

## **Capitolo 4**

# **Teoria del momento angolare e Sistemi Tridimensionali**

## 4.1 Momento Angolare

Nei problemi tridimensionali una variabile dinamica importante è il momento angolare. In meccanica quantistica il momento angolare risulta quantizzato in maniera universale (*i.e.*, indipendente dal sistema considerato), in conseguenza dell'algebra degli operatori di momento angolare e della positività della norma degli stati.

### 4.1.1 Introduzione

L'equazione di Schrödinger per una particella che si muove in un potenziale a simmetria centrale è:

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (4.1)$$

In coordinate sferiche ( $\Delta \equiv \nabla^2$ )

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \right] \psi \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Separando le variabili

$$\psi = R(r)\Phi(\theta, \phi), \quad (4.3)$$

si ha

$$\frac{\left[ \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \right] R(r)}{R(r)} = \frac{\hat{L}^2 \Phi(\theta, \phi)}{\Phi(\theta, \phi)} = \lambda, \quad (4.4)$$

dove l'operatore  $\hat{L}^2$  è definito da

$$\hat{L}^2 \Phi(\theta, \phi) = -\left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \Phi(\theta, \phi). \quad (4.5)$$

$\hat{L}^2$  risulta l'operatore del momento angolare quadrato,  $(\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2$  (vedi Sottocapitolo 4.1.5),  $\lambda$  è il suo autovalore. L'equazione

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (4.6)$$

è chiamata *equazione di Schrödinger radiale*.

In meccanica classica l'isotropia dello spazio implica che in un sistema chiuso il momento angolare totale

$$\mathbf{L} = \sum_a (\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a) \quad (4.7)$$

è conservato. Lo stesso vale per il momento angolare di una particella che si muove in un potenziale a simmetria centrale. Troveremo in seguito che in meccanica quantistica un analogo risultato è valido.

### 4.1.2 Definizione e regole di commutazione

L'operatore di momento angolare in meccanica quantistica (per una singola particella) è data da

$$\mathbf{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla. \quad (4.8)$$

In componenti,

$$\begin{aligned} L_x \equiv L_1 &= yp_z - zp_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}); \\ L_y \equiv L_2 &= zp_x - xp_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}); \\ L_z \equiv L_3 &= xp_y - yp_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Dovuto al fatto che le componenti delle coordinate e degli impulsi non coniugati commutano (per es.  $[y, p_z] = 0$ ), non ci sono problemi di ambiguità nel definire il momento angolare quantistico a partire da quello classico.

Se il sistema contiene più di una particella il momento angolare totale è definito da

$$\mathbf{L}_{tot} = \sum_a (\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a) \quad (4.10)$$

dove la somma si riferisce alle particelle presenti.

È conveniente introdurre il tensore antisimmetrico

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{se } (ijk) = (123) \text{ o permutazioni pari} \\ -1, & \text{se } (ijk) = (213) \text{ o permutazioni pari} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (4.11)$$

$\epsilon_{ijk}$  è totalmente antisimmetrico per scambi di due degli indici; inoltre è invariante per permutazioni cicliche

$$\epsilon_{ijk} = \epsilon_{jki} = \epsilon_{kij}. \quad (4.12)$$

La componente  $i$ -sima del momento angolare è allora

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k, \quad (4.13)$$

dove la somma sugli indici ripetuti è implicita.

Facendo uso dei commutatori

$$\begin{aligned} [x_i, x_j] &= [p_i, p_j] = 0; \\ [x_i, p_j] &= i\hbar \delta_{ij}, \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (4.14)$$

è facile trovare i commutatori tra le componenti del momento angolare,

$$\boxed{[L_1, L_2] = i\hbar L_3; \quad [L_2, L_3] = i\hbar L_1; \quad [L_3, L_1] = i\hbar L_2,} \quad (4.15)$$

o in forma più compatta,

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k. \quad (4.16)$$

Le stesse regole di commutazione valgono per le componenti dell'operatore di momento angolare totale

$$\mathbf{L}_{tot} = \sum_a (\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a) \quad (4.17)$$

nei sistemi con più di una particella.

Dall'Hermiticità degli operatori  $x_i$ ,  $p_i$ , segue che le componenti del momento angolare sono operatori Hermitiani.

Calcoliamo ora i commutatori tra  $L_i$  e  $x_j$  (e tra  $L_i$  e  $p_j$ ) usando sempre i commutatori fondamentali, (4.14). Il risultato è

$$[L_i, x_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} x_k; \quad (4.18)$$

$$[L_i, p_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k. \quad (4.19)$$

Consideriamo ora il modulo quadrato del momento angolare,

$$\mathbf{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2. \quad (4.20)$$

È facile verificare che l'operatore  $\mathbf{L}^2$  commuta con ciascun componente  $L_i$ ,

$$[\mathbf{L}^2, L_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.21)$$

Per esempio,

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}^2, L_1] &= [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] \\ &= i\hbar(-L_2L_3 - L_3L_2 + L_3L_2 + L_2L_3) = 0. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Di conseguenza, i due operatori,  $\mathbf{L}^2$  e (e.g.)  $L_3$  possono prendere valori definiti simultaneamente.  $L_1, L_2$ , non commutando con  $L_3$ , e di conseguenza non possono assumere valori definiti in generale, nella base in cui  $\mathbf{L}^2$  e  $L_3$  sono diagonali.<sup>1</sup>

#### 4.1.3 Momento angolare come generatore di rotazioni

Il fatto che le formule (4.16), (4.18), e (4.19) hanno la stessa struttura non è accidentale: essa indica che il momento angolare, la posizione e l'impulso sono tutti vettori e si trasformano nello stesso modo per rotazioni degli assi di coordinate.

Ricordiamo (vedi 2.1) che l'operatore dell'impulso  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  è il generatore di *traslazione*: un operatore  $O(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  si trasforma

$$e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0}{\hbar}} O(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0}{\hbar}} = O(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, \mathbf{p}). \quad (4.23)$$

Sulla funzione d'onda l'operatore di traslazione agisce come:

$$e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0}{\hbar}} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0), \quad (4.24)$$

come si ottiene facilmente dalla formula di Taylor.

Analogamente le componenti del momento angolare generano rotazioni. Si consideri un'operazione

$$U\psi = e^{\frac{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}}{\hbar}} \psi(\mathbf{r}) \quad (4.25)$$

per  $\boldsymbol{\omega}$  infinitesime. Si ha infatti

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) &\simeq \left(1 + i\frac{\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}}{\hbar}\right) \psi(\mathbf{r}) = \left(1 + \omega_i \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}\right) \psi \\ &\simeq \psi(\mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Come  $e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0/\hbar}$ , l'operatore  $U = e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}$  genera una trasformazione unitaria: un generico operatore  $O$  si trasforma come

$$O \rightarrow UOU^\dagger. \quad (4.27)$$

In particolare, per  $O = \mathbf{r}$ , si ha

$$\begin{aligned} \mathbf{r} \rightarrow \tilde{\mathbf{r}} &= e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}} \mathbf{r} e^{-i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}} = \mathbf{r} + \frac{i\omega_i}{\hbar} [L_i, \mathbf{r}] + \dots \\ &= \mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} + \dots \end{aligned} \quad (4.28)$$

<sup>1</sup>C'è un'eccezione. In uno stato di momento angolare totale nullo, tutte le componenti hanno il valore nullo. Vedi dopo.

dove abbiamo usato i commutatori (4.18). La (4.28) indica che la trasformazione unitaria con  $U = e^{\frac{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}}{\hbar}}$  infatti rappresenta una rotazione tridimensionale degli assi di coordinate, nella direzione del vettore  $\boldsymbol{\omega}$  di angolo  $|\boldsymbol{\omega}|$ .

I commutatori tra le componenti del momento angolare  $L_i$  sono combinazioni lineari di esse stessi:  $L_i$  sono dette di formare *un'algebra*. Ogni algebra è caratterizzato da insieme di costanti, detti costanti di struttura. Nel caso di algebra del momento angolare - algebra del gruppo di rotazioni tridimensionali  $SO(3)$  - le costanti di struttura sono  $\epsilon_{ijk}$ .

**Unità del momento angolare:** Il momento angolare ha la stessa dimensione di azione  $[\mathbf{L}] = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = [\hbar]$ , ed è misurato in unità di  $\hbar$ . In seguito, indicheremo con  $\mathbf{L}$  l'operatore adimensionale  $\mathbf{L}/\hbar$ , liberandoci dell'onnipresente  $\hbar$  dalle relazioni di commutazione, etc.

Risulta conveniente introdurre i due operatori  $L_+$  e  $L_-$

$$L_+ \equiv L_1 + iL_2; \quad L_- \equiv L_1 - iL_2, \quad (4.29)$$

e riscrivere l'algebra del momento angolare (4.16) come

$$[L_+, L_-] = 2L_3; \quad [L_3, L_+] = L_+; \quad [L_3, L_-] = -L_-; \quad (4.30)$$

il quadrato del momento angolare si esprime in termini di  $L_{\pm}$

$$\mathbf{L}^2 = L_+L_- + L_3^2 - L_3 = L_-L_+ + L_3^2 + L_3. \quad (4.31)$$

(Esercizio: si verifichi le (4.31).)

Nel caso di una particella in tre dimensione l'operatore del momento angolare quadrato  $\mathbf{L}^2$  coincide con l'operatore  $\hat{L}^2$  di (4.5), come esplicitamente verificato nel Capitolo (7.4).

#### 4.1.4 Autovalori del momento angolare

È un fatto empirico che in Natura molte particelle elementari (elettrone, protone, neutrone, ecc.) possiedono una sorta di momento angolare intrinseco, chiamato *spin*. A questo grado di libertà associamo un operatore appropriato,  $\mathbf{S}$ , che, per postulato, obbedisce alle stesse regole di commutazione di quelle soddisfatte dal momento angolare orbitale  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ . È di comune uso indicare l'operatore di momento angolare generico con lettere  $J_i$ , riservando  $L_i$  per i momenti angolari di tipo orbitali e  $S_i$  per gli spin. I risultati fondamentali che troveremo in questa sezione infatti sono validi sia per il momento angolare orbitale, sia per lo spin, sia per una somma generica di momenti angolari di diverse nature fra loro.

Come conseguenza delle regole di commutazione

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k, \quad (4.32)$$

e della positività della norma, gli autovalori del momento angolare risultano quantizzati, in maniera universale.

Consideriamo l'operatore del momento angolare  $\mathbf{J}$  di un determinato sistema. La regola di commutazione riscritta con gli operatori  $J_{\pm} \equiv J_1 \pm iJ_2$  è,

$$[J_+, J_-] = 2J_3; \quad [J_3, J_+] = J_+; \quad [J_3, J_-] = -J_-. \quad (4.33)$$

Inoltre

$$[\mathbf{J}^2, J_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.34)$$

perciò possiamo prendere una base in cui  $\mathbf{J}^2$  e di  $J_3$  sono diagonali.

Siano  $|m\rangle$  gli autostati normalizzati di  $J_3$  con l'autovalore  $m$ :

$$J_3|m\rangle = m|m\rangle. \quad (4.35)$$

Usando la (4.33) si ha

$$J_3J_+|m\rangle = (J_+J_3 + J_+)|m\rangle = (m+1)J_+|m\rangle : \quad (4.36)$$

i.e., lo stato  $J_+|m\rangle$ , se non è un vettore nullo, è anche esso un autostato di  $J_3$ , con autovalore  $m+1$ . Analogamente

$$J_3 J_-|m\rangle = (m-1)J_-|m\rangle : \quad (4.37)$$

$J_-|m\rangle$  è un autostato di  $J_3$  con l'autovalore  $m-1$ , tranne quando  $J_-|m\rangle = 0$ . Gli operatori  $J_+$  e  $J_-$  fungono, rispettivamente, da operatori di “innalzamento e di “abbassamento” del valore di  $m$ . Possiamo scrivere

$$J_{\pm}|m\rangle = \text{cost.} |m \pm 1\rangle, \quad (4.38)$$

$$J_{\pm}^2|m\rangle = \text{cost.} |m \pm 2\rangle, \quad (4.39)$$

etc. Inoltre, poiché  $J_{\pm}$  commutano con l'operatore  $\mathbf{J}^2$ ,

$$\mathbf{J}^2(J_{\pm}^n|m\rangle) = J_{\pm}^n \mathbf{J}^2|m\rangle = T(J_{\pm}^n|m\rangle); \quad (4.40)$$

dove abbiamo indicato con  $T$  l'autovalore del momento angolare quadrato

$$\mathbf{J}^2|m\rangle = T|m\rangle. \quad (4.41)$$

In altre parole, gli stati  $J_{\pm}^n|m\rangle$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  (se sono non nulli) formano una torre di autostati di  $\mathbf{J}^2$ , con lo stesso autovalore, ma con autovalore  $m$  che differiscono di un'unità tra loro.

La relazione tra  $T$  (l'autovalore del momento angolare quadrato  $\mathbf{J}^2$ ) e i possibili autovalori  $m$  di  $J_3$ , viene determinata dalla seguente considerazione. Dalla relazione

$$\langle \mathbf{J}^2 - J_3^2 \rangle \geq 0, \quad (4.42)$$

(esercizio: dimostrarla), segue la disuguaglianza

$$T \geq m \geq -T. \quad (4.43)$$

Segue dunque che per un dato valore di  $T$  deve esistere il valore massimo di  $m$ , che indicheremo con  $j$ . Sia  $|j\rangle$  l'autostato corrispondente, i.e., un autostato di  $\mathbf{J}^2$  con l'autovalore ancora ignoto  $T$  e con autovalore di  $J_3$ ,  $j = \max\{m\}$ .

Classicamente tale valore coincide con il valore assoluto del momento angolare e in questo caso il vettore del momento angolare è diretto lungo l'asse  $z$ .

Per definizione,  $|j\rangle$  è lo stato con il valore massimo di  $J_3$ , perciò la costante in (4.38) deve essere tale che

$$J_+|j\rangle = 0. \quad (4.44)$$

Altrimenti  $J_+|j\rangle$  sarebbe uno stato con un valore di  $J_3$  più grande,  $j+1$ , contrariamente all'ipotesi fatta. Segue che (vedi (4.31))

$$\mathbf{J}^2|j\rangle = (J_-J_+ + J_3^2 + J_3)|j\rangle = j(j+1)|j\rangle. \quad (4.45)$$

Cioè

$$T = j(j+1) : \quad (4.46)$$

l'autovalore dell'operatore  $\mathbf{J}^2$  è uguale a  $j(j+1)$ .

A partire dallo stato  $|j\rangle$  possiamo costruire una torre di stati applicando ripetutamente l'operatore  $J_-$

$$J_-^n|j\rangle \propto |j-n\rangle; \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.47)$$

con l'autovalore

$$j, j-1, j-2, j-3, \dots, \quad (4.48)$$

di  $J_3$ , tutti autostati di  $\mathbf{J}^2$  con lo stesso autovalore  $j(j+1)$ .

Ora, dalla (4.42) segue l'esistenza del *minimo* fra gli autovalori di  $J_3$  anche. Dunque esiste un numero intero  $n$  tale che

$$J_- |j - n\rangle = 0. \quad (4.49)$$

In questo stato, troviamo, in virtù della prima equazione della (4.31),

$$\mathbf{J}^2 |j - n\rangle = (J_+ J_- + J_3^2 - J_3) |j - n\rangle = ((j - n)^2 - (j - n)) |j - n\rangle. \quad (4.50)$$

Ma lo stato  $|j - n\rangle$  appartiene allo stesso autovalore  $j(j + 1)$  di stato  $|j\rangle$  perciò

$$(j - n)^2 - (j - n) = j(j + 1), \quad \rightarrow \quad n = 2j. \quad (4.51)$$

Troviamo così un risultato fondamentale: visto che  $n$  è un numero intero non negativo, segue che  $j$  prende soltanto valori o interi e semiinteri

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (4.52)$$

Gli autovalori del momento angolare sono quantizzati, indipendentemente dal dettaglio dinamico.

Ricapitolando, concludiamo che per un dato autovalore  $j(j + 1)$  dell'operatore  $\mathbf{J}^2$  ci sono un  $2j + 1$  -pletto di stati

$$|j, j\rangle, |j, j - 1\rangle, |j, j - 2\rangle, \dots, |j, -j + 1\rangle, |j, -j\rangle, \quad (4.53)$$

autovalori di  $J_3$ ,

$$j, j - 1, j - 2, \dots, -j, \quad (4.54)$$

rispettivamente. Anche se gli autovalori dell'operatore  $\mathbf{J}^2$  prendono il valore  $j(j + 1)$  in questo gruppo di stati, è di comune uso parlare di multipletto di stati *di momento angolare*  $j$ .

I valori possibili per il numero quantico  $j$

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots, \quad (4.55)$$

corrispondono a autovalori del momento angolare quadrato,

$$j(j + 1) = 0, \frac{3}{4}, 2, \frac{15}{4}, 6, \dots \quad (4.56)$$

Inoltre, risulta (vedi il prossimo sottocapitolo) che per i momenti angolari di tipo orbitale,  $j$ , indicato con  $L$  o con  $\ell$  in questi casi, può prendere soltanto valori interi. (Vedi dopo).

In Natura queste predizioni della meccanica quantistica sono verificate senza eccezioni. Empiricamente le particelle elementari hanno lo spin o semiinteri o interi (e.g., l'elettrone, il protone, il neutrone, hanno  $s = 1/2$ ; il pione ha lo spin zero, il bosone  $W$  spin  $s = 1$ , ecc.). Nessun valore frazionario di spin è stato mai osservato.

Una delle prime esperienze che hanno mostrato questo sorprendente fenomeno è dovuta a Stern e Gerlach (1922). Nella loro esperienza, un sottile fascio di atomi d'argento è fatto attraversare una zona con un forte campo magnetico non uniforme, con

$$\frac{\partial B_z}{\partial z} \neq 0, \quad (4.57)$$

dove l'asse  $z$  è perpendicolare alla direzione del moto dell'atomo, e viene inciso su uno schermo fotografico. Un atomo che ha lo spin non nullo ha un momento magnetico non nullo e perciò riceve una forza verticale, proporzionale alla componente  $z$  dello spin. Classicamente si aspetta, per un fascio incidente non polarizzato, che si osservi sullo schermo

una banda di punti scuri uniformemente distribuiti in essa, corrispondenti a direzioni arbitrarie dello spin; sperimentalmente furono osservati (nel caso di Ag) solo due strisce strette (due linee) separate verticalmente, confermando la quantizzazione di  $J_z$  in maniera drammatica (l'atomo di Ag nello stato fondamentale ha spin  $1/2$ ).

#### Nota sulla quantizzazione del momento angolare in meccanica quantistica

Supponiamo che esista un sistema con il momento angolare  $j$  semipositivo definito generico, né intero né semiintero. Sia  $|j, j\rangle$  lo stato in cui  $J_3$  prende il valore massimo,  $j$ :

$$J_3|j, j\rangle = j|j, j\rangle; \quad J_+|j, j\rangle = 0; \quad \mathbf{J}^2|j, j\rangle = j(j+1)|j, j\rangle. \quad (4.58)$$

Applicando  $J_-$  ripetutamente si ottiene una torre di stati

$$(J_-)^n|j, j\rangle \propto |j, j-n\rangle, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.59)$$

Per un valore generico di  $j$  ci saranno un numero infinito di tali stati. Non è difficile dimostrare che:

- (i) tutti gli stati (4.59) sono autostati di  $\mathbf{J}^2$  con l'autovalore,  $j(j+1)$ ;
- (ii) lo stato (4.59) ha la norma positiva per  $m = j - n$  tale che

$$-j-1 < m < j; \quad (4.60)$$

(iii) per  $m$  tale che

$$-j-2 < m \leq -j-1, \quad (2j+1 \leq n < 2j+2), \quad (4.61)$$

si ha

$$\langle j, j|(J_+)^n(J_-)^n|j, j\rangle < 0 : \quad (4.62)$$

lo stato  $(J_-)^n|j, j\rangle$  ha la norma negativa.

Il valore di  $j$  generico dunque implica la presenza di stati con la norma negativa, e quindi non è accettabile.

#### 4.1.5 Momento angolare orbitale; funzioni armoniche sferiche

Tutte le precedenti discussioni formali, basate solamente sulle regole di commutazioni, si applicano anche ai momenti angolari di tipo orbitale,  $\mathbf{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ . Tuttavia, dovuto alla richiesta che la funzione d'onda sia ben definita come funzione di variabili angolari, il numero quantico  $\ell$  ( $j$ ) prende in questo caso solo valori interi, e non semi-interi.

Nelle coordinate sferiche  $(r, \theta, \phi)$ ,

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}; \quad \theta = \tan^{-1} \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}; \quad \phi = \tan^{-1} \frac{y}{x}, \quad (4.63)$$

le componenti dell'operatore  $\mathbf{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$  diventano:

$$L_3 = -i(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) = -i \frac{\partial}{\partial \phi}; \quad (4.64)$$

$$L_+ = -(x + iy) \frac{\partial}{\partial z} + z(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y}) = e^{i\phi}(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi}); \quad (4.65)$$

$$L_- = -L_+(i \rightarrow -i) = e^{-i\phi}(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi}). \quad (4.66)$$

Allora

$$\mathbf{L}^2 = L_+ L_- + L_3^2 - L_3 = -[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}], \quad (4.67)$$

come è stato anticipato in Sec. 4.1.1

Risolviamo ora l'equazioni agli autovalori (che è la parte angolare dell'equazione di Schrödinger nel caso di un potenziale a simmetria centrale),

$$\hat{L}^2\Phi(\theta, \phi) = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\Phi(\theta, \phi) = \ell(\ell+1)\Phi(\theta, \phi). \quad (4.68)$$

Poiché  $L_3 = -i\frac{\partial}{\partial\phi}$  commuta con  $\hat{L}^2$ , conviene prima risolvere l'equazione

$$L_3\psi(\phi) = -i\frac{\partial}{\partial\phi}\psi(\phi) = m\psi(\phi). \quad (4.69)$$

La soluzione è ovvia:

$$\psi(\phi) = \Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}, \quad (4.70)$$

che obbedisce alla condizione di normalizzazione

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m'}(\phi)^* \Phi_m(\phi) d\phi = \delta_{m'm}. \quad (4.71)$$

Ma la funzione d'onda deve essere ben definita per ogni valore di  $\phi$  perciò

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.72)$$

Siccome  $m$  (chiamato il *numero quantico azimutale*) può prendere solo  $2m+1$  possibili valori

$$-\ell, -\ell+1, \dots, +\ell, \quad (4.73)$$

vuol dire che anche  $\ell$  può prendere soltanto valori interi,

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.74)$$

Sostituiamo ora

$$\Phi(\theta, \phi) = \Phi_m(\phi)\Theta_{\ell,m}(\theta) \quad (4.75)$$

in (4.68). Si ha

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\Theta_{\ell,m}(\theta)) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta_{\ell,m}(\theta) + \ell(\ell+1)\Theta_{\ell,m}(\theta) = 0, \quad (4.76)$$

o in termini della nuova variabile  $x \equiv \cos\theta$ ,

$$\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx}\Theta_{\ell,m} - \frac{m^2}{1-x^2}\Theta_{\ell,m} + \ell(\ell+1)\Theta_{\ell,m} = 0. \quad (4.77)$$

Questa equazione è ben nota. Le soluzioni che sono finite e monodrome nell'intervallo  $-1 \leq x \leq 1$  per  $\ell \geq |m|$  sono note come *polinomi associati di Legendre*, e indicate con  $P_\ell^m(x)$ .

Per i polinomi di Legendre e per i polinomi associati di Legendre, vedi Appendice.

La soluzione di (4.77) normalizzata con

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta |\Theta_{\ell,m}(\theta)|^2 = \int_{-1}^1 dx |\Theta_{\ell,m}|^2 = 1, \quad (4.78)$$

è data da ( $x \equiv \cos\theta$ )

$$\Theta_{\ell,m} = (-)^m i^\ell \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}} P_\ell^m(x), \quad m \geq 0, \quad (4.79)$$

$$\Theta_{\ell,-|m|} = (-)^m \Theta_{\ell,|m|}. \quad (4.80)$$

La soluzione dell'equazione di Schrödinger angolare, con i numeri quantici  $\ell, m$  è dunque (vedi (4.75))

$$\Phi(\theta, \phi) = Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = (-)^{(m+|m|)/2} i^\ell \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}} P_\ell^m(x) e^{im\phi}. \quad (4.81)$$

Le funzioni  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  sono chiamate *funzioni armoniche sferiche* e rappresentano le autofunzioni simultanee degli operatori  $\mathbf{L}^2$  (con l'autovalore  $\ell(\ell+1)$ ) e  $L_3$  (con l'autovalore  $m$ ).  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  sono normalizzate come

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{\ell',m'}(\theta, \phi)^* Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm}. \quad (4.82)$$

$(2\ell+1)$  funzioni d'onda  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  per un dato  $\ell$  corrispondono agli stati  $|\ell, m\rangle$  discussi nel precedente sottocapitolo, o più precisamente,

$$\langle \theta, \phi | \ell, m \rangle = Y_{\ell,m}(\theta, \phi). \quad (4.83)$$

Infine, alcune funzioni armoniche sferiche più semplici sono:

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ Y_{1,0} &= i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}, \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3\cos^2 \theta), \\ Y_{2,\pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi}, \\ Y_{2,\pm 2} &= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}, \end{aligned} \quad (4.84)$$

ecc. Alcune proprietà importanti di  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  sono:

$$Y_{\ell,m}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-)^\ell Y_{\ell,m}(\theta, \phi), \quad (4.85)$$

$$(-)^{\ell-m} Y_{\ell,-m}^* = Y_{\ell,m}. \quad (4.86)$$

#### 4.1.6 Elementi di matrice di $\mathbf{J}$ .

Abbiamo visto che i risultati come

$$J_\pm |m\rangle = \text{cost.} |m \pm 1\rangle, \quad (4.87)$$

$$\mathbf{J}^2 |j\rangle = j(j+1) |j\rangle, \quad (4.88)$$

seguono dalla regola di commutazione di  $J_i$ . Si vuole ora determinare le costanti in queste relazioni. Consideriamo il valore d'aspettazione di

$$\mathbf{J}^2 = (J_+ J_- + J_- J_+ - J_3^2) \quad (4.89)$$

nello stato  $|j, m\rangle$ . Si ha

$$\langle j, m | \mathbf{J}^2 | j, m \rangle = \langle j, m | J_+ J_- | j, m \rangle + \langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle - \langle j, m | J_3^2 | j, m \rangle, \quad (4.90)$$

$$j(j+1) = \sum_{m'} \langle j, m | J_+ | j, m' \rangle \langle j, m' | J_- | j, m \rangle + m^2 - m, \quad (4.91)$$

dove abbiamo utilizzato la relazione di completezza

$$\sum_{j', m'} |j', m'\rangle \langle j', m'| = \mathbf{1}, \quad (4.92)$$

e il fatto che gli operatori  $J_{\pm}$  non cambia  $j$ . Dall'ultima relazione, tenendo conto dei risultati (4.87), segue che soltanto un termine contribuisce nella somma su  $m'$ :

$$\langle j, m | J_+ | j, m-1 \rangle \langle j, m-1 | J_- | j, m \rangle = j(j+1) - m^2 + m = (j+m)(j-m+1). \quad (4.93)$$

Ora, poiché  $J_+ = J_-^\dagger$  i due elementi di matrice nel primo membro sono collegati,

$$\langle j, m | J_+ | j, m-1 \rangle = \langle j, m-1 | J_- | j, m \rangle^*. \quad (4.94)$$

Perciò

$$|\langle j, m-1 | J_- | j, m \rangle|^2 = (j+m)(j-m+1). \quad (4.95)$$

Con un'opportuna scelta della fase, si ha allora

$$\langle j, m-1 | J_- | j, m \rangle = \langle j, m | J_+ | j, m-1 \rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}, \quad (4.96)$$

e ovviamente tutti gli altri elementi di matrice di  $J_+, J_-$  sono nulli.

Gli elementi di matrice di  $J_1$  e  $J_2$  seguono dai risultati per  $J_{\pm}$  tramite le relazioni:

$$J_1 = (J_+ + J_-)/2, \quad J_2 = (J_+ - J_-)/2i. \quad (4.97)$$

Si trovano così i seguenti elementi non nulli:

$$\begin{aligned} \langle j, m-1 | J_1 | j, m \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}, \\ \langle j, m+1 | J_1 | j, m \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)}, \end{aligned} \quad (4.98)$$

e

$$\begin{aligned} \langle j, m-1 | J_2 | j, m \rangle &= +\frac{i}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}, \\ \langle j, m+1 | J_2 | j, m \rangle &= -\frac{i}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)}. \end{aligned} \quad (4.99)$$

Insieme a noti elementi di matrice non nulli di  $J_3$

$$\langle j, m | J_3 | j, m \rangle = m, \quad (4.100)$$

questi determinano tutti gli elementi di matrice di vari operatori composti di  $J_i$ .

Ritornando alle (4.87), abbiamo perciò trovato che

$$\begin{aligned} J_- |j, m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle, \\ J_+ |j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle. \end{aligned} \quad (4.101)$$

Si noti che  $J_+ |j, j\rangle = 0$  e  $J_- |j, -j\rangle = 0$  infatti.

La scelta della fase fatta sopra (che gli elementi di matrice di  $J_{\pm}$  siano reali e non negativi), fa parte della cosiddetta *convenzione di Condon e Shortley* sulle fase di stati di momento angolare. Vedi dopo.

**Esempio 1.** Rappresentazione matriciale per il caso di spin 1/2 ( $j = \frac{1}{2}$ .)

In questo caso, la componente  $J_z$  avrà solo autovalori possibili  $m = \pm \frac{1}{2}$ . L'insieme degli elementi di matrice di  $J_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  può essere rappresentato da tre matrici  $2 \times 2$ ,

$$\begin{aligned}\langle 1/2, m' | J_1 | 1/2, m \rangle &= \frac{1}{2} (\sigma_1)_{m', m}; \\ \langle 1/2, m' | J_2 | 1/2, m \rangle &= \frac{1}{2} (\sigma_2)_{m', m}; \\ \langle 1/2, m' | J_3 | 1/2, m \rangle &= \frac{1}{2} (\sigma_3)_{m', m},\end{aligned}\quad (4.102)$$

con

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.103)$$

Queste matrici sono chiamate *matrici di Pauli*. In tale notazione, le matrici di Pauli agiscono sullo spazio di *spinori*,

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.104)$$

dove gli spinori di base

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |1/2, 1/2\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1/2, -1/2\rangle = |\downarrow\rangle, \quad (4.105)$$

rappresentano stati di *spin up* e di *spin down*.

Si noti che i tre matrici di Pauli (più precisamente,  $\frac{1}{2}\sigma_i$ ) obbediscono alla stessa algebra del momento angolare, (4.16),

$$\left[ \frac{\sigma_i}{2}, \frac{\sigma_j}{2} \right] = i \varepsilon_{ijk} \frac{\sigma_k}{2}. \quad (4.106)$$

In altre parole, le tre matrici *rappresentano* l'algebra del gruppo  $SO(3)$ . Le matrici di Pauli hanno seguenti proprietà importanti,

$$\sigma_i^2 = \mathbf{1}, \quad (i = x, y, z); \quad \sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i = i \varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (i \neq j). \quad (4.107)$$

**Esempio 2.** Momento angolare orbitale con  $\ell = 1$ .

$$Y_{1,0} = \langle \theta, \phi | 1, 0 \rangle = i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta. \quad (4.108)$$

$$Y_{1,\pm 1} = \langle \theta, \phi | 1, \pm 1 \rangle = \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}. \quad (4.109)$$

D'altra parte

$$L_+ = e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (4.110)$$

perciò

$$L_+ Y_{1,0} = -i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{i\phi}. \quad (4.111)$$

Per esempio, l'elemento di matrice di  $L_+$  tra gli stati  $|1, 0\rangle$  e  $|1, 1\rangle$  risulta

$$\begin{aligned}\langle 1, 1 | L_+ | 1, 0 \rangle &= \int d\theta \sin \theta d\phi Y_{1,1}^* L_+ Y_{1,0} \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \sin^2 \theta \int_0^{2\pi} d\phi = \sqrt{2}.\end{aligned}\quad (4.112)$$

Questo è in accordo con il risultato generale (4.96). (Vuol dire che la convenzione di fase delle funzioni armoniche sferiche adottata da noi è compatibile con la convenzione di Condon-Shortley.)

### 4.1.7 Composizione dei momenti angolari

Consideriamo ora sistemi con più di un momento angolare. Essi potrebbero essere due momenti di tipo orbitale, due spin (due particelle con spin) oppure il momento angolare orbitale e lo spin della stessa particella, etc. Si vuole sapere quali sono i valori del momento angolari totali, e qual'è la relazione tra gli stati del momento angolare totale e gli stati di momenti angolari componenti.

La legge di addizione di due momenti angolari,  $\mathbf{J}_1$  e  $\mathbf{J}_2$  segue dall'algebra dei momenti angolari.

Il momento angolare totale è definito da

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \mathbf{J}_2 \equiv \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (4.113)$$

dove

$$[J_{1i}, J_{2j}] = 0. \quad (4.114)$$

Grazie a questa seconda relazione, il momento angolare totale soddisfa la regola di commutazione standard,

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k. \quad (4.115)$$

Una domanda a cui si vuole rispondere è:

Dati due numeri quantici  $j_1$  e  $j_2$  dei momenti angolari  $\mathbf{J}_1$  e  $\mathbf{J}_2$ , quali sono i possibili valori del numero quantico  $j$  del momento angolare totale? (A)

Ci sono due basi naturali degli stati di momento angolare:

(i) una base in cui gli operatori  $\mathbf{J}_1^2$ ,  $J_{1z}$ ,  $\mathbf{J}_2^2$ , e  $J_{2z}$  sono diagonali, con autostati indicati con

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \quad (4.116)$$

e con proprietà

$$\mathbf{J}_1^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = j_1(j_1 + 1) |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle; \quad (4.117)$$

$$J_{2z} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = m_2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle, \quad \text{ecc.} \quad (4.118)$$

Alternativamente si può prendere

(ii) una base in cui  $\mathbf{J}^2$ ,  $J_z$ ,  $\mathbf{J}_1^2$ , e  $\mathbf{J}_2^2$  sono diagonali, con autostati

$$|j_1, j_2; J, M\rangle \quad (4.119)$$

con proprietà

$$\mathbf{J}^2 |j_1, j_2; J, M\rangle = J(J + 1) |j_1, j_2; J, M\rangle, \quad (4.120)$$

$$J_z |j_1, j_2; J, M\rangle = M |j_1, j_2; J, M\rangle, \quad (4.121)$$

ecc.

Chiameremo queste come la prima e la seconda base rispettivamente, in seguito.

**Esercizio:** Verificate che i due gruppi di operatori sopra formano ambedue infatti osservabili massimali.

La seconda domanda, strettamente legata alla domanda (A), è dunque questa:

Qual'è la relazione tra gli stati  $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$  e gli stati  $|j_1, j_2; J, M\rangle$ ?

Partiamo con lo stato in cui  $m_1, m_2$  prendono tutti i due i valori massimi possibili, cioè lo stato "più alto

$$|j_1, j_1, j_2, j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle, \quad (4.122)$$

della prima base. Visto che  $M = m_1 + m_2$ , ( $J_z$  ovviamente commuta sia con  $J_{1z}$  che con  $J_{2z}$ ) lo stato (4.122) corrisponde allo stato con  $M$  massimo. Poiché  $J \geq M$  questo vorrà dire che lo stato (4.122) corrisponde anche all'autovalore  $J$  massimo possibile. Ora

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle &= (\mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2) |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle \\ &= (\mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} + 2J_{1z}J_{2z}) |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle \\ &= (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle. \end{aligned} \quad (4.123)$$

Lo stato (4.122) è quindi infatti un autostato di  $\mathbf{J}^2$  e il numero quantico corrispondente è  $j_1 + j_2$ , cioè

$$J_{max} = j_1 + j_2. \quad (4.124)$$

Allo stesso tempo abbiamo dimostrato l'equivalenza

$$|j_1, j_1, j_2, j_2\rangle = |j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle, \quad (4.125)$$

*i.e.*, l'equivalenza tra lo stato “più alto” della prima base e lo stato con  $J_{max}$  e  $M_{max} = J_{max}$  della seconda base.

(Per essere preciso, la fase relativa tra i due membri della (4.125) è arbitrariamente stata messa uguale a 1. Questa scelta fa parte della “convenzione di Condon-Shortley”.)

Applichiamo ora l'operatore  $J_- = J_{1-} + J_{2-}$  sullo stato (4.125). Da una parte troviamo che

$$J_- |j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle, \quad (4.126)$$

dove abbiamo usato (4.101); d'altra parte usando la stessa formula per  $J_{1-}$  e per  $J_{2-}$ , si ottiene

$$(J_{1-} + J_{2-}) |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle = \sqrt{2j_1} |j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle. \quad (4.127)$$

Perciò si è trovata la seconda relazione,

$$|j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle. \quad (4.128)$$

Si noti che l'applicazione di  $J_-$  non può cambiare il numero quantico  $J = j_1 + j_2$  (e analogamente  $J_{1-}$  non modifica l'autovalore di  $\mathbf{J}_1^2$ ).

Si osservi che due stati linearmente indipendenti della prima base con  $M = j_1 + j_2 - 1$  appaiono nelle eq.(4.126), (4.127), e (4.128). Nella seconda base questi devono avere  $J = j_1 + j_2$  uno, e  $J = j_1 + j_2 - 1$  l'altro. Il primo corrisponde alla combinazione lineare trovata sopra, (4.128). L'altro stato, con  $J = j_1 + j_2 - 1$  deve essere ortogonale a quello stato, quindi a parte la fase (che va determinata con un'opportuna convenzione) deve essere uguale a

$$|j_1, j_2; j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = e^{i\alpha} \left( \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle \right) \quad (4.129)$$

dove  $\alpha$  è la fase indeterminata per il momento.

Procedendo in maniera analoga, e applicando  $J_- = J_{1-} + J_{2-}$  su due stati (4.128) e (4.129), si ottengono due stati

$$|j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle, \quad |j_1, j_2; j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle, \quad (4.130)$$

con  $M = j_1 + j_2 - 2$ , in termini di tre stati nella prima base. Il terzo stato con  $M = j_1 + j_2 - 2$ , per esclusione, deve essere lo stato  $|j_1, j_2; j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2\rangle$ : esso è determinato (a parte la fase) dalla condizione di ortogonalità con gli stati (4.130). E così di seguito.

Continuando in questo modo, all' $n$ -sima volta che si applica  $J_- = J_{1-} + J_{2-}$  si otterrà  $n + 1$  stati, di cui uno corrisponde ad un nuovo multipletto con  $J = j_1 + j_2 - n$ . Si noti che ad ogni passaggio il numero di stati linearmente indipendenti ad un fisso valore di  $M$  aumenta di uno. Questo accade finché  $n < \text{Min}\{2j_1, 2j_2\}$ . Quando  $n = 2j_1$ , per esempio (supponendo  $j_1 < j_2$ ), un'ulteriore applicazione di  $J_{1-}$  annulla lo stato  $|j_1, -j_1, j_2, j_2\rangle$  perciò il numero di stati linearmente indipendenti con  $M = j_2 - j_1 - 1$  è uguale al numero di tali stati con  $M = j_2 - j_1$ .

Troviamo così che il valore minimo possibile (supponendo  $j_1 < j_2$ ) di  $J$  è  $j_2 - j_1$ . Per generici  $j_1$  e  $j_2$  si ha

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots, |j_1 - j_2|. \quad (4.131)$$

Come verifica contiamo il numero totale degli stati linearmente indipendenti, aventi i numeri quantici  $j_1$  e  $j_2$ . Nella prima base esso è dato da

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1), \quad (4.132)$$

che è semplicemente il prodotto dei numeri delle componenti dei due multipletti.

Nella seconda base (supponendo  $j_1 < j_2$ ), esso è calcolato, sapendo (4.131), con la formula

$$\begin{aligned} \sum_{J=j_2-j_1}^{j_2+j_1} (2J+1) &= 2 \cdot \frac{1}{2} [(j_2 + j_1)(j_2 + j_1 + 1) - (j_2 - j_1 - 1)(j_2 - j_1)] + 2j_1 + 1 \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1), \end{aligned} \quad (4.133)$$

che dimostra la consistenza del risultato (4.131) trovato sopra.

**Esempio**  $j_1 = j_2 = 1$ . Ci sono in questo caso 9 stati linearmente indipendenti, che corrispondono a 5 stati con  $J = 2$ , a 3 stati con  $J = 1$ , e uno stato con  $J = 0$ .

**Esempio** Il caso con  $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$  è di particolare importanza. È di uso comune indicare gli stati di singolo spin come

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |1/2, 1/2\rangle, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1/2, -1/2\rangle \quad (4.134)$$

(spin “up e spin “down); i quattro stati della prima base sono

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2. \quad (4.135)$$

Gli operatori sono

$$\mathbf{s}_{tot} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2; \quad \mathbf{s}_1 = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1; \quad \mathbf{s}_2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2; \quad (4.136)$$

dove le matrici  $\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2$  sono matrici di Pauli, (4.103). Per esempio,

$$s_{1+} = \frac{1}{2}(\sigma_{1x} + i\sigma_{1y}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_1. \quad (4.137)$$

Applichiamo sugli stati (4.135) l'operatore

$$\mathbf{s}_{tot}^2 = \frac{3}{2} + 2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = \frac{3}{2} + s_{1+}s_{2-} + s_{1-}s_{2+} + 2s_{1z}s_{2z}. \quad (4.138)$$

Troviamo

$$\mathbf{s}_{tot}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2; \quad (4.139)$$

e analogamente per  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2$ . In altre parole questi due stati sono autostati dello spin totale, con  $s_{tot} = 1$ .

D'altra parte,

$$\mathbf{s}_{tot}^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1e \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2; \quad (4.140)$$

e

$$\mathbf{s}_{tot}^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2. \quad (4.141)$$

Questi due stati non sono autostati di  $s_{tot}^2$ . È facile trovare tuttavia gli autostati di  $s_{tot}^2$ : essi sono le combinazioni “spin paralleli” e “spin antiparalleli”,

$$|par\rangle \equiv \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} / \sqrt{2}; \quad (4.142)$$

$$|anti\rangle \equiv \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} / \sqrt{2}. \quad (4.143)$$

Infatti essi soddisfano

$$\mathbf{s}_{tot}^2 |par\rangle = 2 |par\rangle; \quad (4.144)$$

$$\mathbf{s}_{tot}^2 |anti\rangle = 0, \quad (4.145)$$

dimostrando che il primo corrisponde a  $s_{tot} = 1$ , il secondo a  $s_{tot} = 0$ . Ricapitolando, il tripletto di stati

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \quad \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} / \sqrt{2}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2, \quad (4.146)$$

di spin 1 e un singoletto

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} / \sqrt{2} \quad (4.147)$$

di spin 0 costituiscono la seconda base di stati.

Nella notazione più pittoresca utilizzata spesso, gli stati di tripletto sono

$$|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, \quad \frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle, \quad (4.148)$$

mentre il singoletto è la combinazione antisimmetrica

$$\frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.149)$$

#### 4.1.8 Coefficienti di Clebsch-Gordan

Rispondiamo ora alla seconda domanda che si era posta all’inizio del sottocapitolo precedente. Ciascun stato della prima base può essere sviluppato in termini di quelli della seconda base:

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = \sum_{J, M} |j_1, j_2; J, M\rangle \langle j_1, j_2; J, M | j_1, m_1, j_2, m_2\rangle, \quad (4.150)$$

dove nella somma su  $M$  attualmente un solo termine (con  $M = m_1 + m_2$ ) è non nullo. La (4.150) può essere vista come relazione di completezza degli stati di momento angolare. I coefficienti di sviluppo,

$$\langle j_1, j_2; J, M | j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \equiv \langle J, M | j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \quad (4.151)$$

sono chiamati *coefficienti di Clebsch-Gordan*.

Vice versa, ogni autostato di  $\mathbf{J}^2, J_z$ , può essere espresso come una combinazione lineare di stati dell’altra base:

$$|j_1, j_2; J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_1, j_2; J, M\rangle. \quad (4.152)$$

I coefficienti di sviluppo in questo caso sono semplicemente coniugati complessi di quelli nella (4.150):

$$\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_1, j_2; J, M \rangle = \langle j_1, j_2; J, M | j_1, m_1, j_2, m_2 \rangle^*. \quad (4.153)$$

Anche questi sono chiamati coefficienti di Clebsch-Gordan.

I coefficienti che abbiamo trovato nelle (4.125), (4.128), e (4.129), sono infatti esempi di coefficienti di Clebsch-Gordan. Come abbiamo già notato, i coefficienti di Clebsch-Gordan dipendono dalla convenzione di fase di stati di momento angolare. La convenzione frequentemente usata (che adotteremo anche noi) si chiama *convenzione di Condon e Shortley* e consiste nell'imporre le seguenti tre condizioni:

1. I massimi stati delle due basi sono identificati con il coefficiente 1, (4.125): questa convenzione fissa la fase relativa globale tra la prima e la seconda base;
2. Tutti gli elementi di matrice degli operatori,  $J_{1-}$ ,  $J_{2-}$ ,  $J_-$  sono reali e semipositivi definiti: questa condizione fissa le fasi relativi tra gli stati nello stesso multipletto;
3. Gli elementi di matrice,

$$\langle j_1, j_2; J, M | J_{1z} | j_1, j_2; J \pm 1, M \rangle \quad (4.154)$$

sono reali e semipositivi definiti.

Non è difficile dimostrare che queste tre condizioni fissano univocamente *tutte* le fasi relativi tra gli stati, in modo esauriente e consistente. Vedi per es., il libro di Edmonds, "Angular Momentum in Quantum Mechanics".

I coefficienti di Clebsch-Gordan per i primi valori di  $j_1, j_2$  sono dati nella tabella seguente. In programma Mathematica, il comando input per ottenere il coefficiente di C-G,  $\langle j_1, j_2; J, M | j_1, m_1, j_2, m_2 \rangle \equiv \langle J, M | j_1, m_1, j_2, m_2 \rangle$  è semplicemente

ClebschGordan [{j1, m1}, {j2, m2}, {J, M}]

### 4.1.9 Spin

Ritorniamo ora alla proprietà di trasformazione della funzione d'onda per rotazioni degli assi delle coordinate. Per una particella senza spin, la funzione d'onda si trasforma, per una rotazione attorno alla direzione di un vettore  $\omega$ , secondo la regola (vedi (4.26)):

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \omega \times \mathbf{r} + \dots; \quad (4.155)$$

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}' + \omega \times \mathbf{r}') \\ &= \psi'(\mathbf{r}') = e^{i\omega \cdot \hat{\mathbf{L}}} \psi(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (4.156)$$

In altre parole, per  $S = 0$ , il valore della funzione d'onda sullo stesso punto fisico non cambia, ma dovuto al cambiamento delle coordinate, "la forma funzionale rispetto alle nuove coordinate è modificata".

Questo significa che la funzione d'onda forma una rappresentazione del gruppo di rotazione,  $SO(3)$ . Ora dal punto di vista della teoria dei gruppi è importante sapere quali sono le rappresentazioni *irriducibili*, cioè oggetti che si trasformano tra di loro. Come è chiaro intuitivamente, poiché una rotazione tridimensionale non può cambiare la grandezza del momento angolare, le rappresentazioni irriducibili corrispondono esattamente ai *multipletti* di stati di momento angolare definito (autostati del momento angolare quadrato). Nel caso di una particella senza spin, allora, essi sono le armoniche sferiche  $Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$ ,  $m = \ell, \ell - 1, \dots, -\ell$ . Una funzione d'onda generica può essere sviluppata in termini di tali armoniche,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell, m} R_{\ell, m}(r) Y_{\ell, m}(\theta, \phi). \quad (4.157)$$

Allora il cambiamento della forma funzionale della funzione d'onda (4.156) significa

$$\begin{aligned}\psi \rightarrow \psi' &= e^{i\omega \cdot \hat{\mathbf{L}}} \psi \\ &= \sum_{\ell, m} R_{\ell, m}(r) e^{i\omega \cdot \hat{\mathbf{L}}} Y_{\ell, m}(\theta, \phi).\end{aligned}\quad (4.158)$$

Ma poiché gli operatori  $\mathbf{L}$  non possono cambiare il valore di  $\ell$  si avrà

$$e^{i\omega \cdot \hat{\mathbf{L}}} Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} D_{m', m}^{\ell}(\omega) Y_{\ell, m'}, \quad (4.159)$$

dove la matrice

$$D_{m', m}^{\ell}(\omega) \equiv \langle \ell, m' | e^{i\omega \cdot \hat{\mathbf{L}}} | \ell, m \rangle, \quad (4.160)$$

è chiamata *matrice di rotazione*.

La funzione d'onda di particella con spin  $s$  ha  $2s + 1$  componenti; essa si trasforma secondo la legge

$$\psi \rightarrow e^{i\omega \cdot (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{s}})} \psi, \quad (4.161)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \\ \psi_{2s+1}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (4.162)$$

L'operatore  $\mathbf{L}$  agisce sulla dipendenza da  $\mathbf{r}$  di ciascun componente, mentre lo spin  $\mathbf{s}$  agisce sullo spazio di spinore,

$$\psi'_{\sigma} = \sum_{\sigma'} \left( e^{i\omega \cdot \hat{\mathbf{s}}} \right)_{\sigma, \sigma'} \psi_{\sigma'}. \quad (4.163)$$

I suoi elementi di matrice sono esattamente determinati dalle (4.98), (4.99), (4.100) (leggi  $J_1 \rightarrow s_x, J_2 \rightarrow s_y, J_3 \rightarrow s_z$ ). Le componenti del momento angolare totale

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s} \quad (4.164)$$

obediscono alla regola standard del momento angolare.

#### Nota 1

Se l'Hamiltoniana  $H$  è indipendente dallo spin, il sistema può avere la funzione d'onda fattorizzata:

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) \chi_{\sigma}. \quad (4.165)$$

Per esempio, questo è il caso per l'Hamiltoniana dell'atomo di idrogeno nell'approssimazione non relativistica

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r}. \quad (4.166)$$

Le prime correzioni relativistiche ad essa sono date dai termini

$$\Delta H = -\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3} + \frac{e^2}{2m^2 r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{s} + \frac{\pi e^2}{2m^2} \delta^3(\mathbf{r}). \quad (4.167)$$

Si osservi che l'Hamiltoniana totale  $H + \Delta H$  è invariante per rotazioni. Infatti

$$[\mathbf{J}, H + \Delta H] = 0, \quad (4.168)$$

dove  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s}$ . (**Esercizio:** Dimostrarla.)

#### Nota 2

Nel caso di spin  $1/2$  l'operatore di spin è rappresentato da tre matrici di Pauli,  $s_i = \frac{1}{2} \sigma_i$ . Un'identità molto utile è

$$e^{i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = \cos |\mathbf{a}| + i \frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin |\mathbf{a}|, \quad (4.169)$$

dove  $\mathbf{a}$  è un vettore costante. (**Problema:** Dimostrate la (4.169) usando le proprietà delle matrici di Pauli, (4.107)).

### 4.1.10 Matrici di rotazione: spin $\frac{1}{2}$

La funzione d'onda di spin (per  $s = \frac{1}{2}$ ) si trasforma, per una rotazione di angolo  $\phi$  attorno alla direzione  $\mathbf{n}$ , come

$$\chi \rightarrow \exp\left(\frac{i}{2}\phi(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})\right) \psi \equiv U(\phi\mathbf{n})\psi. \quad (4.170)$$

Con l'uso dell'identità (4.169) la matrice di rotazione può essere calcolata esplicitamente:

$$U(\phi\mathbf{n}) = \cos\frac{\phi}{2} + i\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin\frac{\phi}{2}. \quad (4.171)$$

Per esempio, per una rotazione attorno all'asse  $z$ ,

$$U_z(\phi) = \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi/2} \end{pmatrix}; \quad (4.172)$$

mentre per rotazioni attorno agli assi  $x$  e  $y$

$$\begin{aligned} U_x(\phi) &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} & i\sin\frac{\phi}{2} \\ i\sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2} \end{pmatrix}; \\ U_y(\phi) &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} & \sin\frac{\phi}{2} \\ -\sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.173)$$

Si osservi che per una rotazioni di angolo  $2\pi$ ,

$$U_x(2\pi) = -\mathbf{1}; \quad U_y(2\pi) = -\mathbf{1}; \quad U_z(2\pi) = -\mathbf{1}; \quad (4.174)$$

la funzione d'onda di una particella con spin  $1/2$  cambia segno! In questo senso (dal punto di vista della teorie dei gruppi) questi sono le rappresentazioni di particolare tipo (detta "proiettiva" o "spinoriale") del gruppo di rotazioni  $SO(3)$ ; *spinori* sono proprio i nomi dati a questi oggetti. I *vettori* si trasformano esattamente come  $\mathbf{r}$  e perciò  $U(2\pi) = \mathbf{1}$  per essi.

**(Esercizio:** Si verifichi che le matrici  $U_x(\phi), U_y(\phi), U_z(\phi)$  sono infatti unitarie.)

La matrice di rotazione per una generica rotazione è di solito espressa in termini di tre angoli di Eulero,  $\alpha, \beta$  e  $\gamma$ .

$$\begin{aligned} D^{1/2} \equiv U(\alpha, \beta, \gamma) &= U_z(\gamma) U_y(\beta) U_z(\alpha) \\ &= \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos\frac{\beta}{2} & e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin\frac{\beta}{2} \\ -e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin\frac{\beta}{2} & e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.175)$$

#### Nota

Le proprietà di trasformazione (matrici di rotazione) per particelle di spin  $S = \frac{n}{2}$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  generico possono essere trovate nel seguente modo. Prendiamo  $n$  spinori (ciascuno con  $s = 1/2$ ) e costruiamo i loro prodotti, *totalmente simmetrici* per scambi di  $n$  spinori. Ci sono esattamente  $n+1$  tali combinazioni, analoghe al tripletto di stati (4.146) nel caso particolare  $n = 2$ . È ovvio che le rotazioni non possono cambiare le proprietà di simmetrie, dunque questi  $n+1$  oggetti si trasformano tra di loro per rotazioni (i.e., è una rappresentazione irriducibile). Dal numero quantico azimutale dello "stato più alto,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \cdots \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_n \quad (4.176)$$

( $S_z = n/2$ ) si apprende che questo  $n+1$ -pletto di stati corrispondono ad uno spin  $S = n/2$ . Perciò la matrice di rotazione per  $S$  generico è semplicemente il prodotto tensoriale di  $n = 2S$  matrici (4.175), simmetrizzati per scambi di  $n$  indici.

Da quanto sopra segue che le funzioni d'onda di spin interi ( $n$  pari) qualsiasi ritornano a se stesso dopo una rotazione di angolo  $2\pi$ , mentre le funzioni d'onda di particelle con spin semiinteri cambiano segno.

#### 4.1.11 Teorema di Wigner-Eckart

Consideriamo uno stato descritto dalla funzione d'onda  $\psi_0(r)$ : una funzione d'onda dipendente solo dal modulo  $r = |\mathbf{r}|$  della posizione. Ovviamente tale stato è invariante per rotazioni, *i.e.*, è uno stato di  $\ell = 0$ . Ora, gli stati

$$\psi_i(r) = \text{cost. } \mathbf{r}_i \psi_0(r) \quad (4.177)$$

ottenuti con l'azione di un operatore vettoriale su  $\psi_0(r)$  hanno invece  $\ell = 1$ , essendo proporzionali a  $Y_{1,m}(\theta, \phi)$ . Il valore di  $\ell$ , quindi le corrispondenti proprietà per rotazioni, naturalmente non dipendono dal dettaglio dell'operatore (e dello stato), la stessa conclusione è valida per

$$\psi'_i(r) = \text{cost. } \mathbf{p}_i \psi_0(r) \quad (4.178)$$

Generalizzando questa discussione ai generici stati di momento angolare e generici operatori, si arriva ad un teorema importante dovuto a Wigner e Eckart.

Un operatore  $O$  si trasforma come

$$O \rightarrow e^{i\omega \cdot \mathbf{J}} O e^{-i\omega \cdot \mathbf{J}}, \quad (4.179)$$

mentre uno stato qualsiasi come

$$| \rangle \rightarrow e^{i\omega \cdot \mathbf{J}} | \rangle. \quad (4.180)$$

Abbiamo visto che particolari stati, quelli col momento angolare definito  $(J, M)$ , si trasformano *in un modo semplice e universale* (vedi (4.159)),

$$|J, M\rangle \rightarrow \sum_{M'} D_{M, M'}^J(\omega) |J, M'\rangle. \quad (4.181)$$

Si noti che la matrice di rotazione di spin  $J$  è nota una volta per tutte; essa non dipende né dai dettagli dinamici della funzione d'onda né dalla natura del momento angolare stesso (*i.e.*, se esso è dovuto ad un moto orbitale o se si tratta di spin; se il sistema è elementare o composto, ecc.), ma dipende solo dal valore di  $j$ .

Analogamente certi operatori si trasformano in un modo semplice. Operatori come  $\mathbf{r}^2$ ,  $\mathbf{p}^2$ ,  $U(r)$ , sono *scalari*: essi sono invarianti per rotazioni. Operatori  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{p}$ , e  $\mathbf{J}$ , per esempio, sono *vettori*. I prodotti di vettori sono genericamente chiamati *tensori*.

Per lo studio delle proprietà della trasformazione per rotazioni spaziali, è conveniente riorganizzare le componenti dei tensori (normalmente espressi in termini di componenti *cartesiane*), e introdurre la nozione di *tensori sferici*. Un operatore tensoriale sferico di rango 1 è equivalente ad un vettore  $(A_x, A_y, A_z)$  ma le sue componenti sono chiamate  $T_{1,m}$ ,  $m = 1, 0, -1$ , dove

$$T_{1,1} = -i \frac{A_x + iA_y}{\sqrt{2}}; \quad T_{1,0} = iA_z; \quad T_{1,-1} = i \frac{A_x - iA_y}{\sqrt{2}}. \quad (4.182)$$

Nel caso dell'operatore  $\mathbf{r}$ , il tensore sferico corrispondente è semplicemente

$$T_{1,1} = -i \frac{x + iy}{\sqrt{2}}; \quad T_{1,0} = iz; \quad T_{1,-1} = i \frac{x - iy}{\sqrt{2}}; \quad (4.183)$$

essi sono proporzionali alle funzioni armoniche sferiche  $Y_{1,1}$ ,  $Y_{1,0}$ , e  $Y_{1,-1}$ . (Vedi (4.84).)

Le relazioni inverse,

$$A_x = i \frac{T_{1,1} - T_{1,-1}}{\sqrt{2}}; \quad A_y = \frac{T_{1,1} + T_{1,-1}}{\sqrt{2}}; \quad A_z = -iT_{1,0}, \quad (4.184)$$

sono anche esse utili.

Il tensore sferico di rango 2 (di “spin 2”) è, in termini di componenti cartesiane del tensore simmetrico ( $A_{xx}, A_{xy} = A_{yx}$ , ecc),

$$\begin{aligned} T_{2,0} &= \sqrt{\frac{1}{6}}(A_{xx} + A_{yy} - 2A_{zz}); \\ T_{2,\pm 1} &= \pm(A_{xz} \pm iA_{yz}); \\ T_{2,\pm 2} &= -\frac{1}{2}(A_{xx} - A_{yy} \pm 2iA_{xy}). \end{aligned} \quad (4.185)$$

Per costruzione i tensori sferici di “spin  $p$  con  $2p+1$  componenti si trasformano con la semplice legge

$$T_q^p \Rightarrow e^{i\omega \cdot \mathbf{J}} T_q^p e^{-i\omega \cdot \mathbf{J}} = \sum_{q'} D_{q,q'}^p T_{q'}^p. \quad (4.186)$$

Vuol dire che l'azione di  $T_q^p$  sullo stato  $|j, m; n\rangle$  produce uno stato

$$T_q^p |j, m; n\rangle \quad (4.187)$$

che si trasforma esattamente come lo stato

$$|p, q\rangle \otimes |j, m\rangle, \quad (4.188)$$

i.e.,

$$\begin{aligned} T_q^p |j, m; n\rangle &\Rightarrow e^{i\omega \cdot \mathbf{J}} T_q^p |j, m; n\rangle = e^{i\omega \cdot \mathbf{J}} T_q^p e^{-i\omega \cdot \mathbf{J}} e^{i\omega \cdot \mathbf{J}} |j, m; n\rangle \\ &= \sum_{q', m'} D_{q,q'}^p D_{m,m'}^j T_{q'}^p |j, m'; n\rangle. \end{aligned} \quad (4.189)$$

Di conseguenza gli elementi di matrice

$$\langle J, M; n' | T_q^p | j, m; n \rangle \quad (4.190)$$

dove  $n, n'$  indicano tutti gli altri numeri quantici (e.g., radiale, tipo di particelle, ecc.) sono proporzionali ai coefficienti di Clebsch-Gordan,

$$\langle J, M; n' | T_q^p | j, m; n \rangle = \langle p, j; J, M | p, q, j, m \rangle \langle J, n' || \mathbf{T}^p || j, n \rangle, \quad (4.191)$$

**(teorema di Wigner-Eckart).** Nella (4.191) il coefficiente di proporzionalità,  $\langle J, n' || \mathbf{T}^p || j, n \rangle$ , chiamato *elemento di matrice ridotto*, dipende solo dalla grandezza dei momenti angolari e altri numeri quantici dinamici, ma non dai numeri quantici azimutali. Tutte le dipendenze azimutali sono contenute nei coefficienti di Clebsch-Gordan che sono universali. La (4.191) è molto potente: essa fornisce relazioni non banali tra numerosi elementi di matrice (che differiscono solo per  $M, q, m$ ) in termini di una sola quantità.

## 4.2 Polinomi di Legendre

Per cominciare, consideriamo l'eq.(4.77) per  $m = 0$ . L'equazione è

$$\left\{ \frac{d}{dx} (1-x^2) \frac{d}{dx} + \ell(\ell+1) \right\} \Theta = 0, \quad (4.192)$$

oppure

$$(1-x^2)\Theta'' - 2x\Theta' + \ell(\ell+1)\Theta = 0. \quad (4.193)$$

Una delle soluzioni  $P_\ell(x)$  può essere presa finita nell'intervallo  $-1 \leq x \leq 1$ : essa è chiamata il polinomio di Legendre. (L'altra soluzione, indicata con  $Q_\ell(x)$  non è finita a  $x = \pm 1$ .)

Come per i polinomi di Hermite, le proprietà dei polinomi di Legendre possono essere studiate con aiuto di una funzione generatrice, che in questo caso è data da

$$T(x, s) = (1 - 2sx + s^2)^{-1/2} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_{\ell}(x) s^{\ell}, \quad s < 1, \quad (4.194)$$

dove  $s$  è un parametro arbitrario,  $x = \cos \theta$ . I primi polinomi possono essere trovati facilmente da (4.194):

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, & P_1(x) &= x, & P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ P_3(x) &= \frac{1}{2}(4x^3 - 3x), & P_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \end{aligned} \quad (4.195)$$

ecc. È nota una formula semplice e esplicita per  $P_{\ell}(x)$  (formula di Rodrigue)

$$P_{\ell}(x) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} (x^2 - 1)^{\ell}. \quad (4.196)$$

$P_{\ell}(x)$  sono normalizzati con la condizione

$$\int_{-1}^1 dx P_{\ell}(x) P_{\ell'}(x) = \frac{2}{2\ell + 1} \delta_{\ell, \ell'}, \quad (4.197)$$

e soddisfa inoltre

$$P_{\ell}(1) = 1; \quad P_{\ell}(-1) = (-1)^{\ell}. \quad (4.198)$$

Il fatto che i polinomi di Legendre definiti da (4.194) soddisfano l'equazione di Legendre (4.193) segue da certe equazioni di ricorrenza, che a sua volta si ottengono dalle considerazioni delle derivate  $\partial T(x, s)/\partial x$  e  $\partial T(x, s)/\partial s$ .

Infine, i polinomi associati di Legendre  $P_{\ell}^m(x)$  possono essere ottenuti da  $P_{\ell}(x)$  via la relazione

$$P_{\ell}^m(x) = (x^2 - 1)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_{\ell}(x) : \quad (4.199)$$

il fatto che  $P_{\ell}^m(x)$  è la soluzione regolare della (4.77) si dimostra facendo  $m$  derivate  $d^m/dx^m$  dell'eq.(4.193) e considerando l'equazione per  $(1 - x^2)^{m/2} d^m/dx^m \Theta$ . (vedi, i.e., Whittaker and Watson, "Modern Analysis".)

## 4.3 Gruppi e Rappresentazioni: Elementi di Teoria dei Gruppi

### 4.3.1 Assiomi del gruppo e alcuni esempi

Un insieme  $G$ , nel quale è definita l'operazione di *moltiplicazione*,

$$a \in G, \quad b \in G \quad \rightarrow \quad c = a \cdot b \in G, \quad (4.200)$$

è chiamato gruppo se i seguenti assiomi sono soddisfatti:

i) associatività del prodotto:

$$(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c); \quad (4.201)$$

ii) esistenza dell'elemento unità  $e$ , tale che

$$ea = a \quad (4.202)$$

per ogni elemento  $a \in G$ ;

iii) ogni elemento  $a$  possiede un'inverso (a sinistra),  $a^{-1}$

$$a^{-1} \cdot a = e. \quad (4.203)$$

Un gruppo  $G$  è Abeliano (commutativo) se per ogni coppia dei suoi elementi vale

$$a \cdot b = b \cdot a, \quad (4.204)$$

altrimenti il gruppo è non Abeliano.

**Es. 1.** L'insieme di numeri interi forma un gruppo (commutativo) per addizione, i.e., se la moltiplicazione è definita come

$$a \cdot b \equiv a + b. \quad (4.205)$$

**Es. 2.** Gruppo di permutazione di tre oggetti ( $A, B, C$ ) messi in posizioni 1, 2, 3: ci sono sei elementi nel gruppo,

$$\begin{aligned} e &: (ABC) \rightarrow (ABC); \\ (12) &: (ABC) \rightarrow (BAC); \\ (23) &: (ABC) \rightarrow (ACB); \\ (31) &: (ABC) \rightarrow (CBA); \\ (123) &: (ABC) \rightarrow (CAB); \\ (321) &: (ABC) \rightarrow (BCA). \end{aligned} \quad (4.206)$$

La regola di moltiplicazione si trova direttamente, per es.  $(12) \cdot (23) = (123)$ ;  $(23) \cdot (123) = (31)$ ; ecc. (N.B. l'operazione che sta a destra va eseguita per prima).

**Es. 3.** L'insieme di matrici complesse  $N \times N$  con determinante unitario,

$$G = \{M : \det M = 1\}, \quad (4.207)$$

in cui la moltiplicazione è definita normalmente col prodotto matriciale, forma il gruppo lineare speciale  $SL(N, C)$ .

**Es. 4.** L'insieme di matrici ortogonali  $d \times d$  reali con determinante unitario,

$$G = \{O : O^T O = \mathbf{1}; \det O = 1\}, \quad (4.208)$$

forma il gruppo ortogonale,  $SO(d)$ . Gli elementi di questo gruppo possono essere identificati con tutte le possibili rotazioni tri-dimensionali (per  $d = 3$ ) degli assi di coordinate.  $SO(d)$  può essere definito come gruppo degli operatori di trasformazione (rotazioni) nello spazio di vettori  $d$ , che lasciano invariante il modulo quadrato,

$$\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{x} \quad (4.209)$$

dei vettori.

**Es. 5.** L'insieme di matrici unitarie  $N \times N$  complesse,

$$G = \{U : U^\dagger U = \mathbf{1};\}, \quad (4.210)$$

forma il gruppo unitario  $U(N)$ . Le matrici unitarie con  $\det U = 1$  formano il gruppo unitario speciale,  $SU(N)$ .

**Es. 6.** Il gruppo di Lorentz è formato dalle matrici  $4 \times 4$  reali,  $L$ , che lasciano invariante la metrica

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.211)$$

i.e.,

$$L^t \mathbf{g} L = \mathbf{g}. \quad (4.212)$$

Equivalentemente, il gruppo di Lorentz è il gruppo di trasformazioni quadritettoriali  $(t, x, y, z)$  che lasciano invariante

$$x_\mu x^\mu = t^2 - x^2 - y^2 - z^2. \quad (4.213)$$

N.B. I gruppi degli esempi 2 - 6 sopra sono non Abeliani, ad eccezione del  $SO(2)$  (gruppo di rotazioni nel piano  $x - y$ ) che è commutativo.

**Esercizio** Dimostrare che il gruppo unitario  $U(n)$ , visto come gruppo di trasformazioni sullo spazio vettoriale complesso  $n$  dimensionale, lascia invariata la forma quadratica (o il prodotto scalare Hermitiano)

$$\mathbf{z}^\dagger \cdot \mathbf{z} = \sum_{i=1}^n z_i^* z_i, \quad (4.214)$$

dove  $(z_1, z_2, \dots, z_n)$  sono le componenti di un vettore complesso qualsiasi.

#### Prodotto diretto dei gruppi

Dati due gruppi  $G$  e  $H$ , il prodotto diretto  $G \otimes H$  è definito dagli elementi  $(g, h)$  dove  $g \in G$ ,  $h \in H$ , e i loro prodotti sono definiti da

$$(g_1, h_1) \cdot (g_2, h_2) = (g_1 g_2, h_1 h_2). \quad (4.215)$$

### 4.3.2 Rappresentazione del Gruppo

Dato un gruppo  $G$ , l'insieme  $R$  di matrici  $N \times N$  (con  $N$  finito o infinito)  $M$ , forma una *rappresentazione* del gruppo  $G$ , se ad ogni elemento  $g$  di  $G$  corrisponde un elemento di  $R$ ;

$$g \rightarrow M(g) \in R, \quad (4.216)$$

tale che

$$M(g_1)M(g_2) = M(g_1 g_2), \quad (4.217)$$

i.e., tale che la legge di moltiplicazione sia conservata.

In Meccanica Quantistica gli operatori lineari  $O$  possono essere visti equivalentemente come matrici (finite o infinito-dimensionali) tramite la corrispondenza,

$$O_{mn} = \langle m|O|n\rangle, \quad (4.218)$$

dove  $\{|m\rangle\}$  è una base completa e ortonormale di stati. Le rappresentazioni di un gruppo in termini di operatori lineari possono essere unitarie o non unitarie. Le rappresentazioni in termini di matrici unitarie sono *rappresentazioni unitarie*.

**Es. 1.** Il gruppo di permutazione ha una rappresentazione,

$$M(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad M(12) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad M(13) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (4.219)$$

$$M(23) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M(123) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad M(321) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.220)$$

Se esiste una trasformazione di similitudine,  $S$ , tale che

$$M(g) = S\tilde{M}(g)S^{-1}, \quad \forall g \in G, \quad (4.221)$$

le rappresentazioni  $M(g)$  e  $\tilde{M}(g)$  sono equivalenti.

**Def.** Una rappresentazione di un gruppo  $G$  è detto **riducibile** se essa è equivalente ad una rappresentazione di forma blocco-diagonale,

$$M(g) = \begin{pmatrix} M_1(g) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & M_2(g) \end{pmatrix}, \quad \forall g \in G; \quad (4.222)$$

altrimenti esso è **irriducibile**.

Lo spazio lineare di vettori in cui agiscono le matrici  $M(g)$  è chiamato *spazio delle rappresentazioni*.

Nelle applicazioni in Meccanica quantistica lo spazio delle rappresentazioni è lo spazio delle funzioni d'onda. Ma poiché gli stati quantistici di un dato sistema sono descritti dai raggi nello spazio di Hilbert (i.e.,  $\psi \sim c\psi$ ,  $c \neq 0$ ), in generale dovremo permettere una rappresentazione di tipo generalizzato, i.e.,

$$\psi \rightarrow U(g)\psi, \quad U(g_1) \cdot U(g_2) = e^{i\omega(g_1, g_2)} U(g_1 \cdot g_2), \quad (4.223)$$

dove  $\omega$  è una fase che in generale dipende sia da  $g_1$  che da  $g_2$ . Tale rappresentazione è chiamata rappresentazione proiettiva.

### 4.3.3 Gruppo di Lie e Algebra di Lie

Consideriamo un gruppo continuo  $G$ . Gli elementi di un gruppo continuo dipendono da uno o più parametri  $\{\alpha\}$  in modo continuo,

$$g = g(\{\alpha\}). \quad (4.224)$$

**Es.** Il gruppo  $SO(2)$  è un gruppo continuo, parametrizzato da un parametro  $\theta$ , che prende valore nell'intervallo  $0 \leq \theta \leq 2\pi$ .

La varietà (spazio) su cui vivono i parametri del gruppo è la varietà del gruppo. Quando la varietà del gruppo è una varietà analitica (rispetto ai suoi parametri) si ha un gruppo di Lie. (La definizione più precisa del gruppo di Lie si trova per es., in Barut and Raczka,

“Theory of Group Representations and Applications.”) Se inoltre lo spazio dei parametri del gruppo è compatto (senza la pretesa di massima generalità, uno spazio chiuso e limitato), si ha un gruppo di Lie compatto. I gruppi  $SO(N)$  e  $SU(N)$  sono gruppi di Lie compatti.

Uno spazio in cui un cammino chiuso arbitrario è contrattibile in maniera continua ad un punto è detto *semplicemente connesso*.

Nota: Uno spazio in cui due punti arbitrari sono connessi da un cammino continuo, è detto invece *connesso per archi*.

**Es.** La sfera  $S^2$  è uno spazio semplicemente connesso, poiché ovviamente ogni cammino chiuso su di esso può essere modificato ad un punto in modo continuo; l’anello  $S^1$  (l’insieme dei punti  $(x, y)$  che soddisfano  $x^2 + y^2 = 1$ ) non è semplicemente connesso perché su di esso esistono cammini chiusi non contrattibili, ad es.,  $(\cos n\theta, \sin n\theta)$ ,  $0 \leq \theta \leq 2\pi$ , con  $n = 1, 2, \dots$ ; analogamente il toro (topologicamente  $S^1 \times S^1$ ) non è semplicemente connesso, anche se è connesso per archi. Infatti, ci sono infinite classi di cammini chiusi non banali su un toro (disegnateli), che sono non contrattibili.

Ogni rappresentazione di un gruppo di Lie compatto è equivalente ad una rappresentazione in termini di operatori unitari. Ogni elemento di un gruppo unitario che si possa ottenere dall’elemento unità con una variazione continua dei parametri può essere scritto come

$$U(\{\alpha\}) = \exp i\alpha_a X_a, \quad (4.225)$$

dove  $\alpha_a$ ,  $a = 1, 2, \dots, N$  sono parametri reali e  $X_a$  sono operatori Hermitiani.  $X_a$  sono *generatori* delle trasformazioni infinitesime,

$$U(\{\epsilon\}) \simeq \mathbf{1} + i\epsilon_a X_a + O(\epsilon^2). \quad (4.226)$$

**Es.** Non tutti gli elementi di un gruppo continuo sono ottenibili tramite una variazione continua dei parametri. Per es., il gruppo  $O(N)$  (gruppo ortogonale) contiene elementi con  $\det O = -1$  che non sono connessi all’elemento unità in maniera continua. Il gruppo  $SO(3)$  è connesso per archi ma non è semplicemente connesso (vedi dopo).

I generatori  $X_a$  del gruppo  $G$  obbediscono le relazioni di chiusura

$$[X_a, X_b] = \sum_c i f_{abc} X_c, \quad (4.227)$$

dove

$$[X_a, X_b] \equiv X_a X_b - X_b X_a \quad (4.228)$$

sono commutatori tra due operatori  $X_a$  e  $X_b$ . Le relazioni (4.227) formano l’*algebra* del gruppo  $G$ ,  $g$ . Le costanti  $f_{abc}$  che caratterizzano le proprietà attorno all’unità del gruppo dato sono *costanti di struttura* del gruppo.

**Momento angolare:** L’algebra delle componenti del momento angolare tridimensionale è l’algebra  $so(3)$ , con generatori,  $J_1, J_2, J_3$ . Le costanti di struttura sono  $f_{abc} = \epsilon_{abc}$  in questo caso. L’algebra del gruppo  $SU(2)$  e quella del gruppo  $SO(3)$  sono le stesse:  $su(2) \sim so(3)$ . La struttura globale dei due gruppi è tuttavia diversa, il gruppo  $SO(3)$  non è semplicemente connesso mentre il gruppo  $SU(2)$  lo è (vedi la nota successiva). Infatti, rotazioni tridimensionali possono essere parametrizzate in termini di tre angoli di Eulero, l’angolo  $\alpha$  di una rotazione attorno all’asse  $z$  ( $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ ); l’angolo  $\beta$  della rotazione attorno all’asse nuovo  $y$  ( $0 \leq \beta \leq \pi$ ); e l’angolo  $\gamma$  della terza rotazione attorno all’asse  $z$  nuovo ( $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ ). L’elemento  $M_1 = (\alpha, \beta, \gamma) = (\pi, 0, \pi)$  coincide con l’identità come operazione di rotazione, per cui il cammino che connette l’unità  $e = (0, 0, 0)$  al punto  $M_1$  è un cammino chiuso, ma non contrattibile.

**Nota:** Gli elementi del gruppo  $SU(2)$  possono essere parametrizzati come

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad (4.229)$$

con

$$|a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (4.230)$$

(Verificate che le condizioni  $UU^\dagger = 1$ ; e  $\det U = 1$  che definiscono un gruppo  $SU(N)$  siano soddisfatte con le matrici suddette). Ponendo  $a = x_1 + ix_2$  e  $b = x_3 + ix_4$ , la (4.230) si riduce a

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = 1, \quad (4.231)$$

che dimostra che il gruppo  $SU(2)$  è topologicamente  $S^3$  ed è perciò semplicemente connesso.

**Rappresentazione spinoriale:**

La funzione d'onda di particelle di spin semi-interi è un esempio di rappresentazione proiettiva (4.223). Infatti, le componenti di spin della funzione d'onda si trasformano, per una rotazione tridimensionale degli assi delle coordinate, mediante la matrice di rotazione. Per spin  $1/2$  la matrice di rotazione è data nella (4.175). Esse si trasformano, per una rotazione di  $2\pi$ , come

$$\psi \rightarrow -\psi; \quad (4.232)$$

esse forniscono *rappresentazione spinoriale* del gruppo  $SO(3)$ .

## 4.4 Simmetrie in Meccanica Quantistica

### 4.4.1 Considerazioni generali

Il concetto della simmetria e le conseguenti leggi di conservazione non sono proprietà esclusive della Meccanica Quantistica. Basti ricordare il legame tra l'invarianza per traslazioni spaziali del sistema e la conservazione dell'impulso; quello tra l'omogeneità del tempo e la conservazione dell'energia, ecc., in Meccanica Classica. Tuttavia l'idea della simmetria porta le conseguenze più profonde in Meccanica Quantistica.

Supponiamo che in un sistema esista un operatore unitario  $S$  che commuta con l'Hamiltoniana:

$$[S, H] = 0. \quad (4.233)$$

Ma poiché  $S$ , essendo unitario, soddisfa la relazione

$$SS^\dagger = S^\dagger S = \mathbf{1}, \quad (4.234)$$

la (4.233) è equivalente con

$$S^\dagger HS = H : \quad (4.235)$$

$S$  è una trasformazione unitaria che lascia invariante l'Hamiltoniana. Abbiamo già visto alcuni esempi di tali operatori:

$$S = e^{i\hat{J} \cdot \omega} \quad (4.236)$$

che descrive una rotazione spaziale;

$$S = e^{i\hat{p} \cdot r_0 / \hbar} \quad (4.237)$$

che rappresenta una traslazione.

Una delle possibili conseguenze di una simmetria è la conservazione di una carica (numero quantico) associata. Supponiamo infatti che lo stato  $|\psi\rangle$  sia un autostato di una quantità dinamica (operatore Hermitiano)  $G$ , tale che

$$S \simeq \mathbf{1} - i\epsilon G + \dots, \quad (4.238)$$

i.e.,  $G$  è un generatore di  $S$ . Dalle (4.233) e (4.235) segue che

$$[G, H] = 0. \quad (4.239)$$

Ora dall'ipotesi,

$$G|\psi(0)\rangle = g|\psi(0)\rangle. \quad (4.240)$$

Lo stato all'istante  $t > 0$  è dato da

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle, \quad (4.241)$$

per cui

$$G|\psi(t)\rangle = Ge^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar} G|\psi(0)\rangle = g|\psi(t)\rangle. \quad (4.242)$$

Il sistema dunque rimane autostato di  $G$  durante l'evoluzione, la "carica  $g$  è conservata.

La conservazione della carica elettrica nelle interazioni fondamentali è dovuta a una tale ragione. L'operatore di carica elettrica  $Q$  agisce sugli stati di particelle elementari come

$$Q|e\rangle = -e|e\rangle; \quad Q|p\rangle = +e|p\rangle; \quad (4.243)$$

$$Q|n\rangle = 0; \quad Q|\pi^+\rangle = +e|\pi^+\rangle, \quad (4.244)$$

ecc., dove i ket indicano gli stati di un singolo elettrone, del protone, del neutrone, e del pione +, rispettivamente.  $Q$  commuta con l'Hamiltoniana di tutte le forze conosciute oggi

(le forze gravitazionali; le forze elettrodeboli; le interazioni forti): questo fatto garantisce che la carica totale del sistema sia conservata. Si noti che in Meccanica Quantistica nonrelativistica che si studia in questo corso la conservazione della carica elettrica è una conseguenza della conservazione del numero della particella; vice versa, nell'ambito relativistico dove le particelle possono essere prodotte o distrutte la conservazione della carica elettrica presenta una regola di selezione non banale.

Un'altra conseguenza della simmetria è la degenerazione dei livelli. Si consideri uno stato stazionario

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad (4.245)$$

e che esista un operatore Hermitiano  $G$  che commuta con  $H$ . Supponiamo però che lo stato  $|\psi_n\rangle$  non sia un autostato di  $G$ :

$$G|\psi_n\rangle \neq \text{cost.}|\psi_n\rangle. \quad (4.246)$$

Ma dalla commutatività di  $G$  con  $H$  segue che

$$H\{G|\psi_n\rangle\} = GH|\psi_n\rangle = E_n\{G|\psi_n\rangle\} \quad (4.247)$$

il che implica una degenerazione dello stato stazionario. Un tipico esempio è quello dovuto alla simmetria per rotazioni: se si prende  $\{H, \mathbf{L}^2, L_z\}$  come osservabili (operatori simultaneamente diagonalizzati), la presenza di altri operatori  $L_x, L_y$  che commutano anche essi con  $H$  ma che non possono essere diagonali (non commutando con  $L_z$ ) implica che ogni livello è degenere (tranne lo stato con  $\mathbf{L}^2 = 0$ .)

#### 4.4.2 Parità ( $\mathcal{P}$ )

Ci sono le simmetrie *continue* (come rotazioni, traslazioni) in cui l'operazione di simmetria è descritta da uno o più parametri continui, e le simmetrie *discrete* che non hanno tali parametri. La parità ne è un esempio tipico. L'operazione di parità è definito da

$$\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) \quad (4.248)$$

sugli stati, e da

$$\mathcal{P}O(\mathbf{r}, \mathbf{p})\mathcal{P}^{-1} = O(-\mathbf{r}, -\mathbf{p}) \quad (4.249)$$

sugli operatori. Si tratta dunque di riflessione spaziale. Se  $H$  è invariante per riflessione spaziale,

$$\mathcal{P}H\mathcal{P}^{-1} = H \quad (4.250)$$

(o equivalentemente,  $\mathcal{P}H = H\mathcal{P}$ .) allora la parità è conservata (i.e.,  $\mathcal{P}$  è un operatore di simmetria).

Visto che  $\mathcal{P}$  commuta con l'Hamiltoniana, gli stati stazionari possono essere scelti autostati anche di  $\mathcal{P}$ . Gli autovalori di parità sono limitati a  $\pm 1$ , perché ovviamente

$$\mathcal{P}^2 = \mathbf{1}. \quad (4.251)$$

Gli stati stazionari sono perciò classificati secondo la parità:

$$\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) = +\psi(\mathbf{r}) \quad (4.252)$$

per gli stati di parità  $+$ ;

$$\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r}) \quad (4.253)$$

per gli stati di parità  $-$ .

La parità è un buon numero quantico quando il potenziale ha la simmetria sferica,  $V(\mathbf{r}) = V(r)$ , i.e., quando il momento angolare è conservato. Infatti per gli stati di momento angolare definito,  $\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$ , si ha una semplice relazione,

$$\mathcal{P} = 1, \quad \text{se } \ell = 2n, n = 0, 1, 2, \dots; \quad (4.254)$$

$$\mathcal{P} = -1, \quad \text{se } \ell = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.255)$$

Tale relazione tra la conservazione del momento angolare e quella della parità, tuttavia, non significa che quest'ultima è una conseguenza del primo, in generale. Ci sono i casi in cui il potenziale è invariante per riflessione spaziale,

$$V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}), \quad (4.256)$$

perciò la parità è conservata, ma in cui il momento angolare non è un buon numero quantico. Basti pensare un potenziale che dipende, per esempio, dalla combinazione,  $x^2 + 2y^2 + 7z^2$ .

Come un altro esempio in cui l'indipendenza della parità rispetto al momento angolare si manifesta chiaramente, si consideri un sistema di due particelle, senza interazioni tra di loro, che si muovono in un campo (comune) a simmetria centrale. La funzione d'onda è il prodotto di due funzioni d'onda, ciascuno un autostato di momento angolare orbitale, con  $\ell_1, \ell_2$ . Il momento angolare totale  $L$  potrà prendere valori tra  $\ell_1 + \ell_2, \ell_1 + \ell_2 - 1, \dots, |\ell_1 - \ell_2|$ . Il sistema è chiaramente un autostato di parità con l'autovalore,

$$\mathcal{P} = (-)^{\ell_1 + \ell_2}, \quad (4.257)$$

e questo in generale non coincide con  $(-)^L$ .

La parità è un concetto essenzialmente quantistica. La sua importanza in Meccanica Quantistica è accentuata dal fatto che empiricamente alcune particelle elementari portano la parità *intrinseca* negativa, insieme alla parità dovuta al moto orbitale. La situazione è analoga allo spin (il momento angolare "intrinseco, non legato al moto orbitale). Per esempio,

$$\mathcal{P}|\pi\rangle = -|\pi\rangle; \quad \mathcal{P}|K\rangle = -|K\rangle; \quad \mathcal{P}|p\rangle = +|p\rangle; \quad (4.258)$$

$$\mathcal{P}|n\rangle = +|n\rangle; \quad \mathcal{P}|\bar{p}\rangle = -|\bar{p}\rangle; \quad (4.259)$$

ecc., dove i ket rappresentano gli stati di alcune particelle elementari al riposo, quindi sprovvisti di momento angolare orbitale. Solo la parità totale (il prodotto di parità intrinseca e la parità del moto orbitale) è conservata.

Gli operatori di spin si trasformano per parità come quello del momento angolare, i.e.,

$$\mathcal{P}\mathbf{S}\mathcal{P}^{-1} = \mathbf{S} : \quad (4.260)$$

è pari. Al contrario, l'operatore dell'impulso ovviamente è dispari così come quello della posizione. In generale, gli operatori possono essere classificati secondo la loro parità, insieme al valore di spin: l'impulso, la posizione, il potenziale vettoriale, ecc., sono *vettori*; lo spin, il momento angolare orbitale sono *vettori assiali*. Le quantità scalari (invarianti per rotazioni per definizione) che cambiano segno per riflessione spaziale sono chiamate *pseudoscalari*.

La parità, nonostante la sua definizione naturale, non è una simmetria esatta della Natura, ma è una simmetria approssimativa. Tra le interazioni fondamentali, le interazioni gravitazionali, le interazioni elettromagnetiche e le interazioni forti rispettano la parità, mentre le interazioni deboli (le interazioni responsabili al "decadimento beta dei nuclei") la violano. Nel linguaggio più moderno, le interazioni dovute allo scambio di particelle W e Z non sono invarianti per parità.

#### 4.4.3 Inversione del tempo (time reversal)

Un altro esempio di una simmetria discreta è l'inversione del tempo,  $T$ . In Meccanica Classica, l'equazione di Newton,

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla V \quad (4.261)$$

è invariante per l'inversione  $t \rightarrow -t$ . Questo significa che se un moto da  $(\mathbf{r}_1, t_1)$  a  $(\mathbf{r}_2, t_2)$  è possibile (i.e., è una soluzione dell'equazione (4.261)), lo è anche un'altro moto da  $(\mathbf{r}_2, -t_2)$  a  $(\mathbf{r}_1, -t_1)$ , attraverso l'identico cammino, ma tracciato nel senso opposto.

In Meccanica Quantistica la dinamica è descritta dall'equazione di Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H\psi(\mathbf{r}, t). \quad (4.262)$$

Per esempio per una particella in tre dimensioni si ha

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (4.263)$$

La trasformazione  $t \rightarrow t' = -t$  risulta un'equazione

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi(\mathbf{r}, -t') = H\psi(\mathbf{r}, -t'), \quad (4.264)$$

*diversa* in generale dall'equazione di Schrödinger originale. Sembrerebbe che l'invarianza per l'inversione del tempo sia impossibile in Meccanica Quantistica.

In verità, non c'è motivo per ritenere che la funzione d'onda del moto invertito sia semplicemente  $\psi(\mathbf{r}, -t)$ . Infatti, prendendo il coniugato complesso dell'equazione sopra si trova

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi^*(\mathbf{r}, -t') = H^* \psi^*(\mathbf{r}, t') \quad (4.265)$$

che assomiglia più all'eq.(4.262). L'equazione di Schrödinger sarà ritrovata se esiste in operatore *anti unitario*  $O$  tale che

$$OH^*O^{-1} = H. \quad (4.266)$$

Infatti in tal caso la funzione d'onda del moto invertito può essere preso come

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = O\psi^*(\mathbf{r}, -t) : \quad (4.267)$$

è evidente allora che  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)$  soddisfa l'equazione di Schrödinger: è un moto realizzabile e descrive il moto invertito.

Un operatore  $O$  tale che per ogni vettori  $\psi, \phi$ ,

$$\langle O\phi | O\psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle \quad (4.268)$$

(vedi (4.267)), è detto *antiunitario*. In contrasto, un operatore unitario  $U$  soddisfa ovviamente

$$\langle U\phi | U\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \quad (4.269)$$

come si vede dalla definizione,  $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$ . È chiaro che sia nel caso di una trasformazione unitaria che nel caso di una trasformazione antiunitaria le predizioni fisiche della teoria rimangono invariate. In questo contesto, esiste un teorema importante che riportiamo qui senza dimostrazione:

(Teorema di Wigner)

*Ogni trasformazione di simmetria in Meccanica Quantistica è realizzata tramite o una trasformazione unitaria o una trasformazione antiunitaria.*

Dalla discussione precedente traspare il fatto che anche l'invarianza per inversione del tempo, come nel caso della parità, è una proprietà di un dato tipo di interazione, piuttosto che un'assoluta legge di Natura. In Natura l'inversione del tempo (T) è una buona simmetria approssimativa delle interazioni fondamentali. Le interazioni gravitazionali, le interazioni elettromagnetiche e le interazioni forti rispettano T, mentre una parte piccola delle interazioni deboli, dovuto allo scambio della particella W, lo viola.

Il mistero attorno alla simmetria  $T$  deriva dal fatto che nonostante che  $T$  sia conservato quasi esattamente nella fisica microscopica, l'invarianza per  $T$  è grossolanamente violata nel mondo macroscopico. Basti pensare alla seconda legge di termodinamica - dell'aumento dell'entropia - che implica una freccia preferita del tempo. Ora, è mai possibile che la minuscola violazione della simmetria  $T$  nelle interazioni fondamentali (che è certamente estranea per la stragrande maggioranza delle reazioni chimiche, elettromagnetiche e gravitazionali che sembrano dominare il mondo macroscopico) abbia a che fare con la seconda legge di termodinamica? L'espansione dell'universo in cui viviamo ha a che fare con essa?

## 4.5 Sistemi in Tre Dimensioni

### 4.5.1 Massa ridotta

L'Hamiltoniana di un sistema di due particelle con masse  $m_1, m_2$  che interagiscono tramite il potenziale  $V(\mathbf{r})$  dove

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (4.270)$$

è la posizione relativa, è data da

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\mathbf{r}). \quad (4.271)$$

Cambiando le variabili

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \\ \mathbf{R} &= \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \end{aligned} \quad (4.272)$$

si ha

$$H = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r + V(\mathbf{r}), \quad (4.273)$$

dove

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (4.274)$$

è la *massa ridotta*. Separando le variabili

$$\psi = \Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}), \quad (4.275)$$

troviamo l'equazione per la funzione d'onda del moto relativo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = H^{(rel)}\psi = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r + V(\mathbf{r}) \right\} \quad (4.276)$$

che è l'equazione di Schrödinger per una singola particella che si muove nel potenziale  $V(\mathbf{r})$ . Il problema di due corpi è dunque ridotto a quello di un corpo.

### 4.5.2 Moto in campo a simmetria centrale

Quando il potenziale dipende solo dal modulo della posizione  $r \equiv |\mathbf{r}|$  l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (4.277)$$

può essere risolta ponendo

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)\Phi(\theta, \phi). \quad (4.278)$$

La parte angolare dell'equazione si risolve con le funzioni armoniche sferiche

$$\Phi(\theta, \phi) = Y_{\ell, m}(\theta, \phi); \quad (4.279)$$

l'equazione radiale è data da

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) = 0. \quad (4.280)$$

Ponendo

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \quad (Def. \chi), \quad (4.281)$$

l'equazione radiale diventa

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} \chi = 0, \quad (4.282)$$

ma questa ha esattamente la forma dell'equazione di Schrödinger in una dimensione, con il potenziale "efficace",

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}. \quad (4.283)$$

Il secondo termine sopra ha un significato fisico evidente: è l'energia associata alle forze centrifughe (si noti che classicamente  $F \sim m r \dot{\theta}^2 \sim (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2 / m r^3$  per un moto circolare).

La condizione di normalizzazione è

$$\int_0^\infty dr r^2 |R|^2 = \int_0^\infty dr |\chi|^2 = 1, \quad (4.284)$$

mentre la condizione di regolarità della funzione d'onda a  $r = 0$  implica

$$\chi(0) = 0. \quad (4.285)$$

Il problema è perciò equivalente a quello di una particella che si muove in una semiretta  $0 \leq r < \infty$ , sottoposta al potenziale  $V = V_{eff}(r)$ ,  $r > 0$ ;  $V(0) = \infty$ .

Un noto teorema (vedi Sec.2.2.2) sull'assenza della degenerazione dei livelli discreti nei sistemi unidimensionali, vale anche per una particella che si muove in una semiretta: risulta che la funzione d'onda radiale è univocamente determinata da un numero quantico  $n$  - chiamato il numero quantico principale - che numera gli autovalori dell'energia. Segue che uno stato stazionario in un campo a simmetria centrale è univocamente specificato da tre numeri quantici  $(n, \ell, m)$  corrispondenti agli osservabili massimali  $(E, \mathbf{L}^2, L_z)$ . Per ragioni storiche gli stati stazionari con vari valori di  $\ell$  sono denominati come onda -  $S, P, D, F, G, H, I, K, \dots$ , rispettivamente per  $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$ .

### 4.5.3 Onde sferiche

Consideriamo prima di tutto il caso di una paticella libera ( $V = 0$ ). L'equazione di Schrödinger in questo caso è banalmente solubile nella base in cui l'impulso è diagonale (le onde piane); tuttavia le soluzioni di questo problema nella base in cui il momento angolare è ben definito, sono essenziali nello studio dei processi di diffusioni. Inoltre queste soluzioni forniscono il punto di partenza per analizzare i problemi di stati legati in potenziali a simmetria centrale.

L'equazione da risolvere è

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{\ell, l}(r) = 0, \quad (4.286)$$

dove  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ , o

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R = 0 \quad (4.287)$$

Per  $\ell = 0$ , la (4.286) si semplifica:

$$R'' + \frac{2}{r} R' + k^2 R = 0 \quad (4.288)$$

oppure

$$(rR)'' + k^2 (rR) = 0. \quad (4.289)$$

La soluzione regolare a  $r = 0$  è

$$R = A \frac{\sin kr}{r}; \quad (4.290)$$

quella singolare è

$$R = A' \frac{\cos kr}{r}. \quad (4.291)$$

La costante  $A$  di normalizzazione può essere fissata dalla condizione

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{k',\ell} R_{k,\ell} = 2\pi\delta(k' - k). \quad (4.292)$$

L'integrale è fatta senza difficoltà:

$$\begin{aligned} A^2 \int_0^\infty dr \sin kr \sin k' r &= -\frac{A^2}{4} \int_{-\infty}^\infty dr e^{ikr} (e^{ik'r} - e^{-ik'r}) \\ &= \frac{\pi A^2}{2} \delta(k - k'), \end{aligned} \quad (4.293)$$

da cui  $A = 2$ .

La soluzione per  $\ell \neq 0$  si ottiene con la seguente considerazione. Se si pone  $R_\ell = r^\ell \eta_\ell$ , l'equazione per  $\eta_\ell$  è

$$\eta_\ell'' + \frac{2(\ell+1)}{r} \eta_\ell' + k^2 \eta_\ell = 0. \quad (4.294)$$

Ora derivando questa equazione rispetto a  $r$ , si ha

$$\eta_\ell''' + \frac{2(\ell+1)}{r} \eta_\ell'' + (k^2 - \frac{2(\ell+1)}{r^2}) \eta_\ell' = 0. \quad (4.295)$$

Ma con la sostituzione  $\eta_\ell' = r \zeta_\ell$  essa diviene

$$\zeta_\ell'' + \frac{2(\ell+2)}{r} \zeta_\ell' + k^2 \zeta_\ell = 0 : \quad (4.296)$$

equazione soddisfatta da  $\eta_{\ell+1}$ . Ciò significa  $\zeta_\ell = \eta_{\ell+1}$ , cioè

$$\eta_\ell' = r \eta_{\ell+1} : \quad (4.297)$$

abbiamo quindi una relazione ricorsiva. A partire da  $\chi_0 = R_0$  si può determinare tutte le funzioni radiali. Le soluzioni regolari (che corrispondono a onde sferiche libere) sono

$$R_\ell = N_\ell r^\ell \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^\ell \frac{\sin kr}{r}. \quad (4.298)$$

Analogamente per le soluzioni singolari,

$$Q_\ell = N_\ell r^\ell \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^\ell \frac{\cos kr}{r}. \quad (4.299)$$

La costante di normalizzazione può essere fissata considerando il loro andamento asintotico, con il risultato,  $N_\ell = (-1)^\ell 2/k^\ell$  (vedi Landau-Lifshitz).

Per studiare il comportamento vicino a  $r = 0$  di  $R_\ell$  conviene introdurre la variabile  $\xi \equiv r^2$ : infatti,

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^\ell \frac{\sin kr}{r} &= \left( 2 \frac{d}{d\xi} \right)^\ell \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} k^{2n+1} \xi^n \\ &= \frac{k^{2\ell+1} (-1)^\ell}{(2\ell+1)!!} + O(r^2), \end{aligned} \quad (4.300)$$

dove  $(2\ell+1)!! \equiv (2\ell+1)(2\ell-1)(2\ell-3) \dots 5 \cdot 3 \cdot 1$ , per cui

$$R_\ell \simeq \frac{2k^{\ell+1} r^\ell}{(2\ell+1)!!} \{1 + O(r^2)\}. \quad (4.301)$$

Le onde sferiche libere si possono esprimere in termini di *funzioni di Bessel sferiche*  $j_\ell, n_\ell$ , che a sua volta sono *funzioni di Bessel* con ordini semi-interi:

$$R_{k,\ell}(r) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} J_{\ell+1/2}(kr) = 2k j_\ell(kr), \quad (4.302)$$

$$Q_{k,\ell}(r) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} N_{\ell+1/2}(kr) = 2k n_\ell(kr). \quad (4.303)$$

$J_\nu(z), N_\nu(z)$  sono le due soluzioni indipendenti dell'equazione di Bessel,

$$\frac{d^2}{dz^2} Z_\nu + \frac{1}{z} Z_\nu + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) Z_\nu = 0, \quad (4.304)$$

di cui  $J_\nu(z)$  è quella regolare a  $z = 0$ . (Vedi per es. Gradshteyn-Ryzhik) È facile verificare che nel caso di ordine semi-intero, l'equazione di Bessel si riduce alla (4.287) (con  $z = kr$ ).

Le funzioni di Bessel di ordine semi-intero - funzioni di Bessel sferiche - sono funzioni elementari:

$$j_\ell(x) = (-1)^\ell x^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\ell \frac{\sin x}{x}; \quad n_\ell(x) = -(-1)^\ell x^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\ell \frac{\cos x}{x}. \quad (4.305)$$

Le prime funzioni di Bessel sferiche sono:

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x}; & n_0(x) &= -\frac{\cos x}{x}; \\ j_1(x) &= \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}; & n_1(x) &= -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}; \\ j_2(x) &= \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \sin x - \frac{3 \cos x}{x^2}; & n_2(x) &= -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \cos x - \frac{3 \sin x}{x^2}; \end{aligned} \quad (4.306)$$

ecc.

L'andamento vicino a  $x = 0$  di queste funzioni è

$$j_\ell(x) \sim \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!}; \quad n_\ell(x) \sim \frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}}, \quad (4.307)$$

mentre il comportamento asintotico (a  $x \rightarrow \infty$ ) è

$$j_\ell(x) \sim \frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right); \quad n_\ell(x) \sim \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right). \quad (4.308)$$

A volte è conveniente introdurre le funzioni di Hankel sferiche, definite come

$$h_\ell^{(1)}(x) \equiv j_\ell(x) + i n_\ell(x); \quad h_\ell^{(2)}(x) \equiv j_\ell(x) - i n_\ell(x); \quad (4.309)$$

il loro comportamento asintotico è allora

$$h_\ell^{(1)}(x) \sim \frac{1}{x} e^{i\left(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right)}; \quad h_\ell^{(2)}(x) \sim \frac{1}{x} e^{-i\left(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right)}. \quad (4.310)$$

(Si noti - a parte il fattore  $1/x$  - che le funzioni di Hankel sferiche sono analoghe rispetto a  $j, n$ , alle funzioni esponenziali rispetto alle funzioni sin, cos. )

Le funzioni radiali corrispondenti,

$$R_{k,\ell}^{(1)} = 2k h_\ell^{(1)}(kr); \quad R_{k,\ell}^{(2)} = 2k h_\ell^{(2)}(kr) \quad (4.311)$$

hanno l'andamento asintotico

$$R_{k,\ell}^{(1)} \sim \frac{1}{kr} e^{i\left(kr - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right)}; \quad R_{k,\ell}^{(2)} \sim \frac{1}{kr} e^{-i\left(kr - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right)}; \quad (4.312)$$

sono onde sferiche che si espandono ( $R^{(1)}$ ) o si contraggono ( $R^{(2)}$ ).

Sia le onde piane (le soluzioni dell'equazione di Schrödinger libera nella base d'impulso) che le onde sferiche (col momento angolare ben definito) formano un insieme completo delle funzioni: le une possono essere sviluppate in termini delle altre. Per esempio, un'onda piana ha uno sviluppo

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta). \quad (4.313)$$

Questa formula può essere verificata paragonando il coefficiente di  $(r \cos \theta)^n$  nei due membri.

#### 4.5.4 Stati legati in una buca di potenziale tridimensionale

Il potenziale descritto da

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } r < a; \\ 0 & \text{se } r > a \end{cases} \quad (4.314)$$

rappresenta un modello rudimentale di un *nucleo* atomico: la forza nucleare ha un raggio finito e ben definito. Si paragoni questa situazione con i sistemi atomici legati dalla forza Colombiana, che ha il raggio d'azione infinita, che sarà studiata nella sottosezione successiva.

Per calcolare i livelli discreti consideriamo l'equazione di Schrödinger radiale

$$R'' + \frac{2}{r}R' + (k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2})R = 0, \quad r > a; \quad (4.315)$$

dove  $k^2 = 2mE/\hbar^2 < 0$  ( $k$  immaginario), e

$$R'' + \frac{2}{r}R' + (k'^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2})R = 0, \quad r < a; \quad (4.316)$$

dove  $k'^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2 > 0$  ( $k'$  reale), per valori dell'energia  $-V_0 < E < 0$ . Essa ha la forma dell'equazione di Schrödinger libera in ambedue i casi: la soluzione generale è data da una combinazione lineare di funzioni di Bessel sferiche  $j_{\ell}$  e  $n_{\ell}$ , o equivalentemente, di  $h_{\ell}^{(1)}$  e  $h_{\ell}^{(2)}$ .

Per la soluzione interna ( $r < a$ ) la condizione di regolarità della funzione d'onda a  $r = 0$  univocamente seleziona la soluzione

$$R_{\ell}^{(int)} = A j_{\ell}(k' r) \quad (4.317)$$

( $A$  è una costante). D'altra parte, la soluzione esterna deve essere tale da garantire la normalizzabilità della funzione d'onda. Dalle formule asintotiche (4.308), (4.310), si apprende che per  $k = i\sqrt{-2mE}/\hbar \equiv i\kappa$  ( $\kappa > 0$ ) e per  $r \rightarrow \infty$ ,

$$j_{\ell}, n_{\ell}, h_{\ell}^{(2)} \sim \frac{1}{r} e^{+\kappa r}; \quad h_{\ell}^{(1)} \sim \frac{1}{r} e^{-\kappa r}, \quad (4.318)$$

perciò soltanto  $h_{\ell}^{(1)}(i\kappa r)$  è compatibile con la normalizzabilità. Si ha allora

$$R_{\ell}^{(est)} = B h_{\ell}^{(1)}(i\kappa r). \quad (4.319)$$

La soluzione interna (4.317) e quella esterna (4.319) devono essere connesse di modo che la funzione d'onda e la sua derivata prima siano continue a  $r = a$ . Segue la condizione

$$\frac{i\kappa h_{\ell}^{(1)'}(i\kappa a)}{h_{\ell}^{(1)}(i\kappa a)} = \frac{k' j_{\ell}'(k'a)}{j_{\ell}(k'a)}, \quad (4.320)$$

che determina gli autovalori dell'energia.

Per esempio, per  $\ell = 0$  abbiamo  $j_0(k'r) = \frac{\sin k'r}{k'r}$ ;  $h_0^{(1)}(ikr) = -\frac{e^{-kr}}{kr}$ , e la condizione sopra si riduce, col cambiamento di variabili,  $\xi \equiv k'a$ ;  $\eta \equiv \kappa a$ , a

$$\xi \cot \xi = -\eta. \quad (4.321)$$

Le variabili  $\xi$  e  $\eta$  non sono indipendenti ma sono legati da

$$\xi^2 + \eta^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2. \quad (4.322)$$

Questo sistema di equazioni è lo stesso di quello (cf. (2.221)) incontrato nel caso della buca di potenziale uni-dimensionale. Per essere più precisi, qui troviamo un tipo solo di soluzioni (nel caso unidimensionale, ci sono due tipi di soluzioni). Dai grafici che rappresentano le curve (4.321) e (4.322) nel quadrante  $\xi > 0; \eta > 0$  si vede allora che

- (1) per  $\sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2} \leq \pi/2$ , nessuna soluzione è possibile: non ci sono i stati legati;
- (2) per  $\pi/2 < \sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2} \leq 3\pi/2$  c'è una sola soluzione (un solo stato legato);
- (3) per  $3\pi/2 < \sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2} \leq 5\pi/2$  esistono due livelli discreti, etc.

A differenza col caso uni-dimensionale, perciò, esiste un valore minimo dei parametri (corrispondenti a  $\sqrt{2mV_0a^2/\hbar^2} = \pi/2$ ) al di sotto del quale la buca non confina la particella. Qualitativamente, tale differenza può essere attribuita al fatto che una particella confinata in una regione finita ( $\Delta x_i \leq a$ ) deve avere una minima indeterminazione in ciascun componente dell'impulso ( $\Delta p_i \geq \hbar/a$ ). Il contributo all'energia cinetica di tale fluttuazione quantistica minima è più grande, più grande è la dimensione spaziale del sistema.

#### Esercizio:

Calcolare numericamente, con l'uso del programma Mathematica (Maple, ecc.), i primi cinque livelli energetici della buca di potenziale tridimensionale, con parametri, determinando il momento angolare orbitale  $\ell$  di ciascuno:

$$m = 940 \text{ MeV}/c^2; \quad a = 3 \text{ fm}; \quad V = 300 \text{ MeV}. \quad (4.323)$$

### 4.5.5 Atomo di idrogeno

L'atomo di idrogeno - uno stato legato di un elettrone ed un protone formato dall'attrazione Coulombiana

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \quad (4.324)$$

- è il più semplice di tutti i sistemi atomici. La massa ridotta  $m$  in questo caso è uguale a  $m = m_e m_p / (m_e + m_p) \simeq 0.995 m_e$  e può essere considerato uguale alla massa dell'elettrone, vista l'approssimazione (non-relativistica) implicita nella formula sopra (vedi dopo).

L'equazione radiale è

$$\frac{d^2}{dr^2}R + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}R - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{e^2}{r})R = 0. \quad (4.325)$$

Il potenziale "efficace radiale

$$V_{eff}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \quad (4.326)$$

tende a zero a  $r \rightarrow \infty$ . Stati legati sono possibili solo per i valori negativi dell'energia.

Per semplificare la scrittura, conviene fare alcune sostituzioni: porremo

$$\tilde{E} \equiv \frac{mE}{\hbar^2} = [cm^{-2}]; \quad \frac{me^2}{\hbar^2} = [cm^{-1}] \equiv 1. \quad (4.327)$$

Non ci sarà difficoltà a recuperare la costante  $\frac{me^2}{\hbar^2}$  alla fine dell'analisi, con una semplice considerazione dimensionale. L'equazione

$$\frac{d^2}{dr^2}R + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}R - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R + 2(\tilde{E} + \frac{1}{r})R = 0, \quad (4.328)$$

sarà ulteriormente semplificata con il cambio della variabile

$$\rho \equiv \frac{2r}{\lambda}; \quad \lambda \equiv \frac{1}{\sqrt{-2\tilde{E}}}. \quad (4.329)$$

(4.328) ora prende forma

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R = 0, \quad (4.330)$$

dove  $R' \equiv (d/d\rho)R$ .

A piccoli  $\rho$  il termine centrifugo domina nella parentesi quadrata, e dà il comportamento

$$R_\ell \sim \rho^\ell, \quad (4.331)$$

mentre a grande  $\rho$  l'equazione si riduce a  $R'' - (1/4)R \simeq 0$  sicché

$$R_\ell \sim e^{\pm \frac{1}{2}\rho}. \quad (4.332)$$

Ovviamente si dovrà scegliere la soluzione con  $e^{-\frac{1}{2}\rho}$  per assicurare la normalizzabilità.

Poniamo ora

$$R \equiv \rho^\ell e^{-\frac{1}{2}\rho} w_\ell, \quad (Def. w_\ell). \quad (4.333)$$

L'equazione per  $w_\ell$  è

$$\rho w'' + (2\ell + 2 - \rho)w' + (\lambda - \ell - 1)w = 0; \quad (4.334)$$

si vuole trovarne la soluzione tale che  $w(0) = \text{cost.} (\neq 0)$ ;  $w(\rho) < \rho^A$ ,  $\rho \rightarrow \infty$ . La (4.334) può essere risolta col metodo di sviluppo in serie (metodo di Frobenius). Sostituendo

$$w(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k, \quad a_0 \neq 0 \quad (4.335)$$

nella (4.334) si trovano le equazioni

$$(2\ell + 2)a_1 + (\lambda - \ell - 1)a_0 = 0; \quad (4.336)$$

$$2a_2 - a_1 + 2(2\ell + 2)a_2 + (\lambda - \ell - 1)a_1 = 0; \quad (4.337)$$

$$\dots\dots\dots (4.338)$$

$$(k+1)ka_{k+1} - ka_k + (k+1)(2\ell + 2)a_{k+1} + (\lambda - \ell - 1)a_k = 0; \quad (4.339)$$

ecc. Per  $k \geq 1$  si ha dunque una relazione ricorsiva

$$(k+1)(2\ell + 2 + k)a_{k+1} + (\lambda - \ell - k - 1)a_k = 0. \quad (4.340)$$

La serie (4.335) o termina ad un  $k$  finito (in tal caso,  $w$  è un polinomio) o è una serie infinita. Nel secondo caso, l'andamento asintotico di  $w$  è determinato dai termini con  $k$  grandi. Ma per  $k$  grandi vale una relazione approssimativa

$$a_{k+1} = \frac{a_k}{k} = \frac{a_{k-1}}{k(k-1)} = \dots = \text{cost.} \frac{1}{k!}, \quad (4.341)$$

perciò

$$w(\rho) \sim e^\rho, \quad \rho \rightarrow \infty. \quad (4.342)$$

Tale comportamento è incompatibile con la richiesta della normalizzabilità di  $R \equiv \rho^\ell e^{-\frac{1}{2}\rho} w_\ell$ : la serie (4.335) deve terminare.

Dalla relazione ricorsiva si apprende che la serie di  $w$  termina se il parametro  $\lambda$  è tale che

$$\lambda - \ell - k - 1 = 0 \quad (4.343)$$

per qualche intero nonnegativo  $k$ . Visto che anche  $\ell$  (momento angolare) è un numero naturale, segue che

$$\lambda = n \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (4.344)$$

Ricordando le (4.329) e (4.327) questo risultato significa la condizione di quantizzazione dell'energia

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mn^2}. \quad (4.345)$$

Il secondo membro (con la dimensione apparente  $[gr \cdot cm^4 \cdot sec^{-2}]$ ) non ha la dimensione giusta di un'energia, ma questo è dovuto all'unità peculiare adottata (la seconda relazione della (4.327)): recuperando la dimensione mancante  $[cm^{-2}]$  tramite il quadrato di " $1'' = me^2/\hbar^2$ ", si ottiene

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (4.346)$$

la famosa formula di Bohr.

Ad ogni dato valore di  $n (> 0)$  il numero quantico  $\ell$  prende i valori

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (4.347)$$

(vedi (4.343)). Visto che l'energia non dipende dal valore del momento angolare  $\ell$  e visto che ad ogni valore di  $\ell$  ci sono  $2\ell + 1$  possibili valori di  $m$  (e gli autostati corrispondenti), risulta che l' $n$ -simo livello è

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2 \quad (4.348)$$

volte degenerare. Tale degenerazione è specifica del caso Coulombiano.

La soluzione sopra può essere usata per costruire anche la funzione d'onda associata ad ogni autovalore. Tuttavia esiste un metodo più efficace - metodo di funzione generatrice - che ci permette di ottenere i risultati generali. L'equazione soddisfatta da  $w(\rho)$  per  $\lambda = n$

$$\rho w'' + (2\ell + 2 - \rho)w' + (n - \ell - 1)w = 0 \quad (4.349)$$

ha una nota soluzione regolare che è il *polinomio associato di Laguerre*

$$w_{n,\ell} = L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho). \quad (4.350)$$

I *polinomi di Laguerre* sono generati dalla funzione generatrice

$$U(\rho, s) = \frac{e^{-\rho s/(1-s)}}{1-s} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L_k(\rho)}{k!} s^k, \quad (4.351)$$

( $s < 1$ ). Come nel caso di polinomi di Legendre o di Hermite, si procede con la considerazione delle derivate rispetto alla variabile e al parametro  $s$ . La derivata  $d/d\rho$  risulta una relazione

$$L'_k - kL'_{k-1} = -kL_{k-1}; \quad (4.352)$$

mentre l'operazione  $d/ds$  sulla funzione generatrice dà

$$L_{k+1} = (2k+1-\rho)L_k - k^2L_{k-1}. \quad (4.353)$$

L'equazione che contiene solo  $L_k$  e le sue derivate si trova da queste due relazioni ricorsiva:

$$\rho L''_k + (1-\rho)L'_k + kL_k = 0. \quad (4.354)$$

Questa assomiglia all'eq.(4.349) ma non ha esattamente la forma giusta.

Se introduciamo invece i polinomi associati di Laguerre,

$$L_k^p(\rho) \equiv \frac{d^p}{d\rho^p} L_k(\rho), \quad (4.355)$$

l'equazione soddisfatta da essi

$$\rho L_k^{p''} + (p+1-\rho)L_k^{p'} + (k-p)L_k^p = 0 \quad (4.356)$$

coincide con la (4.349) se si identificano

$$p = 2\ell + 1, \quad k = n + \ell : \quad (4.357)$$

ciò significa la (4.350).

I polinomi associati di Laguerre sono generati da

$$U_p(\rho, s) = \frac{(-)^p e^{-\rho s/(1-s)}}{(1-s)^{p+1}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L_k^p(\rho)}{k!} s^k. \quad (4.358)$$

In conclusione la funzione d'onda radiale è

$$R_{n,\ell} = \rho^\ell e^{-\rho/2} w(\rho) = C_{n,\ell} \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho), \quad (4.359)$$

$$\rho \equiv \frac{2r}{n} = \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{2r}{n} = \frac{2r}{nr_B}; \quad r_B \equiv \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (4.360)$$

( $r_B \simeq 5.291 \cdot 10^{-9} \text{cm}$  = raggio di Bohr). La costante di normalizzazione è data da

$$C_{n,\ell} = -\frac{2}{n^2} r_B^{-3/2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{\{(n+\ell)!\}^3}}. \quad (4.361)$$

Le prime funzioni d'onda possono essere calcolate senza difficoltà dalla (4.358). Le funzioni radiali dei livelli ( $n=1, \ell=0$ ) (stato fondamentale) e ( $n=2, \ell=0, 1$ ) (il primo livello di eccitazione) sono:

$$\begin{aligned} R_{1,0}(r) &= 2 r_B^{-3/2} e^{-r/r_B}; \\ R_{2,0}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{2}} r_B^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{r_B}\right) e^{-r/2r_B}; \\ R_{2,1}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6}} r_B^{-3/2} \frac{r}{r_B} e^{-r/2r_B}. \end{aligned} \quad (4.362)$$

Infine, la funzione d'onda completa dello stato  $(n, \ell, m)$  è

$$\Psi_{(n,\ell,m)} = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi). \quad (4.363)$$

Per convenienza riportiamo qui le prime armoniche sferiche (4.84):

$$\begin{aligned}
 Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\
 Y_{1,0} &= i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}, \\
 Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3\cos^2\theta), \\
 Y_{2,\pm 1} &= \pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta e^{\pm i\phi}, \\
 Y_{2,\pm 2} &= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}.
 \end{aligned} \tag{4.364}$$

### Osservazioni

- (i) La meccanica Quantistica riproduce esattamente i livelli d'energia ottenuti da Bohr con l'uso del principio di corrispondenza (e che sono in accordo con le linee spettrali osservate.)
- (ii) L'estensione spaziale della funzione d'onda dello stato fondamentale  $r \simeq r_B \simeq 5.291 \cdot 10^{-9} \text{cm}$  determina la grandezza dell'atomo d'idrogeno.
- (iii) Le formule (per l'energia e per la funzione d'onda) ottenute qui sono valide per tutti gli ioni composti di un elettrone e un nucleo di carica elettrica  $Z|e|$ , dopo la sostituzione  $e^2 \rightarrow Ze^2$ .
- (iv) Il valor medio dell'impulso,  $\sqrt{\langle p^2 \rangle}$  (calcolabile esplicitamente con la funzione d'onda data sopra, o con la relazione di Heisenberg con l'input  $\Delta x \sim r_B$ ), è dell'ordine di  $me^2/\hbar$ . La “velocità media è allora

$$v \sim p/m \simeq e^2/\hbar = \alpha c \simeq c/137 \ll c, \tag{4.365}$$

dove  $\alpha \equiv e^2/\hbar c \simeq 1/137$  è la *costante di struttura fine*. Il moto dell'elettone è quindi non relativistico, e questo giustifica *a posteriori* l'approssimazione nell'Hamiltoniana (4.324). Allo stesso tempo si dovrà aspettare in generale delle correzioni relativistiche dell'ordine di un per cento.

## 4.6 Problemi

- (1) Si dimostri la disuguaglianza

$$\langle \psi | J_3^2 | \psi \rangle \leq \langle \psi | \mathbf{J}^2 | \psi \rangle \tag{4.366}$$

per qualsiasi stato  $|\psi\rangle$ . Si dimostri che un autovalore  $m$  di  $J_3$  soddisfa  $m^2 \leq j(j+1)$ .

- (2) Un sistema di spin  $1/2$  sottoposto ad un campo magnetico esterno uniforme si trova all'istante iniziale nello stato di spin “up (i.e., autostato di  $s_z$ )”. Sia

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\lambda \sigma_x \tag{4.367}$$

l'Hamiltoniana del sistema. Si calcoli la probabilità che il sistema si trovi all'istante  $t$  successivo nello stato di spin “up o nello stato di spin “down.

- (3) Costruire le tre matrici che rappresentano le componenti dell'operatore di spin nel caso di  $S = 1$ .

- (4) Una particella di spin 1 è nell'autostato di  $S_n$ ,

$$S_n|\psi\rangle = |\psi\rangle,$$

dove  $S_n \equiv \mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$  è la proiezione (componente) dell'operatore di spin nella direzione  $\mathbf{n}$ . Supponiamo che il versore  $\mathbf{n}$  sia dato da

$$\mathbf{n} = (\sin\theta, 0, \cos\theta).$$

All'istante  $t = 0$  si accende un campo magnetico uniforme e costante,  $\mathbf{H} = (0, 0, B)$ . L'interazione è descritta dall'Hamiltoniana,

$$H = -\mu \mathbf{S} \cdot \mathbf{H}$$

- (a) Calcolare la funzione d'onda all'istante  $t = 0$ .

- (b) Calcolare l'operatore di evoluzione

$$U = e^{-iHt/\hbar}.$$

- (c) Determinare la probabilità  $P(t)$  che una misura di  $S_x$  fatta all'istante  $t$  (per es., con un apparato di tipo Stern-Gerlach) dia il risultato, 1, come funzione di  $t$ .

- (5) Un sistema di due particelle (ambedue di spin 1/2 è descritto dall'Hamiltoniana,

$$H = -\sigma_x(1) - \sigma_x(2) + \lambda \sigma_z(1) \sigma_z(2),$$

dove  $\sigma_x(1)$  è la matrice di Pauli  $\sigma_x$  per la particella 1, ecc. Calcolare i livelli energetici e le funzioni d'onda.

- (6) Una particella classica con carica elettrica  $e$  si muove in un campo magnetico prodotto da un monopolo magnetico,  $\mathbf{B} = g\mathbf{r}/r^3$ , dove  $g$  è la carica magnetica. L'equazione del moto (classico) è

$$m\dot{\mathbf{r}} = \frac{e}{c} \mathbf{r} \times \mathbf{B}.$$

Si dimostri che il "momento angolare  $\mathbf{r} \times m\dot{\mathbf{r}}$  non è conservato, e che il momento angolare modificato

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\dot{\mathbf{r}} - eg \frac{\mathbf{r}}{r}$$

è invece conservato. In meccanica quantistica le componenti del momento angolare sono quantizzate. Dalla considerazione della componente radiale del suddetto momento angolare modificato, si ottiene la famosa condizione di quantizzazione di Dirac,

$$\frac{eg}{c} = \frac{n}{2}\hbar, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.368)$$

La carica elettrica è quantizzata, se supponiamo che da qualche parte dell'universo esiste un monopolo magnetico!

- (7) Il sistema composto di un elettrone e di un positrone (ambedue di spin 1/2) è in un campo magnetico uniforme. L'Hamiltoniana (più precisamente la parte dipendente dallo spin: ci interesseremo solo di questa) è data da

$$H = A \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 + B (s_{1z} - s_{2z}),$$

dove  $A$  e  $B$  sono costanti.

- (i) Determinare gli autovalori e gli autostati dell'energia nel caso  $B = 0, A \neq 0$ .
- (ii) Determinare gli autovalori e gli autostati dell'energia nel caso  $A = 0, B \neq 0$ .
- (iii) Calcolare gli autovalori dell'energia nel caso generale,  $A \neq 0; B \neq 0$ , e discutere i due limiti ( $A \gg B; B \gg A$ .)

(8) Si consideri una particella di spin  $1/2$  che si muove in una dimensione, con l'Hamiltoniana,

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + W(x)^2 + \hbar\sigma_3 \frac{dW(x)}{dx}), \quad (4.369)$$

dove  $p = -i\hbar(d/dx)$ ;  $W(x)$  è una funzione reale, e  $\sigma_3$  è una delle matrici di Pauli. Supponiamo che

$$|W| \rightarrow \infty \quad (4.370)$$

per  $x \rightarrow \pm\infty$ , di modo che lo spettro è puramente discreto.

- (i) Per  $W(x) = \omega x$ , dove  $\omega$  è una costante reale positiva, si trovi lo spettro, i.e., i livelli energetici e la loro degenerazione.
- (ii) Per generico  $W(x)$  si dimostrino le seguenti identità:

$$Q_1^2 = Q_2^2 = H, \quad (4.371)$$

dove

$$Q_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1 p + \sigma_2 W(x)); \quad (4.372)$$

$$Q_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_2 p - \sigma_1 W(x)). \quad (4.373)$$

- (iii) Si calcolino i seguenti commutatori e "anticommutatori",

$$\begin{aligned} \{Q_1, Q_2\} &\equiv Q_1 Q_2 + Q_2 Q_1; \quad [Q_1, H]; \quad [Q_2, H]; \\ [\sigma_3, H]; \quad [\sigma_3, Q_1]; \quad [\sigma_3, Q_2]; \quad \{\sigma_3, Q_1\}; \quad \{\sigma_3, Q_2\}. \end{aligned} \quad (4.374)$$

- (iv) Dimostrare che per uno stato qualsiasi

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \geq 0. \quad (4.375)$$

Si dimostri dunque che per l'energia dello stato fondamentale vale:

$$E_0 \geq 0. \quad (4.376)$$

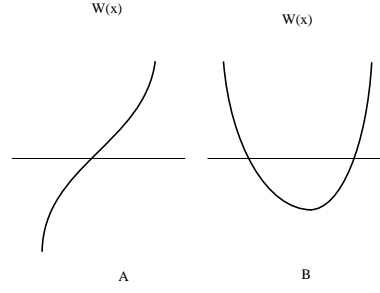
- (v) Si dimostri che la condizione necessaria e sufficiente per  $E_0 = 0$  è che esista una soluzione normalizzabile di

$$p\psi_0(x) = -iW(x)\sigma_3\psi_0(x). \quad (4.377)$$

Di conseguenza, si dimostri che per  $W(x)$  di Fig.4.1 A esiste uno stato fondamentale con  $E_0 = 0$  mentre per  $W(x)$  di Fig.4.1 B non esiste alcuno.

- (vi) Dimostrare che tutti gli stati con  $E \neq 0$  sono doppiamente degeneri, mentre lo stato con  $E = 0$  (se esiste) è singolo.

**Nota:**  $Q_1, Q_2$  sono esempi di operatori di *supersimmetria*. Questo sistema (meccanica quantistica supersimmetrica in una dimensione - Witten (1981)) illustra bene l'uso e la potenza di una simmetria.

Figura 4.1:  $W(x)$ 

- (9) Un deutone è composto da un protone e un neutrone. Si supponga che il potenziale tra i due nucleoni sia approssimato con una buca tridimensionale,

$$V_{nuc}(\mathbf{r}) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } r < a; \\ 0 & \text{se } r > a \end{cases} \quad (4.378)$$

dove  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ,  $\mathbf{r}_1$  e  $\mathbf{r}_2$ , sono le posizioni del protone e del neutrone.

- i) Supponendo che la massa ridotta dei due nucleoni  $\mu = m_N/2$ , il raggio delle forze nucleari,  $a$ , e la profondità del potenziale  $V_0$ , siano tali che

$$\sqrt{2\mu V_0 a^2 / \hbar^2} = \frac{\pi}{2} + \epsilon, \quad \epsilon \ll 1, \quad (4.379)$$

si trovi l'energia (all'ordine  $O(\epsilon^2)$ ) dello stato fondamentale ( $\ell = 0$ ) del deutone.

- ii) Prendendo per valori del raggio del deutone e della massa del nucleone,

$$a \simeq 2.0 \text{ fm}, \quad m_N \simeq 1.7 \cdot 10^{-24} \text{ gr} \simeq 940 \text{ MeV}/c^2 \quad (4.380)$$

e usando il valore empirico dell'energia di legame del deutone 2.3 MeV, si determini  $V_0$ . (1 MeV  $\simeq 1.6 \cdot 10^{-6}$  erg.)

Attenzione: per trovare  $E$  all'ordine  $O(\epsilon^2)$  è sufficiente determinare  $\eta$  al primo ordine in  $\epsilon$ , dalle equazioni soddisfatte da  $\xi$  e da  $\eta$ , dove  $\xi \equiv k'a$ ;  $\eta \equiv \kappa a$ ,  $k'^2 = 2\mu(E + V_0)/\hbar^2 > 0$ ,  $\kappa = \sqrt{-2\mu E}/\hbar > 0$ .

- (10) Si consideri un atomo di idrogeno con un termine perturbativo,

$$H' = V(r) \mathbf{s} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{s} \cdot \mathbf{p} V(r) \quad (4.381)$$

dove  $\mathbf{s}$  è l'operatore di spin dell'elettrone,  $\mathbf{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ ;  $\mathbf{p}$  l'impulso,  $V(r)$  è un potenziale a simmetria centrale.

- i) Spiegare perché  $H'$  non può essere semplicemente scritto come  $2V(r) \mathbf{s} \cdot \mathbf{p}$ ;  
 ii) Dire quali degli operatori tra  $\mathcal{P}$  (parità),  $\mathbf{L}$  (momento angolare orbitale),  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s}$  (momento angolare totale),  $\mathbf{J}^2$ , e  $\mathbf{L}^2$ , sono conservati;  
 iii) Elencare, senza calcoli espliciti, gli stati non perturbati  $|n, \ell, m, s_z\rangle$  per i quali l'elemento di matrice

$$C(n, \ell, m, s_z) = \langle n, \ell, m, s_z | H' | 1, 0, 0, \frac{1}{2} \rangle \quad (4.382)$$

è non nullo, dove con  $(n, \ell, m; s_z)$  sono indicati il numero quantico principale, il momento angolare orbitale, il numero quantico azimutale, e la componente  $z$  di spin dell'elettrone. Determinare i rapporti tra gli elementi non nulli per lo stesso valore di  $n$ , i.e.,

$$\frac{C(n, \ell, m; s_z)}{C(n, \ell', m'; s'_z)}. \quad (4.383)$$

- iv) Calcolare esplicitamente gli elementi di matrice  $C(n, \ell, m; s_z)$  del punto (iii) per  $n = 2$  e per la scelta del potenziale  $V(r) = g\delta^3(\mathbf{r})$ , e verificare il risultato generale (4.383),

## 4.7 Particelle cariche in campi elettromagnetici

Il moto di una particella carica ( $q$ ) in un campo elettromagnetico  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  è descritto dall'Hamiltoniana

$$H = [\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + q\phi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}), \quad (4.384)$$

dove  $V$  è il potenziale meccanico.

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (4.385)$$

Il potenziale vettoriale  $\mathbf{A}$  e il potenziale scalare  $\phi$  sono definiti a meno di trasformazioni di gauge

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f; \quad \phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}; \quad (4.386)$$

$\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  sono invarianti. L'Hamiltoniana non è invariante:

$$H \rightarrow H - \frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}. \quad (4.387)$$

Tuttavia, la fisica resta invariante per tali trasformazioni, come si dimostra facendo trasformazioni di gauge sulla funzione d'onda

$$\psi \rightarrow e^{i\frac{q}{c}f} \psi; \quad (4.388)$$

L'equazione di Schrödinger ha la forma originale

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi \quad (4.389)$$

in termini di funzione d'onda trasformata.

Le interazioni con il campo vettoriale, rappresentata da una sostituzione formale  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  nel termine cinetico, è noto come interazioni (o l'accoppiamento) minimali. L'equazione di Heisenberg (o l'equazione classica) che segue è

$$m\ddot{\mathbf{r}} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}, \quad (4.390)$$

con il noto termine di forza di Lorentz.

## 4.8 Effetto Aharonov-Bohm

Consideriamo ora il moto di tale particella in un campo magnetico *statico*,  $\phi = 0$ ;  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r})$ . Prima di tutto dimostreremo che la soluzione dell'equazione del moto

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi \quad (4.391)$$

in presenza del campo magnetico, è dato, in termini della soluzione del problema *senza*  $\mathbf{B}$ , come

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{iq}{c\hbar} \int^{\mathbf{r}} dx^i A_i} \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t), \quad (4.392)$$

dove

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t) = H|_{\mathbf{A}=0} \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t).$$

La dimostrazione è elementare: ogni azione di  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  dà

$$\mathbf{p} [e^{\frac{iq}{c\hbar} \int^{\mathbf{r}} dx^i A_i} \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t)] = \frac{q}{c}\mathbf{A} e^{\frac{iq}{c\hbar} \int^{\mathbf{r}} dx^i A_i} \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t) + e^{\frac{iq}{c\hbar} \int^{\mathbf{r}} dx^i A_i} \mathbf{p} \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t). \quad (4.393)$$

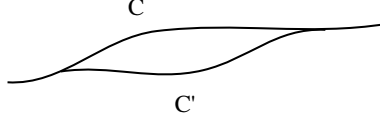


Figura 4.2:

Perciò ogni fattore  $\mathbf{p}$  in  $H$  diventa  $\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}$  attraversando il fattore di fase, e così

$$H[e^{\frac{iq}{c\hbar}\int^{\mathbf{r}} dx^i A_i} \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t)] = e^{\frac{iq}{c\hbar}\int^{\mathbf{r}} dx^i A_i} H_0 \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [e^{\frac{iq}{c\hbar}\int^{\mathbf{r}} dx^i A_i} \psi^{(0)}(\mathbf{r}, t)], \quad (4.394)$$

per un campo magnetico statico.

L'esponente nella (4.392) è l'integrale lungo un cammino con l'estremità al punto  $\mathbf{r}$ <sup>2</sup>. Tale fattore potrebbe essere mal definito se esso dipendesse dal cammino. La modifica dell'integrale al variare del cammino,  $C \rightarrow C'$  è

$$\frac{iq}{c\hbar} \int_{C'}^{\mathbf{r}} dx^i A_i - \frac{iq}{c\hbar} \int_C^{\mathbf{r}} dx^i A_i = \frac{iq}{c\hbar} \oint dx^i A_i = \frac{iq}{c\hbar} \int d\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = \frac{iq}{c\hbar} \Phi, \quad (4.395)$$

dove  $\Phi$  è il flusso magnetico attraverso la superficie circondata dalla curva chiusa  $C' - C$ . Il fattore esponenziale è perciò ben definito (*i.e.*, dipende solo dal punto di estremità del cammino  $\mathbf{r}$ ) se il percorso è interamente in una regione priva di campo magnetico. Vice versa, se due cammini rinchiudono una regione con un flusso magnetico non nullo ( $\Phi$ ) (Fig. 4.2), la fase della funzione d'onda in due casi differisce di  $\frac{iq}{c\hbar} \Phi$ .

Si noti che la differenza della fase (4.395) è, inoltre, invariante per trasformazioni di gauge

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \frac{1}{q} \nabla \alpha(\mathbf{r}); \quad (4.396)$$

a differenza della fase in assoluto che di per sé non ha un significato fisico.

Una situazione fisica molto interessante si presenta se si considera l'esperienza di Young con un fascio di elettroni, con una doppia fenditura e con uno schermo (Fig. 1.1)), ma con l'aggiunta di un solenoide molto lungo e sottile, posto giusto dietro la fenditura (Fig. ??, il solenoide si estende nella direzione perpendicolare alla pagina) di modo che la probabilità che l'elettrone passi nella vicinanza del solenoide sia trascurabile. Senza la corrente nel solenoide, perciò senza il flusso magnetico, l'effetto di tale solenoide sarà trascurabile, e ci si aspetta di osservare la solita frange di interferenza equidistante sullo schermo, dovuta alla differenza dei percorsi tra le onde che hanno passato attraverso le due fenditure (Eqs. (4.122), (1.1)).

Ora, in presenza del campo magnetico nel solenoide, la differenza delle fase delle due onde acquista un termine in più, (4.395),

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta\ell - \frac{q\Phi}{c\hbar}, \quad \Delta\ell \simeq \frac{2xd}{L}, \quad (4.397)$$

di conseguenza le posizioni delle massime intensità sullo schermo si sposteranno di

$$\delta x = \frac{q\lambda L \Phi}{4\pi c\hbar d}. \quad (4.398)$$

Questo effetto è stato predetto da Aharonov e Bohm ed è stato sperimentalmente confermato. Esso è sorprendente se ci rendiamo conto del fatto che con un solenoide molto sottile e

<sup>2</sup>Il punto iniziale del cammino  $\mathbf{r}_0$  è arbitrario. La dipendenza da  $\mathbf{r}_0$  può essere compensata da un opportuno fattore di fase costante della funzione  $\psi^{(0)}$ .

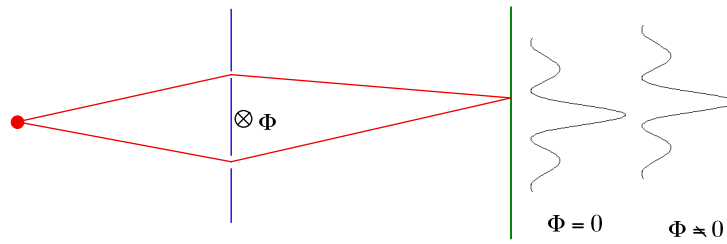


Figura 4.3:

molto lungo (solenoide ideale), il campo magnetico è contenuto all'interno del solenoide:  $\mathbf{B} = 0$  fuori. In una buona approssimazione si può supporre che l'elettrone passa sempre nella regione di spazio dove  $\mathbf{B} = 0$ . In meccanica classica, in tale situazione non ci si aspetterebbe nessun effetto fisico osservabile.

In meccanica quantistica, la particella interagisce con il potenziale vettoriale (l'accoppiamento "minimale": vedi l'eq. (??)), e non direttamente al campo magnetico,  $\mathbf{B}$ . L'effetto Aharonov-Bohm è dovuto a questo fatto. Non si deve tuttavia affrettarsi a concludere che  $\mathbf{A}$  abbia un significato fisico: esso dipende dalla scelta di gauge! In verità, in meccanica quantistica, è il fattore di fase, o meglio, la differenza di tali fase, (4.395), che ha un significato fisico ben definito. Si noti che quest'ultima è invariante di gauge.

È curioso che l'effetto Aharonov-Bohm, una semplice applicazione dei principi della meccanica quantistica e dell'elettromagnetismo, fosse stato scoperto solo trenta anni dopo che la meccanica quantistica è stata correttamente formulata da Heisenberg, Schrödinger, Bohr, attorno a 1924. La sottigliezza menzionata sopra (qual'è la quantità fisica osservabile), tuttavia, ha portato alcuni fisici a mettere in discussione la correttezza dell'interpretazione dell'effetto osservato. Tale diatriba è stata risolta in modo definitivo in una recente serie di esperimenti sorprendenti fatti al Laboratorio centrale di Hitachi, da Tonomura e dai suoi collaboratori.

La diatriba nasceva dai seguenti aspetti piuttosto delicati, sia sperimentali che teorici, dell'effetto A-B. Prima di tutto, in meccanica quantistica, l'elettrone è descritto da una funzione d'onda, ed è difficile escludere completamente che esso penetri anche nella regione dove è situato il solenoide,  $\mathbf{B} \neq 0$ . Un altro problema sperimentale è che un solenoide non è mai ideale, non è mai infinitamente lungo, il campo magnetico non è mai completamente contenuto all'interno del solenoide. Inoltre, dal punto di vista teorico, ci sarebbe la possibilità di scegliere la gauge di modo che nelle equazioni appaiono soltanto il campo magnetico  $\mathbf{B}$  (o le sue derivate), e non più il potenziale vettoriale  $\mathbf{A}$  (gauge di Schwinger). Se tale scelta di gauge fosse legittima, non ci si dovrebbe aspettare nessun effetto A-B, se l'elettrone non passa mai nella regione con il campo magnetico (o se l'apparato sperimentale è costruito di modo che tale probabilità sia comunque trascurabile). Ogni effetto osservato sarebbe da attribuire alla non perfezione dell'apparato.

A quest'ultima obiezione teorica può essere risposta osservando che una gauge in cui il potenziale vettoriale viene eliminata in favore di  $\mathbf{B}$  è necessariamente singolare, e perciò non è una scelta accettabile.

Le prime obiezioni sono però più insidiose. L'idea brillante che ha permesso al gruppo di Tonomura di ovviare questi problemi, sotto il suggerimento di C.N. Yang, è stato quello di ricoprire completamente un anello microscopico di magneto con uno strato superconduttore (Fig.4.4). Si veda la nota seguente su aspetti salienti della superconduttività e del fenomeno della quantizzazione del flusso magnetico.

Facendo attraversare il fascio di elettroni parzialmente dentro e parzialmente fuori il foro e osservando la frange dell'interferenza, si osservano gli effetti alla Aharonov-Bohm. Ma l'osservazione determinante è il fatto che lo spostamento di fase diventa o zero o  $\pi$ , quando il ricoprimento superconduttore dell'anello diventa superconduttore (al di sotto della tem-

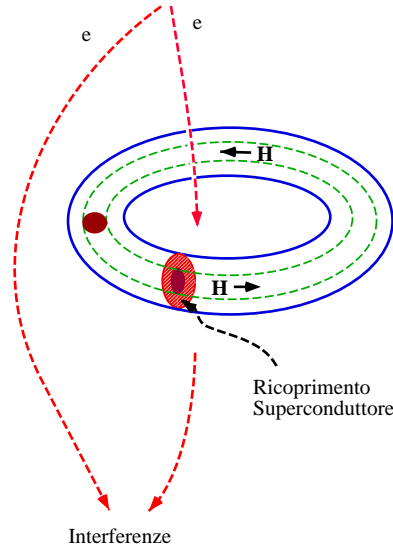


Figura 4.4: Lo schema dell'esperimento di Tonomura et.al.

peratura critica per Nb,  $T_c = 9.2\text{K}$ ), mentre al di sopra della temperatura critica,  $\Delta\phi$  prende un valore generico casuale, dipendente da come il campione è stato preparato.

Si osservino in particolare che

- (i) il campo magnetico è contenuto all'interno dell'anello superconduttore e non può fuoriuscire (effetto Meissner), e forma un solenoide di forma anulare ideale, *i.e.*, senza le estremità;
- (ii) l'elettrone è schermato dalla ricoprimento esterno dell'anello e non può penetrare all'interno;
- (iii) il flusso magnetico all'interno del anello è quantizzato:

$$\Phi_n = \frac{\pi c n \hbar}{e}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (4.399)$$

Sostituendo questo nella formula (4.397) e ricordando che per l'elettrone  $q = -e$ , si ha che lo spostamento di fase sia dato da un multiplo di  $\pi$ , come è effettivamente osservato sperimentalmente. Si noti un fattore 2 determinante tra la carica della coppia di Cooper ( $q = 2e$ ) e quella dell'elettrone.

È da notare che questo esperimento rappresenta una doppia verifica, da un lato dell'effetto A-B (nelle campioni con lo sfasamento  $\pi$ ), dall'altro della quantizzazione di flusso magnetico.

**Superconduttore** Riportiamo qui gli aspetti principali della superconduttività nei metalli a temperature estremamente basse, in un campo magnetico esterno. Dovute alle interazioni attrattive dai scambi di fononi gli elettroni formano stati legati chiamate coppie di Cooper. alle temperature estremamente basse (al di sotto di una temperatura critica, che dipende dalla sostanza) le coppie di Cooper - bosoni - condensano e sono descritti <sup>3</sup> da una sorta di

<sup>3</sup>I bosoni identici debolmente accoppiati tendono a occupare lo stesso stato quantistico. A temperatura sotto quella critica, un numero macroscopico dei bosoni occupano gli stessi stati più bassi - condensazione di Bose-Einstein. Il sistema in un tale stato è descritto dalla distribuzione dei numeri di occupazione  $d(\mathbf{p})$  o dalla sua trasformata di Fourier,  $\Psi(\mathbf{r})$ .  $|\Psi(\mathbf{r})|^2$  rappresenta allora realmente la densità, non la densità di probabilità, delle particelle.

funzione d'onda macroscopica  $\Psi$ .  $\Psi$  soddisfa alle equazioni di Landau-Ginzburg (prendiamo la carica di elettrone,  $-e < 0$ ; quella di una coppia di Cooper  $q = -2e$ ;  $m$  è la massa dell'elettrone),

$$\frac{1}{4m}(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A})^2 \Psi + a\Psi + b|\Psi|^2 \Psi = 0; \quad (4.400)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}; \quad (4.401)$$

$$\mathbf{j} = \frac{1}{4m} \left[ \Psi^* (\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}) \Psi - \{ (\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}) \Psi \}^* \Psi \right], \quad (4.402)$$

dove  $a, b$  sono parametri che dipendono dalla materia e dalla temperatura.

Nello stato superconduttore, le coppie di Cooper condensano:

$$\Psi = \sqrt{\rho} e^{i\theta}, \quad \rho(\mathbf{r}) = \Psi^* \Psi \neq 0, \quad (4.403)$$

con  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ . La corrente è data da

$$\mathbf{j} = \frac{\rho}{2m} (\hbar \nabla \theta - \frac{q}{c}\mathbf{A}) : \quad (4.404)$$

L'equazione di continuità allora implica che  $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ , i.e.,

$$\nabla^2 \theta = 0, \quad (4.405)$$

dove è stata assunta la gauge  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ .

In una massa di superconduttore la (4.405) implica

$$\theta = \text{const.} \quad (4.406)$$

Segue la relazione

$$\mathbf{j} = -\frac{q\rho}{2mc}\mathbf{A}, \quad (4.407)$$

nota come equazione di London. Visto che la corrente *elettrica* delle coppie di Cooper è  $\mathbf{j}_{el} = q\mathbf{j} = -2e\mathbf{j}$ , l'equazione di Maxwell dà

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c}\mathbf{j}_{el} = \frac{2\pi\rho q^2}{mc^2}\mathbf{A} \equiv \lambda^{-2}\mathbf{A} \quad (4.408)$$

di cui la soluzione, assumendo che essa dipende solo da una delle componenti di  $\mathbf{r}$ , è

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 e^{-z/\lambda}, \quad \lambda = \left( \frac{2\pi\rho q^2}{mc^2} \right)^{-1/2}. \quad (4.409)$$

Nel gergo della fisica delle particelle, il fotone ha acquistato una massa effettiva tramite il meccanismo di Higgs! In un linguaggio più tradizionale, la (4.409) significa che il campo magnetico è fortemente dampato in una media superconduttore:  $\mathbf{B}$  può penetrare nel corpo di superconduttore soltanto per uno spessore  $\lambda$  chiamato lunghezza di penetrazione di London. Con dei parametri appropriati per il piombo, per es., (assumendo che ognuno degli atomi dia un elettrone di conduzione),  $\rho \sim 3 \cdot 10^{22} / \text{cm}^3$ , si ha

$$\lambda \sim \sqrt{\frac{1}{8\pi} \frac{mc^2}{e^2} \frac{1}{10^{22}}} \sim \sqrt{\frac{1}{25} \frac{1}{3 \cdot 10^{-13}} \frac{1}{10^{22}}} \sim O(10^{-5}) \text{ cm}. \quad (4.410)$$

Questo fenomeno, che il campo magnetico viene espulso dalla sostanza superconduttore è noto come *effetto Meissner*.

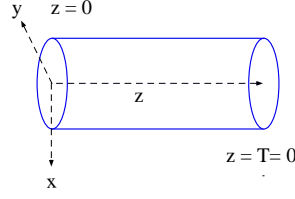


Figura 4.5: Coordinate del toro

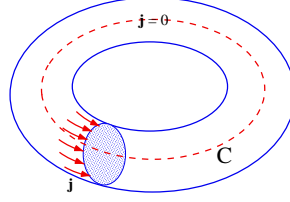


Figura 4.6:

#### Quantizzazione del flusso magnetico

Accade una cosa molto interessante nel caso che la materia superconduttrice ha una forma di un toro (topologicamente l'interno di  $T$ ). Riflettendo il fatto che  $\theta$  è una variabile angolare, la (4.405) ammette ora una soluzione non banale <sup>4</sup>,

$$\theta(x, y, z) = cz, \quad c = \frac{2\pi n}{T}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (4.411)$$

dove  $z$  è la coordinata lungo il cerchio del toro, con il periodo  $T$ . (Fig.4.5). In questo caso,  $\mathbf{j} \neq \mathbf{A}$ , ma vale ancora

$$\nabla^2 \mathbf{j} = -\frac{\rho q}{2mc} \nabla^2 \mathbf{A} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{j}. \quad (4.412)$$

La (4.411) e la (4.412) implicano che la corrente  $\mathbf{j}$  nella direzione di  $z$  circola soltanto sulla superficie del toro, *i.e.*, in uno strato di spessore dell'ordine di  $\lambda$ ; vice versa, all'interno del toro abbiamo  $\mathbf{j} = 0$ .

Quest'ultimo fatto significa che lungo il cerchio al centro del toro (la curva  $C$  della Fig.4.6)) vale

$$\hbar \nabla \theta = \frac{q}{c} \mathbf{A}, \quad (4.413)$$

per cui integrando questa equazione lungo  $C$  si ha (Eq.(4.411))

$$\frac{q}{c} \oint dx_i A_i = \hbar \int d\theta = 2\pi n \hbar. \quad (4.414)$$

D'altra parte,

$$\oint dx_i A_i = \int d\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{A} = \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \Phi : \quad (4.415)$$

$\oint dx_i A_i$  è uguale al flusso magnetico intrappolato dal toro. Segue perciò che il flusso magnetico che attraversa un toro di superconduttore è quantizzato:

$$\Phi = \frac{2\pi n c \hbar}{q}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (4.416)$$

<sup>4</sup>Dal punto di vista matematico, le soluzioni non banali (4.411) rappresentano elementi del gruppo fondamentale di  $S^1$ ,  $\Pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$ .

## 4.9 Disuguaglianze di Bell, Disuguaglianza di CHSH e Quantum Entanglement

### 4.9.1 Problema

L'aspetto probabilistico della meccanica quantistica, nonostante innumerevoli verifiche sperimentali, ci produce tuttora un certo senso di inquietudine. Il paradosso di Einstein-Podolsky-Rosen è stato infatti proposto per “dimostrare che la meccanica quantistica non poteva essere una teoria completa, ma che essa doveva essere completata da variabili addizionali, di modo che la natura probabilistica della predizione della Meccanica Quantistica fosse dovuta alla media statistica su queste variabili (dette *variabili nascoste*). Le ipotesi fondamentali del loro argomento sono la località e la causalità.

J.S. Bell ha formulato l'idea delle variabili nascoste matematicamente, ed ha dimostrato che, indipendentemente dalla natura delle variabili nascoste, tale teoria non può riprodurre completamente le predizioni della meccanica quantistica.

Le verifiche sperimentali successivamente escogitate hanno confermato l'esattezza delle predizioni della meccanica quantistica, escludendo così qualsiasi tipo di teorie con variabili nascoste.

L'esempio considerato da Bell (**Physics** 1 (1964) p.195) è quello di un sistema di due spin  $\frac{1}{2}$ , in uno stato di singoletto,  $S_{tot} = 0$ ,

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle], \quad (4.417)$$

dove  $s_z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle$ , etc. Supponiamo che le due particelle  $A, B$  siano i prodotti di decadimento di una particella parente con  $J = 0$  e che le particelle  $A, B$  viaggino in due direzioni opposte, di modo tale che la misura eseguita sulla particella  $A$  non può influenzare il risultato della misura fatta sulla particella  $B$  (o vice versa). Supponiamo inoltre che gli osservatori  $A$  e  $B$  misurino la componente di spin  $A$  o  $B$ , i.e.,  $(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_A)$ ,  $(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}_B)$ , dove  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  sono due versori arbitrari.

Prima consideriamo il caso particolare,  $\mathbf{a} = \mathbf{b}$ . La misura di  $(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_A)$ , dà o  $+1$  o  $-1$  come risultato. Supponiamo che la misura della quantità  $(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_B)$ , sia fatta immediatamente dopo quella di  $A$ . Nel caso  $(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_A) = 1$  il risultato di  $(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_B)$ , è predetto con certezza ad essere  $-1$ , e vice versa. Visto che la misura a  $A$  non può influenzare dinamicamente quella di  $B$  per ipotesi (la località e la causalità), sembrerebbe che tale predittività del risultato di singole misure contraddisca con il principio della meccanica quantistica, secondo il quale il risultato dovrebbe essere  $\pm 1$ , con *probabilità*  $\frac{1}{2}$  per ciascuno. L'unica via di uscita sembrerebbe che in realtà le cose siano “predeterminate: l'aspetto probabilistico della predizione della meccanica quantistica sarebbe dovuto alla mancanza della conoscenza - nel senso classico - del processo microscopico. Perciò la meccanica quantistica dovrebbe essere sostituito da una teoria più completa, con delle variabili addizionali, di modo che le predizioni probabilistiche della meccanica quantistica seguono come legge statistica su queste ultime.

Questa argomentazione in realtà non è corretta. Infatti, visto che i due eventi (le misure di  $A$  e di  $B$ ) non possono essere collegati causalmente, anche l'informazione che riguarda i risultati della misura di  $A$  risulta inutile (o meglio, inutilizzabile) per l'osservatore  $B$ . Infatti, non avendo accesso ai risultati di  $A$  (almeno non immediatamente prima della misura), l'osservatore  $B$  troverebbe semplicemente per la metà delle volte il risultato  $+1$  e per l'altra metà delle volte  $-1$ , in accordo con la predizione standard della meccanica quantistica. Inoltre, il concetto della successione cronologica dei due eventi non è un concetto relativisticamente invariante. Secondo la teoria della relatività speciale, si può realizzare una situazione di modo che sia  $A$  che  $B$  vede, nel loro rispettivo sistema di riferimento, la propria misura antecedente alla misura dell'altro osservatore. In questo caso l'impostazione del “paradosso stesso non avrebbe senso.

Resta tuttavia il fatto che, paragonando le registrazioni delle successive misure fatte a A con quelle fatte a B, si può *a posteriori* verificare la *correlazione* tra i risultati dei due esperimenti. Secondo la meccanica quantistica una successione di risultati ad A,  $(+ + - + - - \dots)$ , dovrebbe essere accompagnato dalla successione  $(- - + - + + \dots)$ , trovata a B: le due serie di risultati sono perfettamente correlate. Naturalmente questa predizione della meccanica quantistica è verificata sperimentalmente.

Dal punto di vista filosofico la situazione appare infatti un po' paradossale. Per l'osservatore B, la successione  $(- - + - + + \dots)$ , appare completamente casuale. Ogni misura dà il risultato 0 o  $-1$ , con probabilità  $\frac{1}{2}$  ciascuno, la funzione d'onda essendo la (4.417) prima della misura. Se si dovesse considerare il collasso della funzione d'onda <sup>5</sup> dovuta ad ogni misura a B, per es.

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] \Rightarrow |\downarrow\uparrow\rangle, \quad (4.418)$$

come processo fisico (che avviene attorno al punto B in un determinato momento), la predizione della meccanica quantistica implicherebbe che la misura fatta al punto B induce istantaneamente il collasso della funzione d'onda anche al punto A. Il che sarebbe una violazione grossolana della località delle interazioni e della causalità.

Nel caso in cui i due apparecchi à la Stern-Gerlach sono orientati in maniera generica, i risultati delle misure a B non saranno più univocamente determinati da quelli delle misure fatte a A. Per es., la successione di risultati ad A  $(+ + - + - - \dots)$  potrebbe essere accompagnata da  $(+ - + + - + \dots)$  con assenza apparente delle correlazioni tra le due. In questo caso, dunque, non ci sono contraddizioni?

Il fatto è che la meccanica quantistica dà una precisa predizione sulla media della correlazione tra le due serie di misure, per generico orientamento relativo di **a** e **b**. Se definiamo la correlazione spin-spin,

$$F(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \langle (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_A) (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}_B) \rangle = \overline{R(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_A) R(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}_B)}, \quad (4.419)$$

dove  $R(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_A) = \pm 1$  e  $R(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}_B) = \pm 1$  rappresentano i possibili risultati delle misure, la meccanica quantistica predice che ci sia una correlazione tra le due registrazioni,

$$\text{M.Q.:} \quad F(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \langle (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_A) (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}_B) \rangle = -(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) = -\cos \theta, \quad (4.420)$$

(*dimostratelo*) dove  $\theta$  è l'angolo tra **a** e **b**. **Il problema è perciò ben definito, indipendente da qualsiasi questione filosofica: è capace una teoria di tipo con le variabili nascoste, riprodurre esattamente il risultato della meccanica quantistica, Eq.(4.420)?**

#### 4.9.2 Dimostrazione

La dimostrazione che la risposta è negativa, è stata data da J.S. Bell (1960). Siano

$$A(\mathbf{a}, \lambda) = \pm 1, \quad B(\mathbf{b}, \lambda) = \pm 1 \quad (4.421)$$

la predizione per  $R(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}_A)$  e  $R(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}_B)$ , rispettivamente, di una teoria con variabili nascoste  $\{\lambda\}$ . Naturalmente teorie che predicono i risultati diversi da  $\pm 1$  possono essere esclusi, visto che tale è un fatto empirico.

La correlazione spin-spin è dato, in questa teoria da

$$\text{Teo. Var. Nasc:} \quad F(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \int d\lambda \mathcal{P}(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) B(\mathbf{b}, \lambda), \quad (4.422)$$

dove  $\mathcal{P}(\lambda)$  è la probabilità statistica per vari valori di  $\lambda$ , con <sup>6</sup>

$$\mathcal{P}(\lambda) \geq 0, \quad \forall \lambda, \quad \int d\lambda \mathcal{P}(\lambda) = 1. \quad (4.423)$$

<sup>5</sup>Erwin Schrödinger disse: "If we should go on with this damned wave function collapse, then I'm sorry that I ever got involved."

<sup>6</sup>Tutte le formule saranno scritte con una variabile  $\lambda$ , ma la generalizzazione ai casi con più variabili è immediata.

Inoltre, per garantire che questo modello riproduca il risultato della meccanica quantistica per il caso particolare,  $\mathbf{a} = \mathbf{b}$ , possiamo porre

$$B(\mathbf{a}, \lambda) = -A(\mathbf{a}, \lambda) \quad (4.424)$$

per cui

$$F(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = - \int d\lambda \mathcal{P}(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda). \quad (4.425)$$

Ora consideriamo

$$\begin{aligned} & F(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - F(\mathbf{a}, \mathbf{c}) \\ &= - \int d\lambda \mathcal{P}(\lambda) [A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda) - A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda)] \\ &= \int d\lambda \mathcal{P}(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) A(\mathbf{b}, \lambda) [A(\mathbf{b}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda) - 1], \end{aligned} \quad (4.426)$$

perciò

$$\begin{aligned} & |F(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - F(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \leq \int d\lambda \mathcal{P}(\lambda) (1 - A(\mathbf{b}, \lambda) A(\mathbf{c}, \lambda)) \\ &= 1 + F(\mathbf{b}, \mathbf{c}). \end{aligned} \quad (4.427)$$

Dunque in qualsiasi teoria con delle variabili nascoste, la correlazione spin-spin soddisfa la disuguaglianza,

$$|F(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - F(\mathbf{a}, \mathbf{c})| \leq 1 + F(\mathbf{b}, \mathbf{c}). \quad (4.428)$$

(*Disuguaglianza di Bell*). Si vede facilmente che la meccanica quantistica viola tale relazione. Se  $\mathbf{a}$  è in una generica direzione e  $\mathbf{b} \simeq \mathbf{c}$ , il primo membro della (4.428) sarà dell'ordine di  $O(|\mathbf{b} - \mathbf{c}|)$ : di conseguenza la funzione  $F(\mathbf{b}, \mathbf{c})$  non può essere al minimo stazionario e uguale a  $-1$ , poiché in questo caso il secondo membro sarebbe dell'ordine di  $O((\mathbf{b} - \mathbf{c})^2)$ . Visto che in meccanica quantistica, la funzione di correlazione spin-spin è  $F(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = -(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$  e ha il minimo stazionario ad  $\mathbf{a} = \mathbf{b}$ , concludiamo che nessuna teoria del tipo (4.425) può riprodurre le predizioni della meccanica quantistica per tutte le scelte di  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$ .

Bell ha dimostrato che è possibile costruire un modello di una teoria con variabili nascoste, se tal modello dovesse riprodurre il risultato della meccanica quantistica soltanto per particolari configurazioni di  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$ , per es.  $\mathbf{a} = \mathbf{b}$ ,  $\mathbf{a} = -\mathbf{b}$ , o  $\mathbf{a} \perp \mathbf{b}$ . È l'impossibilità che tale modello "imiti perfettamente le predizioni della meccanica quantistica per tutte le scelte di  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$ , che esclude teorie di questo genere come teorie fisiche.

La correlazione tra le due particelle che non possono interagire né nel presente né in futuro, ma che sono interaggite nel passato, come nell'esempio di due elettroni, è caratteristica tipica di tutti i sistemi quantistici. Questa correlazione, sperimentalmente osservata e perfettamente in accordo con la predizione della meccanica quantistica, ma che non può essere riprodotta da nessun tipo di teoria con variabili statistiche classiche addizionali, è nota come "Quantum Entanglement".

### 4.9.3 Coppie di fotoni correlati

Si può fare un'analisi molto analoga con una coppia di fotoni, invece di elettroni. Consideriamo un atomo in uno stato eccitato con  $J = 0$ , che decade con due successive transizioni a dipolo elettrico,

$$(J = 0) \rightarrow (J = 1) \rightarrow (J = 0), \quad (4.429)$$

processo chiamato cascata atomica SPS. Se i due fotoni sono osservati in direzioni opposte, essi avranno la stessa polarizzazione. Infatti, gli stati iniziali e finali dell'atomo sono

ambidue invarianti per rotazioni tridimensionali. Segue che anche lo stato di due fotoni deve essere invariante. Se indichiamo con

$$|x\rangle|x\rangle, \quad |x\rangle|y\rangle, \quad |y\rangle|x\rangle, \quad |y\rangle|y\rangle, \quad (4.430)$$

i quattro possibili stati di polarizzazioni lineari dei due fotoni, soltanto le due combinazioni lineari

$$\psi_+ = \frac{|x\rangle|x\rangle + |y\rangle|y\rangle}{\sqrt{2}}, \quad \psi_- = \frac{|x\rangle|y\rangle - |y\rangle|x\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (4.431)$$

sono invarianti per rotazioni attorno all'asse  $z$  (la direzione dell'impulso di uno dei fotoni). Visto che le interazioni elettromagnetiche sono invarianti per parità, si trova che la funzione d'onda corretta dei due fotoni in questo sistema è  $\psi_+ = \frac{|x\rangle|x\rangle + |y\rangle|y\rangle}{\sqrt{2}}$ .

La misura della polarizzazione e i possibili risultati per un fotone sono descritti dall'operatore

$$P_1 = |x\rangle\langle x| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (4.432)$$

che misura la polarizzazione lineare nella direzione  $x$ , con il risultato 1 o 0. (Vedi la (3.118)), o da

$$P_2 = |y\rangle\langle y| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.433)$$

che misura la polarizzazione lineare nella direzione  $y$ , o più in generale da

$$P_\theta = (|x\rangle\cos\theta + |y\rangle\sin\theta)(\langle x|\cos\theta + \langle y|\sin\theta) = \begin{pmatrix} \cos^2\theta & \cos\theta\sin\theta \\ \cos\theta\sin\theta & \sin^2\theta \end{pmatrix}. \quad (4.434)$$

che misura la polarizzazione lineare nella direzione  $(\cos\theta, \sin\theta, 0)$ . Gli autovalori di questi operatori sono 1 o 0. Introduciamo operatori associati

$$\Sigma_\theta \equiv 2P_\theta - 1, \quad \Sigma_{1,2} \equiv 2P_{1,2} - 1 \quad (4.435)$$

con autovalori  $\pm 1$ .

Se i due osservatori misurassero la stessa polarizzazione, per es.,  $\Sigma_1$ , le due registrazioni saranno perfettamente correlati, per es.,  $A : (+ + - - + \dots)$  e  $B : (+ + - - + \dots)$ . Lo stesso vale se i due polarizzatori sono messi nella stessa direzione  $(\cos\theta, \sin\theta, 0)$ . Se invece i due osservatori misurano la polarizzazione in due direzioni generiche  $A : (\cos\theta, \sin\theta, 0)$  e  $B : (\cos\theta', \sin\theta', 0)$ , allora la predizione della meccanica quantistica per la correlazione

$$F(\theta, \theta') = \overline{R(\Sigma_\theta)R(\Sigma_{\theta'})} \quad (4.436)$$

è

$$\langle \psi_+ | \Sigma_\theta \otimes \Sigma_{\theta'} | \psi_+ \rangle = \cos 2(\theta - \theta'). \quad (4.437)$$

L'argomento di Bell si applica esattamente (quasi) così com'è, alla correlazione  $F(\theta, \theta')$ :

$$F(\theta, \theta') = \int d\lambda \mathcal{P}(\lambda) A(\theta, \lambda) A(\theta', \lambda), \quad A(\theta, \lambda) = \pm 1. \quad (4.438)$$

Perciò in una teoria qualsiasi con le variabili nascoste, si avrà la disuguaglianza,

$$|F(\theta, \theta') - F(\theta, \theta'')| \leq 1 - F(\theta'', \theta'). \quad (4.439)$$

Tale disuguaglianza è violata dalla meccanica quantistica per generica scelta di  $\theta, \theta', \theta''$ .

*Esercizio* Dimostrare che la disuguaglianza di Bell (4.439) è violata dalla meccanica quantistica (4.437), per es. per  $\theta - \theta' = \theta' - \theta'' = \frac{\pi}{6}$ .

La disuguaglianza di Bell può essere generalizzata. Una combinazione delle funzioni di correlazione,

$$F(\theta_1, \theta_2) + F(\theta_3, \theta_2) + F(\theta_1, \theta_4) - F(\theta_3, \theta_4) \quad (4.440)$$

è data, secondo una teoria con variabili nascoste, dall'espressione

$$\int d\lambda \mathcal{P}(\lambda) [(A(\theta_1, \lambda) + A(\theta_3, \lambda))A(\theta_2, \lambda) + (A(\theta_1, \lambda) - A(\theta_3, \lambda))A(\theta_4, \lambda)]. \quad (4.441)$$

Ma l'espressione tra la parentesi quadrata di (4.441) è sempre  $\pm 2$ , poiché se  $A(\theta_1, \lambda) = A(\theta_3, \lambda)$  il primo termine è  $\pm 2$  mentre se  $A(\theta_1, \lambda) = -A(\theta_3, \lambda)$  il secondo termine è  $\pm 2$ . Segue perciò (disuguaglianza di CHSH)

$$|F(\theta_1, \theta_2) + F(\theta_3, \theta_2) + F(\theta_1, \theta_4) - F(\theta_3, \theta_4)| \leq 2. \quad (4.442)$$

È facile verificare che la meccanica quantistica viola tale disuguaglianza, in generale.