartheta)^{\ell-k} \quad \forall k \in [0, \ell] \quad (2.33)$$

Le armoniche sferiche sono una base ortonormale completa dello spazio delle funzioni definite su  $\mathbb{S}^2$ , dunque vale la relazione di ortonormalità:

$$\int_{\mathbb{S}^2} d\Omega \langle \ell', m' | \vartheta, \varphi \rangle \langle \vartheta, \varphi | \ell, m \rangle = \int_{\mathbb{S}^2} d\cos \vartheta d\varphi Y_{\ell',m'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi) = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm} \quad (2.34)$$

Vale inoltre la relazione di completezza sulla sfera:

$$\sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l |\ell, m\rangle \langle \ell, m| = I \quad (2.35)$$

ovvero:

$$\sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \langle \vartheta, \varphi | \ell, m \rangle \langle \ell, m | \vartheta', \varphi' \rangle = \sum_{\ell, m} Y_{\ell, m}^*(\vartheta', \varphi') Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) = \delta(\cos \vartheta - \cos \vartheta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (2.36)$$

Ciò equivale a decomporre il sistema in termini di frequenza proprie sulla sfera: la differenza con la trasformata di Fourier, che decompone in frequenza proprie della retta, è che in quel caso le frequenze variano in  $(-\infty, +\infty)$ , mentre in questo caso in  $[0, 2\pi]$ .

Nel caso in cui  $m = 0$  non si ha alcuna dipendenza da  $\varphi$  e si trova che i  $P_{\ell, 0}(\cos \vartheta) \equiv P_{\ell}(\vartheta)$  sono polinomi di  $\cos \vartheta$ , detti polinomi di Legendre, formanti una base ortonormale su  $\mathbb{S}^1$ , e dunque sul segmento  $\cos \vartheta \in [-1, 1]$  (il caso di questa trattazione).

## 2.4 Spin

Il significato fisico dei valori di  $\ell$  semi-intero è legato a rotazioni su un diverso spazio di Hilbert.

In meccanica classica, la rotazione di osservabili scalari  $\omega(\mathbf{x})$  dipende da come tale rotazione agisce sulle coordinate  $\mathbf{x}$ : quantisticamente, questo è il caso associato all'effetto delle rotazioni sulla funzione d'onda  $\langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x})$ , determinato dal momento angolare orbitale (ovvero associato alla traiettoria del sistema). Se invece si considera un'osservabile vettoriale  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ , la rotazione non agisce solo sul suo modulo (che è uno scalare), ma anche sulla sua direzione.

Dal punto di vista quantistico, questi due tipi di rotazioni sono nettamente distinti, poiché agiscono su spazi di Hilbert differenti: la rotazione delle coordinate agisce su uno spazio di Hilbert infinito-dimensionale, mentre la rotazione delle "direzioni" agisce su uno spazio di Hilbert finito-dimensionale. Nel primo caso si parla di momento angolare orbitale, nel secondo caso di momento angolare di spin.

### 2.4.1 Spin 1

Si consideri un sistema tripartito, la cui base dello spazio degli stati è definita come:

$$|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |3\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Questa notazione è ambigua, poiché esprime la base rispetto ad un'altra base implicita, ma è conveniente per rappresentare le rotazioni. Il generico stato (equivalente, classicamente, alla direzione di un vettore in  $\mathbb{R}^3$ ) è:

$$|v\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle + c_3 |3\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

con  $c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{C} : |c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$ .

Considerando il caso particolare di  $|v\rangle = \cos \varphi |1\rangle + \sin \varphi |2\rangle$  ed una rotazione attorno a  $|3\rangle$ , si ha:

$$|v'\rangle = \hat{R}_\varepsilon^{(3)} |v\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\varphi + \varepsilon) \\ \sin(\varphi + \varepsilon) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi - \varepsilon \sin \varphi \\ \sin \varphi + \varepsilon \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} + o(\varepsilon) \quad (2.38)$$

Esprimendo la rotazione in funzione di un generatore  $\hat{R}_\varepsilon^{(3)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{S}_3}$  si ha:

$$|v'\rangle = \left( I - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{S}_3 + o(\varepsilon) \right) |v\rangle \quad (2.39)$$

Si trova dunque:

$$\hat{S}_3 = -i\hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

Si vede inoltre che l'Eq. 2.39 è compatibile con l'Eq. 2.3: la rotazione di  $\psi$  può essere interpretata sia come  $\langle \mathbf{x} | \psi' \rangle = \psi'(\mathbf{x})$  (alias) sia come  $\langle \mathbf{x}' | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}')$  (alibi), e dal primo caso si ha che  $|\psi'\rangle = \hat{R}_\varepsilon |\psi\rangle$ , mentre dal secondo  $\langle \mathbf{x}' | = \langle \mathbf{x} | \hat{R}_\varepsilon$ , ovvero  $|\mathbf{x}'\rangle = \hat{R}_\varepsilon^\dagger |\mathbf{x}\rangle$ , che equivale all'Eq. 2.39.

Replicando il calcolo per gli altri assi di rotazione si trova:

$$\hat{S}_1 = -i\hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_2 = -i\hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

ovvero, in generale:

$$[\hat{S}_k]_{ij} = -i\hbar \epsilon_{kij} \quad (2.42)$$

Questi operatori, detti operatori di spin, soddisfano la relazione di commutazione per operatori del momento angolare in Prop. 2.2.1:

$$\begin{aligned} [\hat{S}_i, \hat{S}_j]_{ac} &= \sum_{b=1}^3 \left( [\hat{S}_i]_{ab} [\hat{S}_j]_{bc} - [\hat{S}_j]_{ab} [\hat{S}_i]_{bc} \right) = -\hbar^2 \sum_{b=1}^3 (\epsilon_{iab} \epsilon_{jbc} - \epsilon_{jab} \epsilon_{ibc}) \\ &= -\hbar^2 (\delta_{ic} \delta_{aj} - \delta_{ij} \delta_{ac} - \delta_{jc} \delta_{ai} + \delta_{ji} \delta_{ac}) = -\hbar^2 (\delta_{ic} \delta_{aj} - \delta_{jc} \delta_{ai}) \\ &= i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} [\hat{S}_k]_{ac} = \hbar^2 \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{kac} = \hbar^2 (\delta_{ia} \delta_{jc} - \delta_{ic} \delta_{ja}) \end{aligned}$$

Gli operatori di spin forniscono dunque una rappresentazione del momento angolare. Per quanto riguarda il modulo, si vede subito che  $\hat{S}^2 := \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_3^2$  è espresso come:

$$\hat{S}^2 = 2\hbar^2 I \quad (2.43)$$

ovvero tutti i vettori dello spazio sono suoi autovettori. L'autovalore associato a  $\hat{L}^2$  è in generale  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ , quindi si vede che in questo caso si ha  $\ell = 1$ : per questo si parla di sistema a spin  $s = 1$ . La dimensione dello spazio di Hilbert è data dal numero di possibili valori di  $m \equiv s_z$ , ovvero in totale  $2s + 1$ , dato che  $-s \leq s_z \leq s$ : in questo caso la dimensione è giustamente 3 e si possono esplicitare gli autovettori  $|v_{s_z}\rangle$  di  $\hat{S}_z$  ( $\hat{S}_z |v_{s_z}\rangle = s_z \hbar |v_{s_z}\rangle$ ), ottenendo la cosiddetta base sferica:

$$|v_\pm\rangle \equiv |1, \pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \\ 0 \end{pmatrix} \quad |v_0\rangle \equiv |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

L'analogia tra un sistema con  $\ell = 1$  ed uno con spin 1 deriva dal fatto che il primo è descritto da un sottospazio finito-dimensionale di uno spazio infinito-dimensionale, e tale restrizione è equivalente allo spazio che descrive il secondo sistema. Nel caso tridimensionale considerato, il momento angolare orbitale agisce su uno spazio con base  $|\mathbf{x}\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes |x_3\rangle$ , mentre il momento angolare di spin su uno spazio con base  $\{|e_i\rangle\}_{i=1,2,3}$  (qutrit).

### 2.4.2 Spin $\frac{1}{2}$

Per un sistema con  $s = \frac{1}{2}$ , i possibili valori di  $s_z$  sono 2,  $s_z = \pm\frac{1}{2}$ , dunque il sistema è fondamentalmente un qubit e i suoi stati possono essere indicati come  $|\pm\rangle \equiv |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ .

Il più generale stato in questo spazio è  $|\psi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$ , con  $c_{\pm} \in \mathbb{C}$ , dunque è possibile rappresentarlo come uno spinore (vettore a componenti complesse):

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

Dato che  $\hat{S}_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle$ , in tale rappresentazione  $\hat{S}_z$  può essere scritto (con abuso di notazione) come una matrice diagonale:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.46)$$

Per calcolare  $\hat{S}_x$  ed  $\hat{S}_y$  si utilizzano i ladder operators  $\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$ , ricordando le relazioni di scala in Eq. 2.21:

$$\hat{S}_+|-\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2}+1\right)}|+\rangle = \hbar|+\rangle$$

$$\hat{S}_-|+\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}-1\right)}|-\rangle = \hbar|-\rangle$$

ovvero:

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.47)$$

Dato che  $\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$  e  $\hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)$ , ricordando anche Eq. 2.46, si trova la relazione tra operatori di spin e matrici di Pauli:

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i \quad (2.48)$$

**Proposizione 2.4.1.**  $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{S}_k$ .

*Dimostrazione.* Ricordando che  $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\mathbf{I} + i\sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk}\sigma_k$ :

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i) = \frac{\hbar^2}{2}i\sum_{k=1}^3 \sigma_k = i\hbar\sum_{k=1}^3 \hat{S}_k$$

□

Inoltre, si vede immediatamente che:

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbf{I} \quad (2.49)$$

Imponendo  $s(s+1) = \frac{3}{4}$  si trova, per l'appunto,  $s = \frac{1}{2}$ .

È possibile vedere il comportamento peculiare dei sistemi a spin  $\frac{1}{2}$  sotto rotazioni ricordando l'espressione degli operatori di rotazione in Eq. 2.39: considerando una rotazione di  $2\pi$  attorno l'asse  $z$  e ricordando che  $|\pm\rangle$  sono autostati di  $\sigma_z$ :

$$\hat{R}_{2\pi}^{(z)}|\psi\rangle = e^{-i\pi\sigma_z}(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) = c_+e^{-i\pi}|+\rangle + c_-e^{i\pi}|-\rangle = -|\psi\rangle \quad (2.50)$$

Il calcolo è analogo lungo qualsiasi asse. Si vede dunque che ruotando il sistema di  $2\pi$  uno stato di spin semi-intero acquista un segno negativo, mentre per tornare in sé stesso è necessaria una rotazione di  $4\pi$ : questo impedisce di rappresentare il vettore di stato come una funzione sullo spazio delle coordinate, ma non viola alcun principio fondamentale, dando anzi luogo ad effetti sperimentalmente osservabili verificati.

## 2.5 Composizione di momenti angolari

Tutte le particelle che formano la materia sono portatrici di spin (ad eccezione del bosone di Higgs): è dunque necessario studiare come si comportano i sistemi quantistici dotati sia di momento angolare orbitale che di spin.

Lo stato di un sistema di spin  $s$  può essere espresso sia su autostati di  $\hat{\mathbf{L}}$  che di  $\hat{\mathbf{S}}$ , dunque:

$$\langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{s_z=-s}^s \langle \mathbf{x} | \ell, m, s_z \rangle \langle \ell, m, s_z | \psi \rangle \quad (2.51)$$

Dato che  $|\mathbf{x}\rangle = |r, \vartheta, \varphi\rangle \equiv |r\rangle \otimes |\vartheta, \varphi\rangle$  e  $\langle \vartheta, \varphi | \ell, m \rangle = Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi)$  (base ortonormale di  $\mathbb{S}^2$ ):

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{s_z=-s}^s c_{\ell, m, s_z}(r) Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi) u_{s_z} \quad (2.52)$$

dov'è stata definita la base dello spin  $u_{s_z} \equiv \langle \vartheta, \varphi | s_z \rangle$ . Ad esempio, nel caso  $s = \frac{1}{2}$  gli  $u_{s_z}$  sono i due spinori  $u_+ = (1, 0)^T$  e  $u_- = (0, 1)^T$ , dunque  $\psi(\mathbf{x})$  sarà anch'esso uno spinore, in generale non fattorizzabile.

La probabilità di rilevare il sistema in  $\mathbf{x}$  è la somma delle probabilità su tutti i valori di spin:

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{s_z=-s}^s |\psi_{s_z}(\mathbf{x})|^2 \quad (2.53)$$

La probabilità che la misura dello spin lungo l'asse  $z$  risulti  $s_z$  invece è:

$$P_{s_z} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x} \psi_{s_z}(\mathbf{x}) \quad (2.54)$$



### 2.5.1 Coefficienti di Clebsch-Gordan

È utile definire il momento angolare totale:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \quad (2.55)$$

Più formalmente, dato che i due operatori agiscono su spazi diversi (quello delle posizioni e quello delle direzioni), la definizione corretta è  $\hat{\mathbf{J}} := \hat{\mathbf{L}} \otimes \hat{\mathbf{I}}_s + \hat{\mathbf{I}}_x \otimes \hat{\mathbf{S}}$ .

**Proposizione 2.5.1.**  $[J_i, J_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} J_k$ .

*Dimostrazione.* Agendo su spazi diversi, si ha  $[L_i, S_j] = 0$ , dunque:

$$[J_i, J_j] = [L_i, L_j] + [S_i, S_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} (L_k + S_k) = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} J_k$$

□

Dunque,  $\hat{\mathbf{J}}$  è effettivamente un operatore di momento angolare: vale di conseguenza che  $[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0$ .

**Proposizione 2.5.2.**  $\hat{J}^2$ ,  $\hat{J}_z$ ,  $\hat{L}^2$  ed  $\hat{S}^2$  commutano tra loro.

*Dimostrazione.*  $\hat{L}^2$  ed  $\hat{S}^2$  commutano poiché agiscono su spazi diversi.  $[\hat{J}^2, \hat{S}^2]$  è analogo a  $[\hat{J}^2, \hat{L}^2]$ :  $[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \hat{L}^2] = 2 \sum_{k=1}^3 [\hat{L}_k \hat{S}_k, \hat{L}^2] = 0$ . I commutatori di  $\hat{J}_z$  sono banali. □

**Proposizione 2.5.3.**  $\hat{J}^2$  non commuta con  $\hat{L}_z$  ed  $\hat{S}_z$ .

*Dimostrazione.* Analoghi:  $[\hat{J}^2, \hat{L}_z] = 2 \sum_{i=1}^3 [\hat{L}_i, \hat{L}_z] S_i = 2i\hbar \sum_{i,k=1}^3 \epsilon_{i3k} L_k S_i \neq 0$ . □

È possibile, dunque, scegliere due diverse basi per esprimere lo stato del sistema: la *base disaccoppiata*  $|\ell, m, s, s_z\rangle$ , diagonalizzando  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{S}^2$  ed  $\hat{S}_z$ , e la *base accoppiata*  $|j, j_z, \ell, s\rangle$ , diagonalizzando  $\hat{J}^2$ ,  $\hat{J}_z$ ,  $\hat{L}^2$  ed  $\hat{S}^2$ . Il passaggio tra le due basi è dato da:

$$|\ell, m, s, s_z\rangle = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} \sum_{j_z=-j}^j |j, j_z, \ell, m\rangle \langle j, j_z, \ell, s | \ell, m, s, s_z\rangle \quad (2.56)$$

$$|j, j_z, \ell, s\rangle = \sum_{m=-\ell}^{\ell} \sum_{s_z=-s}^s |\ell, m, s, s_z\rangle \langle \ell, m, s, s_z | j, j_z, \ell, s\rangle \quad (2.57)$$

I coefficienti  $\langle j, j_z, \ell, s | \ell, m, s, s_z\rangle$ ,  $\langle \ell, m, s, s_z | j, j_z, \ell, s\rangle$  sono detti *coefficienti di Clebsch-Gordan*. È necessario esplicitare il range di  $j$ .

**Proposizione 2.5.4.**  $\langle \ell, m, s, s_z | j, j_z, \ell, s\rangle \propto \delta_{j_z, m+s_z}$ .

*Dimostrazione.* Dato che  $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$ , si ha  $\hat{J}_z - \hat{L}_z - \hat{S}_z = 0$ :

$$0 = \langle \ell, m, s, s_z | \hat{J}_z - \hat{L}_z - \hat{S}_z | j, j_z, \ell, s\rangle = (j_z - m - s_z) \hbar \langle \ell, m, s, s_z | j, j_z, \ell, s\rangle$$

dunque  $\langle \ell, m, s, s_z | j, j_z, \ell, s\rangle \neq 0 \Rightarrow j_z = m + s_z$ . □

Si vede allora che  $|j, j_z, \ell, s\rangle$  è combinazione lineare solo degli stati  $|\ell, m, s, s_z\rangle : m + s_z = j_z$ : di conseguenza,  $j_z^{\max} = m^{\max} + s_z^{\max} = \ell + s$ , ma  $j_z^{\max} = j_{\max}$ , quindi  $j_{\max} = \ell + s$ : infatti, lo stato  $|j = \ell + s, j_z = j, \ell, s\rangle$  può essere ottenuto solo come  $|\ell, m = \ell, s, s_z = s\rangle$ , mentre, ad esempio, lo stato  $|j = \ell + s, j_z = j - 1, \ell, s\rangle$  è combinazione lineare dei due stati  $|\ell, m = \ell - 1, s, s_z = s\rangle$  e  $|\ell, m = \ell, s, s_z = s - 1\rangle$ .

Affinché la base accoppiata abbia lo stesso numero di elementi della base disaccoppiata  $((2\ell + 1)(2s + 1))$ , è necessario che  $j_{\min} = |\ell - s|$ ; assumendo WLOG  $\ell > s$ :

$$\sum_{j=\ell-s}^{\ell+s} (2j + 1) = \sum_{k=0}^{2s} (2(k + \ell - s) + 1) = 2s(2s + 1) + (2(\ell - s) + 1)(2s + 1) = (2\ell + 1)(2s + 1)$$

### 2.5.1.1 Composizione di due spin $\frac{1}{2}$

Nel caso di un sistema in cui si compongono due spin  $\frac{1}{2}$  (doppio qubit), si può introdurre la notazione semplificata  $\pm \equiv \pm\frac{1}{2}$ . Dalla condizione  $|s_1 - s_2| \leq s \leq s_1 + s_2$  si trova che i possibili valori di  $s$  sono 0 e 1: in particolare, si ha un tripletto di spin 1 ( $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$ ) ed un singoletto di spin 0 ( $|0, 0\rangle$ ).

Per calcolare i coefficienti di Clebsch-Gordan, si consideri innanzitutto che, per la condizione su  $j_z^{\max}$ , si ha:

$$|1, 1\rangle = |+, +\rangle \quad (2.58)$$

Definendo  $\hat{S}^{\pm} := \hat{S}_1^{\pm} + \hat{S}_2^{\pm}$  gli operatori di innalzamento/abbassamento per lo spin totale, si ha, dall'Eq. 2.21:

$$\begin{aligned} \hat{S}^- |1, 1\rangle &= \hbar \sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} |1, 0\rangle = \hbar \sqrt{2} |1, 0\rangle \\ &= (\hat{S}_1^- + \hat{S}_2^-) |+, +\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - 1\right)} (|+, -\rangle + |-, +\rangle) \\ &= \hbar (|+, -\rangle + |-, +\rangle) \end{aligned}$$

Si vede dunque che:

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, -\rangle + |-, +\rangle) \quad (2.59)$$

Dato che  $j_z = s_1 + s_2$ , l'unico modo per avere lo stato con  $j_z = -1$  è:

$$|1, -1\rangle = |-, -\rangle \quad (2.60)$$

Dalla condizione di ortogonalità (in particolare  $\langle 1, 0 | 0, 0 \rangle = 0$ ) si ricava infine:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+, -\rangle - |-, +\rangle) \quad (2.61)$$

Questo metodo è generale: si parte dallo stato più alto e si agisce tramite operatori di innalzamento/abbassamento.

I sistemi di doppio spin  $\frac{1}{2}$  sono particolarmente interessanti poiché sono il più semplice sistema quantistico non-banale: i suoi stati non possono essere fattorizzati, ed in particolare gli stati con  $j_z = 0$  sono massimamente entangled.

Inoltre, si nota che questo è un sistema di particelle identiche: non c'è misura in grado di distinguere le due particelle. C'è quindi simmetria finita per scambio delle particelle: gli stati del tripletto sono simmetrici, mentre il singoletto è antisimmetrico.

# Sistemi Tridimensionali

## 3.1 Equazione di Schrödinger radiale

Si consideri una generica Hamiltoniana invariante per rotazioni, ad esempio:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (3.1)$$

È evidente che questa Hamiltoniana non si possa separare in parte radiale e parte angolare a causa del termine  $\frac{L^2}{r^2}$ . È però possibile diagonalizzare simultaneamente  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  e  $\hat{L}_z$ , dunque si proietta sugli autostati del momento angolare:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \langle \mathbf{x} | \ell, m \rangle \langle \ell, m | \psi \rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi) \phi_{\ell,m}(r) \quad (3.2)$$

L'equazione di Schrödinger si riduce quindi in una PDE con una sola incognita:

$$\left[ \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] \phi_{\ell,m}(r) = E \phi_{\ell,m}(r) \quad (3.3)$$

Questa non dipende da  $m$ , dunque fissati  $\ell$  ed  $E$  c'è una degenerazione di  $2\ell+1$ ; si pone  $\phi_{\ell,m}(r) \equiv \phi_{\ell}(r)$ . È inoltre utile porre:

$$\phi_{\ell}(r) \equiv \frac{u_{\ell}(r)}{r} \quad (3.4)$$

**Proposizione 3.1.1.**  $\hat{p}_r^n \phi_{\ell}(r) = (-i\hbar)^n \frac{1}{r} \frac{\partial^n}{\partial r^n} u_{\ell}(r)$ .

*Dimostrazione.*  $\hat{p}_r \phi_{\ell}(r) = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \frac{u_{\ell}(r)}{r} = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} u_{\ell}(r)$ . □

Una ragione “fisica” per definire  $u_{\ell}(r)$  è che assorbe la misura d'integrazione nel prodotto scalare:

$$\langle \psi' | \psi \rangle = \int_0^{\infty} dr r^2 \phi_{\ell'}^*(r) \phi_{\ell}(r) \int_{\mathbb{S}^2} d\cos\vartheta d\varphi Y_{\ell',m'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi) = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'} \int_0^{\infty} dr u_{\ell'}^*(r) u_{\ell}(r)$$

Ciò rende  $\hat{p}_r$  un operatore hermitiano sulle  $u_{\ell}$ , ed infatti l'equazione di Schrödinger diventa:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_{\ell}(r) = E u_{\ell}(r) \quad (3.5)$$

### 3.1.1 Condizioni al contorno

È necessario che la funzione d'onda radiale  $\phi_\ell(r)$  abbia densità di probabilità integrabile su  $[0, +\infty)$ : in particolare, si richiede che il seguente integrale non diverga:

$$\langle \phi_\ell | \phi_\ell \rangle = \int_0^\infty dr r^2 |\phi_\ell(r)|^2 = \int_0^\infty dr |u_\ell(r)|^2 \quad (3.6)$$

Nell'origine  $|u_\ell(r)|^2$  deve avere al più una singolarità integrabile, dunque:

$$u_\ell(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{r^\delta} : \delta < \frac{1}{2} \quad (3.7)$$

Dato che  $\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta^3(\mathbf{x})$ , se  $\phi_\ell(r)$  diverge nell'origine almeno come  $\frac{1}{r}$  è possibile soddisfare l'equazione di Schrödinger solo se il potenziale nell'origine diverge almeno come una delta di Dirac. Per potenziali non-distribuzionali (ovvero funzioni, quindi non singolari)  $\phi_\ell(r)$  deve divergere nell'origine meno di  $\frac{1}{r}$ , dunque:

$$\lim_{r \rightarrow 0} r\phi_\ell(r) = 0 \quad \implies \quad \lim_{r \rightarrow 0} u_\ell(r) = 0 \quad (3.8)$$

**Andamento nell'origine** I potenziali d'interesse fisico sono quelli che per  $r \rightarrow 0$  divergono meno di  $\frac{1}{r^2}$ : il caso in cui nell'origine  $V(r)$  vada come  $\frac{1}{r^k}$  con  $k \geq 2$  è patologicamente attrattivo e si dimostra non avere un'energia minima, ovvero non presenta stati stabili.

Se quindi nell'origine  $V(r) \sim \frac{1}{r^k}$  con  $k < 2$ , per  $r \rightarrow 0$  a dominare è il termine centrifugo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_\ell(r)}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} u_\ell(r) = 0 \quad \implies \quad \frac{d^2 u_\ell(r)}{dr^2} = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u_\ell(r) \quad (3.9)$$

La soluzione generale di questa equazione è  $u_\ell(r) = Ar^{\ell+1} + Br^{-\ell}$ , ma il secondo termine non soddisfa la condizione in Eq. 3.8, dunque:

$$u_\ell(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} Ar^{\ell+1} \quad (3.10)$$

**Andamento all'infinito** Se all'infinito il potenziale si annulla, per  $r \rightarrow \infty$  l'andamento della funzione d'onda è quello della particella libera: se esistono stati legati, ovvero autostati di  $\hat{\mathcal{H}}$  con  $E < 0$ , l'andamento della soluzione è:

$$u_\ell(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} Ce^{-\beta r}, \quad \beta \equiv \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \quad (3.11)$$

Se invece  $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) \neq 0$ , l'andamento va studiato caso per caso.

**Stati legati** Per un potenziale unidimensionale esiste sempre almeno uno stato legato; inoltre, lo stato fondamentale ha una funzione d'onda pari e gli stati eccitati hanno parità alternata.

Nel caso tridimensionale, è possibile interpretare il problema come un problema unidimensionale con dominio  $[0, \infty)$ : la condizione in Eq. 3.8, però, impone che solo le soluzioni dispari sono accettabili, dunque in generale non è detto che esista lo stato fondamentale. Per un potenziale tridimensionale, quindi, non è detto a priori che esistano stati legati.

### 3.2 Particella libera

L'equazione di Schrödinger per la particella libera, quindi per  $V(\mathbf{x}) = 0$ , è:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (3.12)$$

Questa è una PDE separabile e, in coordinate cartesiane, le soluzioni sono delle onde piane:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad E = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} \quad (3.13)$$

normalizzate in senso improprio:

$$\langle\psi_{\mathbf{k}'}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\mathbf{x} \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (3.14)$$

Un differente approccio risolutivo è quello che sfrutta la simmetria rotazionale del problema:

$$\psi_{\ell,m}(\mathbf{x}) = Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi) \frac{u_{\ell}(r)}{r} \quad (3.15)$$

Dall'Eq. 3.5:

$$\frac{\hbar^2}{2mE} \left[ -\frac{d^2}{dr^2}u_{\ell}(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u_{\ell}(r) \right] - u_{\ell}(r) = 0 \quad (3.16)$$

Ponendo  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  e  $r' = kr$ , si ottiene:

$$\frac{d^2}{dr'^2}u_{\ell}(r') - \frac{\ell(\ell+1)}{r'^2}u_{\ell}(r') + u_{\ell}(r') = 0 \quad (3.17)$$

Questa è una ODE di Bessel e la sua soluzione si ottiene introducendo la funzione di Bessel  $j_{\ell}(r')$  (è noto che  $j_{\ell}(x) \sim x^{\ell}$  per  $x \rightarrow 0$ ):

$$u_{\ell}(r') = r'j_{\ell}(r') \quad (3.18)$$

Le autofunzioni della particella libera tridimensionale sono dunque:

$$\psi_{\ell,m}(\mathbf{x}) = Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi)j_{\ell}(kr), \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (3.19)$$

### 3.3 Oscillatore armonico isotropo

L'oscillatore armonico isotropo è descritto dal seguente potenziale:

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \quad (3.20)$$

Essendo un potenziale centrale, il problema si riduce al problema radiale. L'Hamiltoniana radiale corrispondente è:

$$\mathcal{H}_{\ell} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \quad (3.21)$$

La sua equazione agli autovalori può essere scritta come:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\ell} |k, \ell, m\rangle = E_{k,\ell} |k, \ell, m\rangle \quad (3.22)$$

### 3.3.1 Stati con $\ell = 0$

Per  $\ell = 0$ , il problema si riduce all'oscillatore armonico unidimensionale:

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (3.23)$$

Per risolvere con metodo algebrico, si definisce l'operatore di distruzione come:

$$\hat{d}_0 := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{r} + i \frac{\hat{p}_r}{m\omega} \right) \quad (3.24)$$

ed il relativo operatore di creazione  $\hat{d}_0^\dagger$ . In questo modo, si può scrivere:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hbar\omega \left( \hat{d}_0^\dagger \hat{d}_0 + \frac{1}{2} \right) \quad (3.25)$$

Dato che  $[\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar$ , si ha  $[\hat{d}_0, \hat{d}_0^\dagger] = 1$ , dunque lo spettro di  $\hat{\mathcal{H}}_0$  è lo stesso dell'oscillatore armonico unidimensionale:

$$u_{k,0}(r) = \mathcal{N}_k e^{-cx^2} H_k(r) \quad (3.26)$$

Dato che  $u_{k,0}(-x) = (-1)^k u_{k,0}(x)$ , per la condizione al contorno in Eq. 3.8 sono ammissibili solo le soluzioni dispari. Ridefinendo  $k$  così che  $u_{k,0}(r)$  sia la  $(2k+1)$ -esima soluzione, si trova lo spettro dell'Hamiltoniana:

$$E_{k,0} = \hbar\omega \left( 2k + \frac{3}{2} \right) \quad (3.27)$$

Dato che il caso  $\ell = 0$  è quello maggiormente attrattivo, per l'assenza del termine centrifugo, si trova che lo stato fondamentale è  $|0, 0, 0\rangle$ , con energia  $E_{0,0} = \frac{3}{2}\hbar\omega$ .

### 3.3.2 Stati con $\ell$ generico

Per scrivere l'Hamiltoniana  $\hat{\mathcal{H}}_\ell$  in una forma simile a Eq. 3.25 è necessario definire degli operatori di distruzione/creazione generalizzati:

$$\hat{d}_\ell := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \left( \hat{r} + \frac{\hbar\ell}{m\omega\hat{r}} \right) + i \frac{\hat{p}_r}{m\omega} \right) \quad (3.28)$$

È utile inoltre ricordare che, essendo  $[\hat{p}_r, f(\hat{r})] = -i\hbar f'(\hat{r})$ , si ha  $[\hat{p}_r, \frac{1}{\hat{r}}] = \frac{i\hbar}{\hat{r}^2}$ .

Si può generalizzare l'operatore numero come:

$$\hat{D}_\ell := \hat{d}_\ell^\dagger \hat{d}_\ell \quad (3.29)$$

La sua espressione esplicita è:

$$\begin{aligned} D_\ell &= \hat{d}_\ell^\dagger \hat{d}_\ell = \frac{m\omega}{2\hbar} \left( \left( r + \frac{\hbar\ell}{m\omega r} \right) - i \frac{p_r}{m\omega} \right) \left( \left( r + \frac{\hbar\ell}{m\omega r} \right) + i \frac{p_r}{m\omega} \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left( \left( r + \frac{\hbar\ell}{m\omega r} \right)^2 + \frac{p_r^2}{m^2\omega^2} + \left[ \left( r + \frac{\hbar\ell}{m\omega r} \right), i \frac{p_r}{m\omega} \right] \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left( r^2 + \frac{\hbar^2\ell^2}{m^2\omega^2 r^2} + \frac{p_r^2}{m^2\omega^2} + \frac{2\hbar\ell}{m\omega} - \frac{i}{m\omega} \left( -i\hbar + \frac{\hbar\ell}{m\omega} \frac{i\hbar}{r^2} \right) \right) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \left( \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} \right) + \ell - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Risulta quindi che:

$$\hat{D}_\ell = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{\mathcal{H}}_\ell + \ell - \frac{1}{2} \quad (3.30)$$

Di conseguenza,  $\hat{D}_\ell$  e  $\hat{\mathcal{H}}_\ell$  hanno gli stessi autostati  $|k, \ell\rangle$ :

$$\hat{D}_\ell |k, \ell\rangle = \mathcal{E}_{k,\ell} |k, \ell\rangle, \quad \mathcal{E}_{k,\ell} = \frac{1}{\hbar\omega} E_{k,\ell} + \ell - \frac{1}{2} \quad (3.31)$$

Ovviamente  $\hat{D}_0$  è il consueto operatore numero: infatti, il suo spettro è  $\mathcal{E}_{k,0} = 2k + 1$ .  
È necessario definire un ulteriore operatore:

$$\hat{\bar{D}}_\ell := \hat{d}_\ell \hat{d}_\ell^\dagger \quad (3.32)$$

Con un calcolo analogo al precedente, si trova che:

$$\hat{\bar{D}}_\ell = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{\mathcal{H}}_{\ell-1} + \ell + \frac{1}{2} \quad (3.33)$$

Risulta evidente quindi che:

$$\hat{\bar{D}}_{\ell+1} = \hat{D}_\ell + 2 \quad (3.34)$$

Questi operatori legano gli spettri di Hamiltoniane con  $\ell$  diversi: si supponga di avere  $|k, \ell\rangle$  autostato di  $\hat{\mathcal{H}}_\ell$  e  $\hat{D}_\ell$ :  $\hat{d}_{\ell+1}^\dagger |k, \ell\rangle$  è un autostato di  $\hat{\mathcal{H}}_{\ell+1}$  e  $\hat{D}_{\ell+1}$ , dato che:

$$\hat{D}_{\ell+1} \hat{d}_{\ell+1}^\dagger |k, \ell\rangle = \hat{d}_{\ell+1}^\dagger \hat{d}_{\ell+1} \hat{d}_{\ell+1}^\dagger |k, \ell\rangle = \hat{d}_{\ell+1}^\dagger (\hat{D}_\ell + 2) |k, \ell\rangle = (\mathcal{E}_{k,\ell} + 2) \hat{d}_{\ell+1}^\dagger |k, \ell\rangle$$

Questi operatori sono simili a degli operatori di scala:

$$\hat{D}_{\ell+1} \hat{d}_{\ell+1} |k, \ell\rangle = (\mathcal{E}_{k,\ell} + 2) \hat{d}_{\ell+1} |k, \ell\rangle \quad (3.35)$$

$$\hat{D}_{\ell-1} \hat{d}_\ell |k, \ell\rangle = (\mathcal{E}_{k,\ell} - 2) \hat{d}_\ell |k, \ell\rangle \quad (3.36)$$

In questo modo, è possibile costruire l'intero spettro, ricordando che  $\mathcal{E}_{k,0} = 2k + 1$ :

$$\begin{aligned} \hat{D}_1 \hat{d}_1^\dagger |k, 0\rangle &= (\mathcal{E}_{k,0} + 2) \hat{d}_1^\dagger |k, 0\rangle = (2k + 3) \hat{d}_1^\dagger |k, 0\rangle \\ \hat{D}_2 \hat{d}_2^\dagger \hat{d}_1^\dagger |k, 0\rangle &= (\mathcal{E}_{k,0} + 4) \hat{d}_2^\dagger \hat{d}_1^\dagger |k, 0\rangle = (2k + 5) \hat{d}_2^\dagger \hat{d}_1^\dagger |k, 0\rangle \\ &\vdots \\ \hat{D}_{\ell+1} \hat{d}_{\ell+1}^\dagger \dots \hat{d}_1^\dagger |k, 0\rangle &= (2k + 2\ell + 1) \hat{d}_{\ell+1}^\dagger \dots \hat{d}_1^\dagger |k, 0\rangle \end{aligned}$$

Si evince che  $\mathcal{E}_{k,\ell} = 2k + 2\ell + 1$ , quindi dall'Eq. 3.31 si ricava lo spettro dell' $\ell$ -esima Hamiltoniana:

$$E_{k,\ell} = \hbar\omega \left( 2k + \ell + \frac{3}{2} \right) \quad (3.37)$$

Questi sono tutti e soli i possibili autovalori di  $\hat{\mathcal{H}}_\ell$ : se per assurdo esistesse un suo autostato con un autovalore non presente in questa sequenza, ci si potrebbe comunque sempre ricondurre ad uno stato con  $\ell = 0$  applicando ripetutamente  $\hat{d}_\ell$ , ottenendo così un nuovo autovalore di  $\hat{\mathcal{H}}_0$ , il che è assurdo poiché il suo spettro completo (Eq. 3.27) è dato dall'Eq. 3.37.

Ovviamente, in maniera analoga, si può partire da uno stato  $|k, \ell\rangle$  ed ottenere gli stati minori fino a  $|k, 0\rangle$  applicando  $\hat{D}_\ell$ .

### 3.3.3 Degenerazione dello spettro

In coordinate cartesiane, lo spettro dell'oscillatore armonico isotropo è dato da  $E_n = \hbar\omega (n + \frac{3}{2})$ , con degenerazione  $d_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$ .

Questo stesso spettro si ottiene in coordinate sferiche ponendo in Eq. 3.37  $n = 2k + \ell$ , e si dimostra che la degenerazione è la stessa.

**Proposizione 3.3.1.** Ponendo  $n = 2k + \ell$ , si ha  $d_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$ .

*Dimostrazione.* Fissato  $n$  (dunque fissato il sottospazio di energia considerato), si ha che  $\ell$  è vincolato da  $0 \leq \ell \leq n$ , ma si nota anche che se  $n$  è pari/dispari anche  $\ell$  deve essere pari/dispari. Dunque, se  $n = 2n'$  si ha  $\ell = 2\ell'$ , con  $0 \leq \ell' \leq n'$ , mentre se  $n = 2n' + 1$  si ha  $\ell = 2\ell' + 1$ , con  $0 \leq \ell' \leq n'$ . Allora, ricordando che ogni stato  $\ell$  ha una degenerazione  $2\ell + 1$  a causa di  $m$ :

$$d_n^{(\text{pari})} = \sum_{\ell'=0}^{n'} (2(2\ell') + 1) = 2n'(n' + 1) + n' + 1 = n \left( \frac{n}{2} + 1 \right) + \frac{n}{2} + 1 = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

$$d_n^{(\text{dispari})} = \sum_{\ell'=0}^{n'} (2(2\ell' + 1) + 1) = 2n'(2n' + 1) + 3(n' + 1) = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

□

Dunque, sia che gli stati vengano scritti in coordinate cartesiane come  $|n_1, n_2, n_3\rangle$ , sia che vengano scritti in coordinate sferiche come  $|n, \ell, m\rangle$ , si ottiene giustamente lo stesso spettro. Naturalmente, è sempre possibile passare da una rappresentazione all'altra tramite una trasformazione unitaria in ciascun sottospazio di energia fissata.

#### 3.3.3.1 Teorema di degenerazione

Questo risultato deriva dal teorema di degenerazione.

**Teorema 3.3.1.** Data una Hamiltoniana  $\hat{\mathcal{H}}$  e due operatori  $\hat{A}, \hat{B} : [\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}] = [\hat{B}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ , allora  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow \hat{\mathcal{H}}$  ha spettro degenere.

*Dimostrazione.* Per assurdo sia lo spettro di  $\hat{\mathcal{H}}$  non degenere, ovvero per ogni autovalore  $E_n$  ci sia un solo autostato  $|n\rangle : \hat{\mathcal{H}}|n\rangle = E_n|n\rangle$ . Dato che  $[\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ , essi sono diagonalizzabili simultaneamente, e la stessa cosa vale per  $\hat{B}$ : essi hanno la comune base di autostati  $|n\rangle$ , dunque commutano, il che contraddice l'ipotesi. □

Si vede dunque che in ogni sottospazio degenere di autostati diverse combinazioni di autostati associati allo stesso autovalore diagonalizzano l'uno o l'altro operatore, ma non entrambi.

Questo teorema permette di legare la degenerazione dello spettro alle simmetrie dell'Hamiltoniana: ad esempio, nel caso del momento angolare, l'Hamiltoniana invariante per rotazione commuta con ciascuno dei  $\hat{L}_i$ , ma questi non commutano tra loro; di conseguenza, l'Hamiltoniana può avere un termine proporzionale a  $\hat{L}^2$ , ma non hai singoli  $\hat{L}_i$ , quindi si può scegliere di diagonalizzare  $\hat{L}^2$  e uno dei  $\hat{L}_i$ , ottenendo un grado di degenerazione come visto in precedenza.

Nel caso più generale, si determinano tutti gli operatori che commutano con l'Hamiltoniana e poi tutti gli stati ottenibili l'uno dall'altro tramite trasformazioni generate dai suddetti operatori (esponenziandoli): la degenerazione è il numero di stati contenuti in ciascun insieme di stati di questo tipo, e può essere vista come la dimensione della rappresentazione irriducibile del gruppo di trasformazioni generate dagli operatori considerati.



### 3.3.4 Simmetria dell'oscillatore armonico isotropo

Per l'oscillatore armonico isotropo si vede che il grado di degenerazione è maggiore di quello dovuto all'invarianza per rotazioni: infatti, per ogni valore di  $n$  ci sono più valori di  $\ell$  corrispondenti allo stesso valore di energia. Ciò significa che ci devono essere altri operatori commutanti con l'Hamiltoniana (ma non fra loro).

In coordinate cartesiane, si definiscono i 3 operatori di distruzione (e i 3 di creazione):

$$\hat{a}_i := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x}_i + i \frac{\hat{p}_i}{m\omega} \right) \quad (3.38)$$

In questo modo, è possibile separare l'Hamiltoniana come:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^3 \hbar\omega \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right) \quad (3.39)$$

Si definiscono dunque i 9 operatori:

$$\hat{\mathcal{O}}_{ij} := \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (3.40)$$

**Proposizione 3.3.2.**  $[\hat{\mathcal{O}}_{ij}, \hat{\mathcal{H}}] = 0 \wedge [\hat{\mathcal{O}}_{ij}, \hat{\mathcal{O}}_{ab}] \neq 0$ .

*Dimostrazione.* Ricordando che  $[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j] = -\delta_{ij}$ :

$$\begin{aligned} [\hat{\mathcal{O}}_{ij}, \hat{\mathcal{H}}] &= \hbar\omega \sum_{k=1}^3 [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k] = \hbar\omega \sum_{k=1}^3 \left( \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k] + [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k] \hat{a}_j \right) = \hbar\omega \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \right) = 0 \\ [\hat{\mathcal{O}}_{ij}, \hat{\mathcal{O}}_{ab}] &= [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b] = \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_j, \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b] + [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b] \hat{a}_j = \hat{a}_i^\dagger \delta_{ja} \hat{a}_b - \delta_{ib} \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_j \neq 0 \end{aligned}$$

□

L'Hamiltoniana può essere scritta come una combinazione lineare di 3 di questi operatori:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^3 \hbar\omega \left( \hat{\mathcal{O}}_{ii} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.41)$$

Rimangono dunque 8 operatori che commutano con l'Hamiltoniana ma non tra di loro e che, per il teorema di degenerazione, determinano il grado di degenerazione dello spettro. In particolare, 3 di questi sono proprio gli operatori del momento angolare:

$$\hat{L}_i = -i\hbar \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{\mathcal{O}}_{jk} \quad (3.42)$$

Ad esempio, con calcolo esplicito:

$$\hat{\mathcal{O}}_{12} - \hat{\mathcal{O}}_{21} = \frac{m\omega}{2\hbar} \left[ \left( \hat{x} - i \frac{\hat{p}_x}{m\omega} \right) \left( \hat{y} + i \frac{\hat{p}_y}{m\omega} \right) - \left( \hat{y} - i \frac{\hat{p}_y}{m\omega} \right) \left( \hat{x} + i \frac{\hat{p}_x}{m\omega} \right) \right] = \frac{i}{\hbar} (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = \frac{i}{\hbar} \hat{L}_z$$

Gli operatori  $\hat{\mathcal{O}}_{ij}$  sono i generatori del gruppo SU(3) (si vede dalle relazioni di commutazione): in generale, l'oscillatore armonico  $n$ -dimensionale ha simmetria SU( $n$ ). Gli operatori  $\hat{L}_i$  generano invece SU(2), che è un sottogruppo di SU(3) e corrisponde all'invarianza per rotazioni (se si restringe allo spin intero si ha solo SO(3)).

### 3.4 Potenziale coulombiano

Un problema di fondamentale importanza è quello della descrizione quantitativa degli atomi idrogenoidi, ovvero quelli in cui un nucleo atomico con  $Z$  protoni è circondato da un solo elettrone. Per tale sistema, l'equazione di Schrödinger radiale Eq. 3.5 diventa:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] u(r) = Eu(r) \quad (3.43)$$

Il problema può essere formulato in termini adimensionali definendo alcune quantità caratteristiche; innanzitutto, si definisce il *raggio di Bohr*:

$$a_0 := \frac{\hbar^2}{mZe^2} \quad (3.44)$$

Dall'analisi dimensionale dell'Eq. 3.43, si trova correttamente che  $a_0$  ha le dimensioni di una lunghezza, così da poter esprimere le lunghezze rispetto ad esso:  $r \mapsto ra_0$ . In questo modo:

$$\begin{aligned} Eu(r) &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \frac{\partial}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2ma_0^2 r^2} - \frac{Ze^2}{a_0 r} \right] u(r) \\ &= \left[ \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) - \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} \right] u(r) \\ &= \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2} \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{1}{r} \right] u(r) \end{aligned}$$

Si può dunque definire una costante d'energia:

$$W_0 := \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2} \quad (3.45)$$

Studiando gli stati legati, quindi con energie negative (si vede graficando il potenziale), dato che essi sono discreti si può scrivere  $E_n = c_n W_0$ , dunque la determinazione dello spettro si riduce al determinare i coefficienti  $c_n$ . L'equazione radiale adimensionale diventa quindi:

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{1}{r} \right] u(r) = c_n u(r) \quad (3.46)$$

**Teorema del viriale** In questi termini adimensionali, è possibile vedere perché i potenziali che nell'origine hanno andamento  $V(r) \sim r^{-\alpha}$  con  $\alpha \geq 2$  sono patologici. Dato che  $W_0 \sim a_0$ , si vede che  $\langle T \rangle \sim a_0^{-2}$  e  $\langle V \rangle \sim a_0^{-\alpha}$ , dunque per  $\alpha \geq 2$  il termine potenziale può essere reso a piacere più grande di quello cinetico considerando sistemi con  $a_0$  via via più piccolo: data una qualunque autofunzione, è possibile fabbricarne una ad energia più bassa prendendola più localizzata, ovvero non esiste uno stato di energia minima.

**Risoluzione analitica** Il primo metodo utilizzato per la risoluzione dell'Eq. 3.46 fu quello analitico (da Schrödinger). Innanzitutto, da stime asintotiche per  $r \rightarrow \infty$  e  $r \rightarrow 0$  si ottiene che:

$$u(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-kr} \quad u(r) \stackrel{r \rightarrow 0}{\sim} r^{\ell+1}$$

con  $k^2 = 2c_n$ . L'Ansatz risolutivo è quindi:

$$u(r) = e^{-kr} r^{\ell+1} f(r), \quad f(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n r^n$$

Affinché la serie si normalizzabile, è necessario che essa si arresti ad un certo  $n_{\max}$ : ciò avviene solo per particolari valori di  $k$ , ovvero  $k_n = (n + \ell)^{-1}$  con  $n \in \mathbb{N}$ . Si trova dunque lo spettro dell'energia, ridefinendo  $n \equiv n + \ell$  come il numero quantico principale:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (3.47)$$

La degenerazione dello spettro deriva dal fatto che diversi valori di  $\ell$  possono essere associati allo stesso  $n$ , oltre che al fatto che ogni  $\ell$  ha  $2\ell + 1$  stati associati.

### 3.4.1 Modello di Bohr

È propedeutico analizzare il modello quantizzato ad hoc proposto da Bohr per spiegare i dati sperimentali sullo spettro dell'atomo d'idrogeno. In particolare, Bohr suppose che l'elettrone nell'atomo di  $^1\text{H}$  si muovesse lungo orbite circolari e che il momento angolare fosse quantizzato in unità intere di  $\hbar$ . Sebbene dal punto di vista della meccanica quantistica moderna non abbia senso parlare di orbite ben definite, oltre al fatto che gli autovalori di  $\hat{L}^2$  sono  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ , dunque il momento angolare non è un multiplo intero di  $\hbar$ , partendo da queste ipotesi Bohr riuscì a spiegare esattamente i dati sperimentali.

Seguendo il ragionamento di Bohr, si supponga che il sistema sia descritto dalla seguente Lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + \frac{e^2}{r} \quad (3.48)$$

Se l'orbita è circolare,  $\dot{r} = 0$ , quindi l'equazione di Lagrange per  $r$  diventa:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = 0 \quad \Rightarrow \quad mr\dot{\theta}^2 = \frac{Ze^2}{r^2} \quad \Rightarrow \quad 2T = -V$$

Questa stessa relazione si poteva trovare col teorema del viriale, che vale anche per valori medi quantistici per il teorema di Ehrenfest, e per questo il ragionamento di Bohr porta al risultato corretto anche partendo da ipotesi non corrette. Si trova che l'energia vale quindi:

$$E = -T \quad (3.49)$$

L'equazione di Lagrange per  $\theta$  è:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta} \equiv \ell \text{ const.}$$

La seconda ipotesi di Bohr diventa quindi  $\ell = n\hbar$ , con  $n \in \mathbb{N}$ ; dall'equazione per  $r$  si trova:

$$mr^2 \dot{\theta}^2 = \frac{Ze^2}{r^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\ell^2}{mr^3} = \frac{Ze^2}{r^2} \quad \Rightarrow \quad r = \frac{\ell^2}{mZe^2} = n^2 a_0$$

Rielaborando l'Eq. 3.49:

$$E = -T = -\frac{1}{2} mr^2 \dot{\theta}^2 = -\frac{1}{2} \frac{\ell^2}{mr^2} = -\frac{1}{2} \frac{m(Ze^2)^2}{\ell^2} = -\frac{1}{2} \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

che è proprio lo spettro trovato in Eq. 3.47.

### 3.4.2 Simmetrie del problema di Keplero

#### 3.4.2.1 Caso classico

In termini adimensionali, il problema di Keplero classico può essere formulato tramite la seguente Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{r} \quad (3.50)$$

Le equazioni del moto sono quindi:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} = \nabla \frac{1}{r} = -\frac{\mathbf{x}}{r^3} \end{cases} \quad (3.51)$$

È necessario indagare gli invarianti del sistema, derivanti dalle sue simmetrie per il teorema di Noether. Una prima simmetria ovvia è quella per rotazioni.

**Proposizione 3.4.1.**  $\mathbf{L} := \mathbf{x} \times \mathbf{p}$  è una costante del moto.

*Dimostrazione.*  $\frac{d}{dt}(\mathbf{x} \times \mathbf{p}) = \dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{p} + \mathbf{x} \times \dot{\mathbf{p}} = \mathbf{p} \times \mathbf{p} - \frac{1}{r^3} \mathbf{x} \times \mathbf{x} = \mathbf{0}$ . □

Un'altra simmetria banale è quella per traslazione temporale, che risulta nella conservazione dell'energia  $E \equiv \mathcal{H}$ . Un'invariante non-banale è invece il *vettore di Laplace-Runge-Lenz*.

**Proposizione 3.4.2.**  $\mathbf{M} := \mathbf{p} \times \mathbf{L} - \frac{1}{r} \mathbf{x}$  è una costante del moto.

*Dimostrazione.* Basta mostrare che  $\frac{d}{dt}(\mathbf{p} \times \mathbf{L}) = \frac{d}{dt} \frac{\mathbf{x}}{r}$ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathbf{p} \times \mathbf{L})_i &= (\dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L})_i = \left( -\frac{\mathbf{x}}{r^3} \times \mathbf{L} \right)_i = -\frac{1}{r^3} \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} x_j L_k = -\frac{1}{r^3} \sum_{j,k,a,b=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{kab} x_j x_a p_b \\ &= -\frac{1}{r^3} \sum_{j,k,a,b=1}^3 (\delta_{ia} \delta_{jb} - \delta_{ib} \delta_{ja}) x_j x_a p_b = -\frac{1}{r^3} (x_i \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} - r^2 p_i) = \frac{\dot{x}_i}{r} - \frac{x_i}{r^3} \sum_{j=1}^3 x_j \dot{x}_j = \frac{d}{dt} \frac{x_i}{r} \end{aligned}$$

□

A priori si trovano quindi 7 invarianti. Tuttavia, essendo lo spazio delle fasi di dimensione 6 per il problema di Keplero, vi possono essere al massimo 6 costanti del moto indipendenti; inoltre, se ci si restringe a considerare orbite chiuse, il numero d'invarianti indipendenti scende a 5 poiché l'origine temporale diventa irrilevante.

Il corretto numero di costanti del moto indipendenti si ritrova osservando che solo una delle tre componenti del vettore LRL è indipendente.

**Proposizione 3.4.3.**  $\mathbf{M} \cdot \mathbf{L} = 0$ .

*Dimostrazione.*  $\mathbf{M} \cdot \mathbf{L} = (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) \cdot \mathbf{L} - \frac{1}{r} \mathbf{x} \cdot \mathbf{L} = -\frac{1}{r} \mathbf{x} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{p}) = 0$ . □

**Proposizione 3.4.4.**  $\mathbf{M}^2 = 1 + 2\mathbf{L}^2 \mathcal{H}$ .

*Dimostrazione.* Ricordando la Prop. 1.5.1:

$$\begin{aligned}\mathbf{M}^2 &= \|\mathbf{p} \times \mathbf{L}\|^2 + \left\| \frac{\mathbf{x}}{r} \right\|^2 - 2 \frac{\mathbf{x}}{r} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) = \mathbf{p}^2 \mathbf{L}^2 - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{L})^2 + 1 - \frac{2}{r} \sum_{i,j,k=1}^3 x_i \epsilon_{ijk} p_j L_k \\ &= \mathbf{p}^2 \mathbf{L}^2 + 1 - \frac{2}{r} \sum_{k=1}^3 L_k^2 = 1 + \mathbf{L}^2 \left( \mathbf{p}^2 - \frac{2}{r} \right) = 1 + 2\mathbf{L}^2 \mathcal{H}\end{aligned}$$

□

Inoltre, per un'orbita a sezione conica di eccentricità  $\varepsilon$ , si dimostra che  $\|\mathbf{M}\| = \varepsilon$ : si vede quindi che per orbite chiuse, dato che  $\varepsilon \leq 1$ , l'energia deve essere negativa. Inoltre, per orbite ellittiche si dimostra che  $\mathbf{M}$  è diretto lungo l'asse maggiore dell'ellisse.

Si vede dunque che l'unica informazione utile contenuta nel vettore LRL è quella relativa al suo verso, poiché il piano d'appartenenza e il modulo sono fissati dagli altri invarianti del sistema.

### 3.4.2.2 Caso quantistico

Si consideri la seguente Hamiltoniana idrogenoide adimensionale:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} - \frac{1}{r} \quad (3.52)$$

È evidente che, analogamente al caso classico, si conservano momento angolare (generatore delle rotazioni) ed energia.

**Definizione 3.4.1.** Si definisce l'*operatore di Laplace-Runge-Lenz* come:

$$\hat{\mathbf{M}} := \frac{1}{2} \left( \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}} \right) - \frac{\hat{\mathbf{x}}}{r} \quad (3.53)$$

In componenti:

$$\hat{M}_i = \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \{ \hat{p}_j, \hat{L}_k \} - \frac{\hat{x}_i}{r} \quad (3.54)$$

La definizione tramite l'anticommutatore è necessaria per il fatto che  $\hat{\mathbf{p}}$  e  $\hat{\mathbf{L}}$  non commutano: l'anticommutatore di due operatori hermitiani non commutanti è infatti hermitiano.

Anche nel caso quantistico si trova che il vettore LRL è un invariante del sistema, ovvero commuta con l'Hamiltoniana.

**Proposizione 3.4.5.**  $[\hat{M}_i, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ .

*Dimostrazione.* Ricordando che  $[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{x}_k$  e  $[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{p}_k$ , oltre al fatto che  $[\hat{L}_i, \hat{r}] = [\hat{L}_i, \hat{p}] = 0$  ( $\hat{p} \equiv \|\hat{\mathbf{p}}\|$ ), dato che in generale  $[\{\hat{A}, \hat{B}\}, \hat{C}] = \{\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]\} + \{\hat{B}, [\hat{A}, \hat{C}]\}$ :

$$\begin{aligned}[\hat{M}_i, \hat{\mathcal{H}}] &= \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \{ \hat{p}_j, \hat{L}_k \}, \hat{\mathcal{H}} - \sum_{j=1}^3 \left[ \frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{p}_j \hat{p}_j \right] = \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \{ \hat{L}_k, [\hat{p}_j, \hat{\mathcal{H}}] \} - \sum_{j=1}^3 \left[ \frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{p}_j \hat{p}_j \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \left\{ \hat{L}_k, \left[ \hat{p}_j, -\frac{1}{r} \right] \right\} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \left( \hat{p}_j \left[ \frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{p}_j \right] + \left[ \frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{p}_j \right] \hat{p}_j \right)\end{aligned}$$

Dato  $\hat{L}_i \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} (\hat{p}_k \hat{x}_j + [\hat{x}_j, \hat{p}_k]) = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} (\hat{p}_k \hat{x}_j + i\hbar \delta_{jk}) = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{p}_k \hat{x}_j$  ed espandendo gli ultimi due commutatori sulla base delle coordinate:

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_i, \hat{\mathcal{H}}] &= -\frac{i\hbar}{2} \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \left\{ \hat{L}_k, \frac{\hat{x}_j}{r^3} \right\} - \frac{i\hbar}{2} \sum_{j=1}^3 \left( \hat{p}_j \left( \partial_j \frac{x_i}{r} \right) + \left( \partial_j \frac{x_i}{r} \right) \hat{p}_j \right) \\
&= -\frac{i\hbar}{2} \sum_{j,k,a,b=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{kab} \left( \frac{\hat{x}_j}{r^3} \hat{x}_a \hat{p}_b + \hat{p}_b \hat{x}_a \frac{\hat{x}_j}{r^3} \right) - \frac{i\hbar}{2} \sum_{j=1}^3 \left( \hat{p}_j \left( \frac{\delta_{ij}}{r} - \frac{\hat{x}_i \hat{x}_j}{r^3} \right) + \left( \frac{\delta_{ij}}{r} - \frac{\hat{x}_i \hat{x}_j}{r^3} \right) \hat{p}_j \right) \\
&= -\frac{i\hbar}{2} \sum_{j,a,b=1}^3 (\delta_{ia} \delta_{jb} - \delta_{ib} \delta_{ja}) \left( \frac{\hat{x}_j}{r^3} \hat{x}_a \hat{p}_b + \hat{p}_b \hat{x}_a \frac{\hat{x}_j}{r^3} \right) - \frac{i\hbar}{2} \left( \hat{p}_i \frac{1}{r} - \frac{\hat{x}_i}{r^3} \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{r} \hat{p}_i - \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{x}} \frac{\hat{x}_i}{r^3} \right) \\
&= -\frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\hat{x}_i}{r^3} \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} - \frac{1}{r} \hat{p}_i + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{x}} \frac{\hat{x}_i}{r^3} - \hat{p}_i \frac{1}{r} \right) - \frac{i\hbar}{2} \left( \hat{p}_j \frac{1}{r} - \frac{\hat{x}_i}{r^3} \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{r} \hat{p}_j - \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{x}} \frac{\hat{x}_i}{r^3} \right) = 0
\end{aligned}$$

□

Dato che la stessa discussione sulle costanti del moto classiche si applica al caso quantistico, ci sono due invarianti non-indipendenti, che anche in questo caso sono componenti del vettore LRL.

**Proposizione 3.4.6.**  $\hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{M}} = 0$ .

*Dimostrazione.* Date le identità  $\hat{L}_k \hat{p}_j = \hat{p}_j \hat{L}_k + i\hbar \sum_{a=1}^3 \epsilon_{kja} \hat{p}_a$  e  $\sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{kja} = -\sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{ajk} = -2\delta_{ia}$ , si può riscrivere il vettore LRL come:

$$\hat{M}_i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \frac{\hat{p}_j \hat{L}_k + \hat{L}_k \hat{p}_j}{2} - \frac{\hat{x}_j}{r} = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{p}_j \hat{L}_k + \frac{i\hbar}{2} \sum_{j,k,a=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{kja} \hat{p}_a - \frac{\hat{x}_i}{r} = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{p}_j \hat{L}_k - i\hbar \hat{p}_i - \frac{\hat{x}_i}{r}$$

Di conseguenza, ricordando che il simbolo di Levi-Civita estrae la parte antisimmetrica:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{L}} &= \sum_{i=1}^3 \hat{M}_i \hat{L}_i = \sum_{i,j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{p}_j \hat{L}_k \hat{L}_i - i\hbar \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{L}} - \frac{1}{r} \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \sum_{i,j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{p}_j \hat{L}_k \hat{L}_i \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i,j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{p}_j \left( [\hat{L}_k, \hat{L}_i] + \{\hat{L}_k, \hat{L}_i\} \right) = \frac{i\hbar}{2} \sum_{i,j,k,a=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{kia} \hat{p}_j \hat{L}_a = \frac{i\hbar}{2} \sum_{j=1}^3 \hat{p}_j \hat{L}_j = \frac{i\hbar}{2} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = 0
\end{aligned}$$

□

**Proposizione 3.4.7.**  $\hat{M}^2 = \mathbf{I} + 2\hat{\mathcal{H}}(\hat{L}^2 + \hbar^2)$ .

Si ritrovano quindi i consueti 5 integrali del moto.

**Proposizione 3.4.8.**  $[\hat{L}_i, \hat{M}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{M}_k$ .

**Proposizione 3.4.9.**  $[\hat{M}_i, \hat{M}_j] = -2i\hbar \hat{\mathcal{H}} \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$ .