CAPITOLO 2

La descrizione quantistica delle simmetrie

I discorsi fatti finora acquistano una forma speciale, e sotto molti aspetti più semplice, quando ci si limita a una teoria quantistica. Il concetto di stato ha una precisa traduzione matematica: quella di raggio unitario di uno spazio di Hilbert (insieme di vettori normalizzati che differiscono tra loro solo per un fattore di fase). Il concetto di osservabile si traduce in quello di operatore autoaggiunto, e il valore di un'osservabile in un dato stato diviene il "valore medio" dell'operatore:

$$\langle A \rangle_{\mathrm{S}} = \langle s|A|s \rangle$$

dove A è l'operatore associato all'osservabile di ugual nome, e $|s\rangle$ è uno qualsiasi dei vettori unitari corrispondenti allo stato S.

Nota: Ci si può chiedere se l'insieme delle osservabili coincida con quello degli op. autoaggiunti, o se viceversa possano esistere op. autoaggiunti che non corrispondono a osservabili. Si tratta di un problema importante per i fondamenti della meccanica quantistica, che qui non possiamo affrontare. Nel seguito ci atterremo sempre alla prima alternativa, come è usuale nella m.q. ordinaria.

Tra le osservabili quantistiche ha interesse considerare i *proiettori*, e in particolare quelli degli stati puri. Il proiettore P_{S_1} sullo stato S_1 è definito dalla proprietà

$$P_{\mathrm{S}_1}|s_2\rangle = |s_1\rangle\langle s_1|s_2\rangle,$$

che si abbrevia in

$$P_{\mathrm{S}_1} = |s_1\rangle\langle s_1|.$$

Se accanto al riferimento R consideriamo R$'$, e pensiamo a stati soggettivamente identici: S_1 e S'_1, S_2 e S'_2, dovremo avere

$$\langle P_{\mathrm{S}_1} \rangle_{\mathrm{S}_2} = \langle P_{\mathrm{S}'_1} \rangle_{\mathrm{S}'_2},$$

ossia

$$\begin{aligned}
\langle s_2|P_{\mathrm{S}_1}|s_2\rangle &= \langle s'_2|P_{\mathrm{S}'_1}|s'_2\rangle \\
\langle s_2|s_1\rangle\langle s_1|s_2\rangle &= \langle s'_2|s'_1\rangle\langle s'_1|s'_2\rangle \\
|\langle s_1|s_2\rangle|^2 &= |\langle s'_1|s'_2\rangle|^2. \qquad (2\text{–}1)
\end{aligned}$$

Si noti che ragionare sui proiettori non è una restrizione: grazie al teorema spettrale, se resta invariato il valor medio di ogni proiettore, questo è vero per ogni osservabile.

Si arriva così alla definizione di simmetria secondo Wigner: *simmetria è una trasformazione degli stati* (dei raggi unitari) *che conserva le probabilità di transizione.*

Siamo ora in condizioni di enunciare e interpretare il fondamentale teorema di Wigner: *data una simmetria, intesa come trasformazione degli stati che soddisfa la* (2–1), *solo due casi sono possibili*:

a) *esiste un operatore* unitario U *tale che* $|s'\rangle = U|s\rangle$

b) *esiste un operatore* antiunitario A *tale che* $|s'\rangle = A|s\rangle$.

Ricordiamo che un operatore unitario è definito come un automorfismo dello spazio di Hilbert, ossia un'applicazione lineare bigettiva che conserva i prodotti scalari; un operatore antiunitario invece è un'applicazione *antilineare*, che quindi manda ogni prodotto scalare nel complesso coniugato.

Si dimostra che il caso antiunitario si presenta se e solo se la simmetria in questione implica l'inversione del tempo; nel seguito escluderemo questo caso. Dunque d'ora in poi, nella descrizione quantistica, *simmetria sarà per noi sinonimo di operatore unitario.*

Dobbiamo subito chiederci: se U è un operatore di simmetria, dal punto di vista attivo, ossia come trasformazione degli stati, come stanno le cose dal punto di vista passivo? Consideriamo i due riferimenti R e R′, ai quali sarà associata una trasformazione delle osservabili $A \mapsto A'$. Per due stati S e S′ soggettivamente identici, dovrà essere

$$\forall A: \quad \langle A\rangle_{\mathrm{S}} = \langle A'\rangle_{\mathrm{S'}}$$

che è quanto dire

$$\langle s|A|s\rangle = \langle s'|A'|s'\rangle = \langle s|\,U^+ A'\,U\,|s\rangle.$$

Da qui segue subito

$$A' = U A\, U^+ = U A\, U^{-1}. \tag{2–2}$$

La (2–2) è la legge di trasformazione *passiva* delle osservabili.

Resta da precisare la forma quantistica del concetto di stato simmetrico e di quello di osservabile simmetrica. Quanto al primo, il fatto che lo stato S debba restare invariato sotto la simmetria si traduce nella richiesta che il vettore $|s\rangle$ cambi *solo per un fattore di fase*, ossia che sia un *autovettore* di U:

$$U|s\rangle = |s\rangle\, e^{i\varphi}$$

(ricordiamo che gli autovalori di un operatore unitario sono numeri complessi di modulo 1). La condizione di osservabile simmetrica segue subito dalla (2–2):

$$A' = A \quad \Leftrightarrow \quad U A\, U^{-1} = A \quad \Leftrightarrow \quad [U, A] = 0.$$

Dunque osservabili simmetriche sono tutte e sole quelle che *commutano* con l'operatore di simmetria.

La descrizione quantistica dell'invarianza

Sia $|s, t\rangle$ il vettore funzione del tempo che descrive lo stato S (nel senso di Schrödinger); $|s', t\rangle$ quello dello stato trasformato. Sia poi U l'operatore unitario della simmetria, che è fissato dalla definizione fisica della simmetria, e perciò non dipende dal tempo. La condizione d'invarianza richiede che a ogni t i vettori $|s', t\rangle$ e $U|s, t\rangle$ rappresentino lo stesso stato.

Sappiamo che l'evoluzione temporale è descritta da un operatore unitario $T(t)$, tale che $|s, t\rangle = T(t)\,|s, 0\rangle$, e che soddisfa

$$i\hbar\,\frac{dT}{dt} = H\,T.$$

Dunque abbiamo da un lato

$$|s', t\rangle = T(t)\,|s', 0\rangle = T(t)\,U|s, 0\rangle$$

e dall'altro

$$U|s, t\rangle = U\,T(t)\,|s, 0\rangle$$

e questi debbono rappresentare lo stesso stato. Ciò richiede che sia

$$T(t)\,U = U\,T(t)\,e^{i\eta(t)} \tag{2–3}$$

con $\eta(t)$ una qualche funzione per ora arbitraria, a parte la condizione $\eta(0) = 0$ che si ricava dalla (2–3) tenendo presente che $T(0) = 1$.

Derivando la (2–3) rispetto a t:

$$HU = UH - \hbar\dot{\eta}\,U$$

$$U^{+}H\,U = H - \hbar\dot{\eta}. \tag{2–4}$$

Prendiamo il valor medio della (2–4) sullo stato S, ricordando che U trasforma S in S$'$:

$$\langle H\rangle_{\mathrm{S}'} = \langle H\rangle_{\mathrm{S}} - \hbar\dot{\eta}.$$

Se assumiamo che lo spettro degli autovalori di H sia limitato inferiormente (questa si chiama la *condizione spettrale*) l'ultima equazione impone $\dot{\eta} \le 0$. Ma se U è un'invarianza lo è anche $U^{+} = U^{-1}$, e per U^{+} vale ancora la (2–3), con $-\eta$ al posto di η. Allora $\dot{\eta} = 0$, ossia $\eta = 0$ per qualunque t. Abbiamo così dimostrato il seguente teorema: *se per H vale la condizione spettrale, la simmetria U è un'invarianza sse*

$$[H, U] = 0 \qquad \text{ovvero} \qquad [T, U] = 0.$$

Poiché in caso d'invarianza U commuta con T, abbiamo a che fare con una *costante del moto*, ossia con una grandezza *conservata*: in meccanica quantistica *un'invarianza è sempre associata a una legge di conservazione*, mentre sappiamo che in meccanica classica ciò è vero (teorema di Nöther) solo se la simmetria in questione fa parte di una famiglia descritta da un parametro continuo (*gruppo di Lie*). È questo il caso delle rotazioni, ma non dell'inversione spaziale, di cui parleremo nel prossimo capitolo.

Nota: Può sembrare improprio parlare di U come di una grandezza conservata: infatti un operatore unitario non è generalmente associato a un'osservabile. Però esiste sempre uno (e un solo) operatore autoaggiunto A tale che $U = e^{iA}$, e se U commuta con T lo stesso accade per A: dunque A è veramente un'osservabile costante del moto, ossia conservata.

Esempio: le rotazioni

Applichiamo quanto precede al caso della simmetria già vista al Cap. 1: la rotazione di un generico angolo α attorno all'asse z. Partiamo dalla legge di trasformazione (passiva) delle osservabili:

$$\begin{aligned} Ux\,U^+ &= x' = x\cos\alpha + y\sin\alpha \\ Uy\,U^+ &= y' = -x\sin\alpha + y\cos\alpha \\ Uz\,U^+ &= z' = z. \end{aligned} \tag{2–5}$$

Qui converrà considerare insieme tutte le possibili rotazioni con angolo α qualsiasi, e pensare perciò U funzione di α; supporremo inoltre che la funzione $U(\alpha)$ sia differenziabile.

Riscriviamo la prima delle (2–5) come segue

$$Ux = x\,U\cos\alpha + y\,U\sin\alpha$$

e deriviamola rispetto ad α:

$$\begin{aligned} \frac{dU}{d\alpha}\,x &= x\,\frac{dU}{d\alpha}\cos\alpha - x\,U\sin\alpha + y\,\frac{dU}{d\alpha}\sin\alpha + y\,U\cos\alpha \\ &= Ux\,U^+\,\frac{dU}{d\alpha} + Uy \end{aligned}$$

che possiamo scrivere

$$U^+\,\frac{dU}{d\alpha}\,x = x\,U^+\,\frac{dU}{d\alpha} + y$$

e poi

$$[V, x] = y$$

avendo posto, per brevità, $V = U^+\,(dU/d\alpha)$.

Si procede allo stesso modo con la seconda e la terza delle (2–5), e si ottiene in tutto:

$$[V, x] = y, \qquad [V, y] = -x, \qquad [V, z] = 0. \tag{2–6}$$

Dobbiamo dunque trovare un operatore che abbia con x, y, z le relazioni di commutazione scritte. Una soluzione è $L_z/i\hbar$; ce ne sono altre? Ovviamente sì: ad es. tutti gli operatori del tipo

$$V = \frac{1}{i\hbar}\,(L_z + f(x, y, z)) \tag{2–7}$$

con f reale arbitraria (reale per avere U unitario).

La ragione per cui V è indeterminato è la seguente: noi abbiamo imposto soltanto le relazioni di commutazione con x, y, z, e non con *tutte* le osservabili del sistema. A rigore non occorre usarle tutte: basta considerare un insieme di osservabili che generi (per moltiplicazioni e somme) tutta *l'algebra delle osservabili* del nostro sistema. Il punto è che per ora non avevamo neppure precisato il sistema; tanto meno potevamo conoscere la detta algebra.

Una particella senza spin

Supponiamo, per fissare le idee, che il nostro sistema sia un'unica particella senza spin: allora l'algebra è generata da 6 osservabili: x, y, z, p_x, p_y, p_z (che però non sono *libere*, causa le relazioni di commutazione canoniche). Dobbiamo dunque assegnare le relazioni di commutazione di V con tutte queste, il che è quanto dire che dobbiamo scrivere, accanto alle (2–5), altrettante equazioni di trasformazione per i momenti coniugati. Scriveremo queste equazioni nella stessa forma delle (2–5), ossia:

$$\begin{aligned} U p_x U^+ &= p'_x = p_x \cos\alpha + p_y \sin\alpha \\ U p_y U^+ &= p'_y = -p_x \sin\alpha + p_y \cos\alpha \\ U p_z U^+ &= p'_z = p_z. \end{aligned} \tag{2–8}$$

Ciò equivale a richiedere che l'impulso, come la posizione, per rotazioni si trasformi come un vettore.

Procedendo come sopra, si ottengono per V le nuove relazioni di commutazione:

$$[V, p_x] = p_y, \qquad [V, p_y] = -p_x, \qquad [V, p_z] = 0$$

ed è facile vedere che queste richiedono che f nella (2–7) sia una costante, che possiamo scegliere nulla, perché in ogni caso produrrebbe in U un inessenziale fattore di fase.

Abbiamo dunque

$$\frac{dU}{d\alpha} = \frac{1}{i\hbar}\, U\, L_z,$$

che ha la soluzione

$$U(\alpha) = \exp\left(\frac{\alpha}{i\hbar}\, L_z\right) \tag{2–9}$$

(abbiamo tenuto conto che $U(0) = 1$).

Particella con spin

Per una particella dotata di spin occorre assegnare la legge di trasformazione di altre osservabili: s_x, s_y, s_z. Non c'è niente di contraddittorio ad assumere

$$s'_x = s_x, \qquad s'_y = s_y, \qquad s'_z = s_z, \tag{2–10}$$

nel qual caso l'operatore di simmetria resta quello già determinato. Ma è anche possibile porre invece

$$\begin{aligned} U s_x U^+ &= s'_x = s_x \cos\alpha + s_y \sin\alpha \\ U s_y U^+ &= s'_y = -s_x \sin\alpha + s_y \cos\alpha \\ U s_z U^+ &= s'_z = s_z \end{aligned} \tag{2–11}$$

cioè far trasformare lo spin come un vettore; ed è facile vedere, procedendo in maniera analoga a quella già usata per le p, che ora dobbiamo prendere

$$U = \exp\left[\frac{\alpha}{i\hbar}\,(L_z + s_z)\right].$$

Nasce il problema: come possono esistere due diverse definizioni della simmetria per rotazioni? La risposta è che in effetti le possibili definizioni non sono due, ma infinite, finché ci si limita a parlare di una simmetria definita in modo arbitrario; il punto è se poi la definizione riuscirà utile oppure no. In pratica una definizione è utile se dà luogo a un'invarianza (ma non sempre, e non soltanto!): dobbiamo dunque chiederci se avremo invarianza sotto la trasformazione (2–10) o sotto la (2–11). Ovviamente ciò dipende dalla dinamica del sistema, ossia dalle interazioni presenti, che si riflettono nell'espressione della hamiltoniana.

Supponiamo ad es. di aver a che fare con un atomo d'idrogeno, e che si possa trascurare il momento magnetico dell'elettrone: allora lo spin non compare nella hamiltoniana ed è una costante del moto. Ne segue che tanto la (2–10) quanto la (2–11) sono invarianze.

Se invece c'interessa risolvere la struttura fina l'interazione spin-orbita è importante; nella hamiltoniana compare un termine proporzionale a $\vec{L} \cdot \vec{s}$ che non commuta con s_z ma commuta con $L_z + s_z$: allora soltanto la (2–11) è un'invarianza esatta per il sistema. Anche la (2–10) però riesce utile, perché è un'invarianza *approssimata*, e può essere usata per una prima classificazione dei livelli.

Sistemi di più particelle

La discussione di questo caso segue la falsariga di quella già fatta. Per ciascuna particella dobbiamo scegliere la legge di trasformazione delle osservabili, e possiamo farlo indipendentemente per ogni particella, perché le osservabili di particelle distinte commutano fra loro e nel loro insieme generano l'intera algebra. Come sopra però le infinite simmetrie che si rendono così possibili non sono tutte ugualmente utili: quali diano luogo ad invarianza dipende dalla dinamica del sistema.

Una cosa è certa: se il sistema è isolato è garantita l'invarianza della hamiltoniana sotto la rotazione simultanea di tutte le osservabili, che si ottiene prendendo

$$U = \exp\left(\frac{\alpha}{i\hbar}\,J_z\right)$$

dove J_z indica, come di solito, il momento angolare totale (orbitale + spin) dell'intero sistema. Già sappiamo che ciò equivale a dire che J_z è una costante del moto, mentre non è detto che lo siano i vari momenti angolari di cui è somma (sebbene ciò non sia escluso a priori).

Un esempio utile ci è fornito dalla tradizionale classificazione dei livelli atomici secondo *configurazioni*, *termini*, ecc. Consideriamo ad es. l'atomo di He: in una prima, grossolana approssimazione possiamo trascurare del tutto l'interazione coulombiana fra i due elettroni (nonché gli spin). Allora la hamiltoniana del sistema è la somma di due parti, ciascuna relativa a un singolo elettrone. Ne segue che la simmetria che si ottiene ruotando le osservabili di un elettrone e lasciando invariate quelle dell'altro è un'invarianza della hamiltoniana, il che equivale a dire che sono separatamente costanti del moto L_{1z} e L_{2z}, oltre che la loro somma.

L'interazione coulombiana e^2/r_{12} non è invariante per le rotazioni separate, che non lasciano fissa la distanza fra gli elettroni. Poiché tale interazione è tutt'altro che trascurabile, se ne teniamo conto non solo l'invarianza sopra descritta viene rotta, ma l'effetto è importante; tuttavia lo schema di livelli che nasce dalla prima approssimazione conserva una sua validità come punto di partenza per le approssimazioni successive.