

Fisica Quantistica 2

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

Leonardo Cerasi¹, Lucrezia Bioni

GitHub repository: [LeonardoCerasi/notes](#)

¹leo.cerasi@pm.me

Indice

Indice	ii
Introduzione	1
I Meccanica Quantistica in più Dimensioni	2
1 Sistemi Quantistici Multidimensionali	3
1.1 Spazio prodotto diretto	3
1.2 Sistemi multidimensionali	3
1.2.1 Coordinate cartesiane	4
1.3 Separabilità	5
1.3.1 Problemi separabili in coordinate cartesiane	5
1.3.2 Hamiltoniane separabili	5
1.4 Problema dei due corpi quantistico	7
1.4.1 Trasformazioni lineari di coordinate	8
1.5 Problemi centrali	8
2 Momento Angolare	12
2.1 Momento angolare e rotazioni	12
2.2 Proprietà	13
2.2.1 Espressione esplicita	13
2.2.2 Commutatori	13
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
3 Sistemi Tridimensionali	24
3.1 Equazione di Schrödinger radiale	24
3.1.1 Condizioni al contorno	25

Introduzione

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

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

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

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

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

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

Parte I

Meccanica Quantistica in più Dimensioni

Sistemi Quantistici Multidimensionali

1.1 Spazio prodotto diretto

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

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

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

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

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

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

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

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

1.2 Sistemi multidimensionali

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.2.1 Coordinate cartesiane

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

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

In forma vettoriale, è possibile scrivere:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.3 Separabilità

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

1.3.1 Problemi separabili in coordinate cartesiane

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

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

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

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

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

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

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

Dimostrazione. Si vede facilmente che:

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

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

1.3.2 Hamiltoniane separabili

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

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

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

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

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

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

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

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

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

mentre i suoi autostati sono:

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

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

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

Ricordando la forma esplicita delle autofunzioni:

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

è facile ricavare lo spettro dell'Hamiltoniana:

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

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

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

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

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

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

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

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

1.4 Problema dei due corpi quantistico

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

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

Le variabili canoniche soddisfano la relazione di commutazione:

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

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

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

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

A queste vanno associate i rispettivi impulsi congiunti:

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

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

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

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

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

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

Lo spettro è facilmente determinabile poiché sono due problemi unidimensionali.

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

1.4.1 Trasformazioni lineari di coordinate

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

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

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

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

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

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

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

□

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

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

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

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

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

1.5 Problemi centrali

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

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

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

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

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

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 ε : 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}_ε , definito come:

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

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

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

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

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

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

2.2 Proprietà

2.2.1 Espressione esplicita

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

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

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

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

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

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

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 ℓ 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 λ_ℓ 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 ℓ 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 ℓ , 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 ℓ 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 φ 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 ℓ 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 ψ 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 2π attorno l'asse z e ricordando che $|\pm\rangle$ sono autostati di σ_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 2π uno stato di spin semi-intero acquista un segno negativo, mentre per tornare in sé stesso è necessaria una rotazione di 4π : 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:

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

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 ℓ 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_{ℓ} , 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 per $r \rightarrow 0^+$:

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