

nella direzione  $z$ . La hamiltoniana rilevante per questo tipo di problema è già stata data [vedi (3.2.16)]. Poichè  $H$  e  $S_z$  commutano, la matrice densità per questo insieme canonico è diagonale nella base  $S_z$ . Pertanto

$$\rho \doteq \frac{\begin{pmatrix} e^{-\beta\hbar\omega/2} & 0 \\ 0 & e^{\beta\hbar\omega/2} \end{pmatrix}}{Z}, \quad (3.4.56)$$

dove la funzione di partizione è

$$Z = e^{-\beta\hbar\omega/2} + e^{\beta\hbar\omega/2}. \quad (3.4.57)$$

Possiamo allora ottenere

$$[S_x] = [S_y] = 0, \quad [S_z] = -\left(\frac{\hbar}{2}\right) \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right). \quad (3.4.58)$$

La media di insieme della componente di momento magnetico è  $e/m_e c$  per  $[S_z]$ . La suscettibilità paramagnetica  $\chi$  si ottiene ponendo

$$\left(\frac{e}{m_e c}\right) [S_z] = \chi B. \quad (3.4.59)$$

In questo modo arriviamo alla formula di Brillouin per  $\chi$  :

$$\chi = \left(\frac{|e|\hbar}{2m_e c B}\right) \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right). \quad (3.4.60)$$

### 3.5. AUTOVALORI E AUTOSTATI DEL MOMENTO ANGOLARE

Fino ad ora abbiamo discusso esclusivamente sistemi di spin  $\frac{1}{2}$  con dimensionalità  $N = 2$ . In questo e nei seguenti paragrafi studiamo stati di momento angolare generico. A questo scopo ricaviamo dapprima gli autovalori e autostati di  $J^2$  e  $J_z$  e deriviamo le espressioni per gli elementi di matrice degli operatori di momento angolare, ottenute per la prima volta in un lavoro di M. Born, W. Heisenberg e P. Jordan.

### Relazioni di commutazione e operatori "a scala"

Tutto quello che faremo segue dalle relazioni di commutazione del momento angolare (3.1.20); ricordiamo che  $J_i$  è definito come il generatore della rotazione infinitesima. La prima proprietà importante che deriviamo dalle relazioni di commutazione fondamentali è l'esistenza di un nuovo operatore  $\mathbf{J}^2$ , definito da

$$\mathbf{J}^2 \equiv J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, \quad (3.5.1)$$

che commuta con ogni  $J_k$ :

$$[\mathbf{J}^2, J_k] = 0, \quad (k = 1, 2, 3). \quad (3.5.2)$$

Per provare questa relazione, prendiamo il caso  $k = 3$ :

$$\begin{aligned} [J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, J_z] &= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_y, J_z] + [J_y, J_z] J_y \\ &= J_x (-i\hbar J_y) + (-i\hbar J_y) J_x + J_y (i\hbar J_x) + (i\hbar J_x) J_y \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.5.3)$$

La prova per il caso  $k = 1$  e  $k = 2$  segue da una permutazione ciclica degli indici ( $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$ ). Poiché  $J_x, J_y$  e  $J_z$  non commutano fra di loro, possiamo sceglierne soltanto uno da diagonalizzare assieme a  $\mathbf{J}^2$ . Per convenzione scegliamo a questo scopo  $J_z$ .

Cerchiamo ora gli autoket simultanei di  $\mathbf{J}^2$  e  $J_z$ . Denotiamo gli autovalori di  $\mathbf{J}^2$  e  $J_z$  con  $a$  e  $b$  rispettivamente:

$$\mathbf{J}^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle \quad (3.5.4a)$$

$$J_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle. \quad (3.5.4b)$$

Per determinare i valori permessi per  $a$  e  $b$  è conveniente lavorare con operatori non hermitiani che chiameremo operatori "a scala"

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y, \quad (3.5.5)$$

piuttosto che con  $J_x$  e  $J_y$ . Valgono le relazioni di commutazione

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (3.5.6a)$$

e

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm} \quad (3.5.6b)$$

che possono facilmente ottenersi da (3.1.20). Si noti anche

$$[\mathbf{J}^2, J_{\pm}] = 0 \quad (3.5.7)$$

che è una ovvia conseguenza di (3.5.2).

Qual è il significato fisico di  $J_{\pm}$ ? Per dare una risposta, esaminiamo l'azione di  $J_z$  su  $J_{\pm} |a, b\rangle$ :

$$\begin{aligned} J_z (J_{\pm} |a, b\rangle) &= ([J_z, J_{\pm}] + J_{\pm} J_z) |a, b\rangle \\ &= (b \pm \hbar) (J_{\pm} |a, b\rangle) \end{aligned} \quad (3.5.8)$$

dove abbi  
di  $J_z$ , il ke  
(o diminu  
su (giù) n  
Facci  
commutaz  
in capitoli

inoltre ne

Vediamo  
ne fisica  
operatore  
l'autoval  
aumenta  
Ancl

dove abb  
 $J_z$  con a

dove la  
normaliz

Autova

Abbiamo  
mento a  
successiv  
un altro  
 $\mathbf{J}^2$  è inv  
che esist

dove abbiamo fatto uso di (3.5.6b). In altre parole, se applichiamo  $J_+(J_-)$  ad un autoket di  $J_z$ , il ket risultante è ancora un autoket di  $J_z$ , eccetto che l'autovalore è ora aumentato (o diminuito) di una unità  $\hbar$ . Così capiamo ora perché  $J_{\pm}$ , che ci fanno fare un gradino su (giù) nella "scala" degli autovalori di  $J_z$ , sono noti col nome di operatori a scala.

Facciamo ora una digressione per richiamare l'attenzione sul fatto che le relazioni di commutazione di (3.5.6b) ricordano le relazioni di commutazione che abbiamo incontrato in capitoli precedenti. Nella discussione dell'operatore di traslazione  $\mathcal{T}(l)$  avevamo

$$[x_i, \mathcal{T}(l)] = l_i \mathcal{T}(l); \quad (3.5.9)$$

inoltre nella trattazione dell'oscillatore armonico unidimensionale avevamo

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger, \quad [N, a] = -a. \quad (3.5.10)$$

Vediamo che sia (3.5.9), sia (3.5.10) hanno una struttura simile a (3.5.6b). L'interpretazione fisica dell'operatore di traslazione si basa sul fatto che esso cambia l'autovalore dell'operatore posizione  $x$  di  $l$ , in modo molto simile a come l'operatore "a scala"  $J_+$  cambia l'autovalore di  $J_z$  di una unità  $\hbar$ . Così anche l'operatore di creazione  $a^\dagger$  dell'oscillatore aumenta l'autovalore dell'operatore numero  $N$  di un'unità.

Anche se  $J_{\pm}$  cambia l'autovalore di  $J_z$  di un'unità  $\hbar$ , non cambia l'autovalore di  $J^2$ :

$$\begin{aligned} J^2(J_{\pm}|a, b\rangle) &= J_{\pm}J^2|a, b\rangle \\ &= a(J_{\pm}|a, b\rangle), \end{aligned} \quad (3.5.11)$$

dove abbiamo fatto uso di (3.5.7). In conclusione  $J_{\pm}|a, b\rangle$  sono autoket simultanei di  $J^2$  e  $J_z$  con autovalori  $a$  e  $b \pm \hbar$ . Possiamo scrivere

$$J_{\pm}|a, b\rangle = c_{\pm}|a, b \pm \hbar\rangle, \quad (3.5.12)$$

dove la costante di proporzionalità  $c_{\pm}$  sarà determinata più avanti dalla condizione di normalizzazione degli autoket del momento angolare.

### Autovalori di $J^2$ e $J_z$

Abbiamo ora approntato il formalismo necessario alla costruzione degli autoket del momento angolare e del corrispondente spettro di autovalori. Supponiamo di applicare  $J_+$  successivamente, diciamo  $n$  volte, ad un autoket simultaneo di  $J^2$  e  $J_z$ . Otteniamo allora un altro autoket di  $J^2$  e  $J_z$ , con l'autovalore di  $J_z$  aumentato di  $n\hbar$ , mentre l'autovalore di  $J^2$  è invariato. Questo processo, peraltro, non può continuare in modo indefinito. Si trova che esiste un limite superiore per  $b$  (l'autovalore di  $J_z$ ) dato  $a$  (l'autovalore di  $J^2$ ):

$$a \geq b^2 \quad (3.5.13)$$

Per provare questo asserto incominciamo a notare che

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 - J_z^2 &= \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) \\ &= \frac{1}{2}(J_+ J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+) \end{aligned} \quad (3.5.14)$$

Inoltre  $J_+ J_+^\dagger$  e  $J_+^\dagger J_+$  devono avere valori d'aspettazione non negativo per la coniugazione

$$J_+^\dagger |a, b\rangle \stackrel{\text{CD}}{\leftrightarrow} \langle a, b | J_+, \quad J_+ |a, b\rangle \stackrel{\text{CD}}{\leftrightarrow} \langle a, b | J_+^\dagger; \quad (3.5.15)$$

pertanto (3.5.13) segue da

$$\langle a, b | (\mathbf{J}^2 - J_z^2) |a, b\rangle \geq 0. \quad (3.5.16)$$

Deve perciò esistere un  $b_{\max}$  tale che

$$J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0. \quad (3.5.17)$$

In altre parole  $b$  non può essere aumentato oltre  $b_{\max}$ . Allora (3.5.17) implica anche

$$J_- J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0. \quad (3.5.18)$$

Ma

$$\begin{aligned} J_- J_+ &= J_x^2 + J_y^2 - i(J_y J_x - J_x J_y) \\ &= \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z. \end{aligned} \quad (3.5.19)$$

Così

$$(\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |a, b_{\max}\rangle = 0. \quad (3.5.20)$$

Poiché  $|a, b_{\max}\rangle$  non è un ket nullo, questa relazione è possibile solo se

$$a - b_{\max}^2 - b_{\max} \hbar = 0 \quad (3.5.21)$$

o

$$a = b_{\max} (b_{\max} + \hbar). \quad (3.5.22)$$

In maniera analoga argomentiamo da (3.5.13) che ci deve anche essere un  $b_{\min}$  tale che

$$J_- |a, b_{\min}\rangle = 0. \quad (3.5.23)$$

Riscrivendo  $J_+ J_-$  come

$$J_+ J_- = \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad (3.5.24)$$

in analogia con (3.5.19) concludiamo che

$$a = b_{\min} (b_{\min} - \hbar). \quad (3.5.25)$$

Dal confronto fra (3.5.22) e (3.5.25) concludiamo che

$$(3.5.14) \quad b_{\max} = -b_{\min}, \quad (3.5.26)$$

con  $b_{\max}$  positivo, e che i valori permessi di  $b$  sono

$$(3.5.15) \quad -b_{\max} \leq b \leq b_{\max}. \quad (3.5.27)$$

Chiaramente siamo in grado di generare  $|a, b_{\max}\rangle$  applicando  $J_+$  in successione un numero finito di volte ad  $|a, b_{\min}\rangle$ . Dobbiamo perciò avere

$$(3.5.16) \quad b_{\max} = b_{\min} + n\hbar \quad (3.5.28)$$

con  $n$  intero. Otteniamo di conseguenza

$$(3.5.17) \quad b_{\max} = \frac{n\hbar}{2}. \quad (3.5.29)$$

È più conveniente lavorare con  $j$  definito come  $b_{\max}/\hbar$  invece che con  $b_{\max}$ , così che

$$(3.5.18) \quad j = \frac{n}{2}. \quad (3.5.30)$$

Il valore massimo dell'autovalore di  $J_z$  è  $j\hbar$ , dove  $j$  è intero o semi-intero. L'equazione (3.5.22) implica che l'autovalore di  $J^2$  è dato da

$$(3.5.19) \quad a = \hbar^2 j(j+1). \quad (3.5.31)$$

Definiamo anche  $m$  tale che

$$(3.5.20) \quad b \equiv m\hbar. \quad (3.5.32)$$

Se  $j$  è intero, tutti i valori di  $m$  sono interi; se  $j$  è semi-intero, tutti gli  $m$  sono semi-interi. Dato  $j$ , i valori permessi di  $m$  sono

$$(3.5.21) \quad m = \underbrace{-j, -j+1, \dots, j-1, j}_{2j+1 \text{ stati}}. \quad (3.5.33)$$

Invece che  $|a, b\rangle$  è più conveniente denotare un autoket simultaneo di  $J^2$  e  $J_z$  con  $|j, m\rangle$ . Le equazioni agli autovalori fondamentali diventano

$$(3.5.22) \quad J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \quad (3.5.34a)$$

e

$$(3.5.24) \quad J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle, \quad (3.5.34b)$$

con  $j$  intero o semi-intero e  $m$  dato da (3.5.33). È importante richiamare l'attenzione, a questo punto, sul fatto che abbiamo solamente fatto uso delle relazioni di commutazione (3.1.20) per ottenere questi risultati. La quantizzazione del momento angolare che si

(3.5.25)

manifesta in (3.5.34) è una diretta conseguenza delle regole di commutazione del momento angolare, che a loro volta discendono dalle proprietà delle rotazioni e dalla definizione di  $J_k$  come il generatore delle rotazioni.

### Elementi di matrice degli Operatori di momento angolare

Cerchiamo di valutare gli elementi di matrice degli operatori di momento angolare. Assumendo che  $|j, m\rangle$  sia normalizzato, abbiamo ovviamente da (3.5.34)

$$\langle j', m' | \mathbf{J}^2 | j, m \rangle = j(j+1) \hbar^2 \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (3.5.35a)$$

e

$$\langle j', m' | J_z | j, m \rangle = m \hbar \delta_{j'j} \delta_{m'm} \quad (3.5.35b)$$

Per ottenere elementi di matrice di  $J_{\pm}$  consideriamo dapprima

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_+^\dagger J_+ | j, m \rangle &= \langle j, m | (\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z) | j, m \rangle \\ &= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m]. \end{aligned} \quad (3.5.36)$$

Ora  $J_+ |j, m\rangle$  deve essere lo stesso di  $|j, m+1\rangle$  (normalizzato), a meno di un fattore moltiplicativo [vedi (3.5.12)]. Pertanto

$$J_+ |j, m\rangle = c_{j,m}^+ |j, m+1\rangle. \quad (3.5.37)$$

Dal confronto con (3.5.36) si ottiene

$$\begin{aligned} |c_{j,m}^+|^2 &= \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] \\ &= \hbar^2 (j-m)(j+m+1). \end{aligned} \quad (3.5.38)$$

Abbiamo così determinato  $c_{j,m}^+$  a meno di una fase arbitraria. In genere si sceglie  $c_{j,m}^+$  reale positivo per convenzione. In questo caso

$$J_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \hbar |j, m+1\rangle. \quad (3.5.39)$$

In analogia si ha

$$J_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar |j, m-1\rangle. \quad (3.5.40)$$

Determiniamo finalmente gli elementi di matrice di  $J_{\pm}$

$$\langle j', m' | J_{\pm} | j, m \rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar \delta_{j'j} \delta_{m', m \pm 1}. \quad (3.5.41)$$

Rapprese

Dopo aver  
elementi d  
 $\hat{n}$  e  $\phi$ , pos

Questi ele  
che ha int  
Si noti ch  
di matrice  
conseguer  
 $j(j+1)\hbar$

che a sua  
In poche  
Spes  
la rappre  
significa  
dei ket ne  
scelta di

dov  
 $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}$  cc  
in sotto

Ovviamente questo metodo è piuttosto macchinoso per grandi  $j$ . Nel paragrafo (3.8) verrà presentato un metodo molto più facile per ottenere  $d_{mm'}^{(j)}(\beta)$  per ogni  $j$ .

### 3.6. MOMENTO ANGOLARE ORBITALE

Abbiamo introdotto il concetto di momento angolare definendolo come il generatore della rotazione infinitesima. C'è un altro modo di introdurre il momento angolare quando il momento angolare di spin è zero, o può essere comunque ignorato. Il momento angolare  $\mathbf{J}$  per una singola particella è in questo caso lo stesso del momento angolare orbitale, che è definito da

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}. \quad (3.6.1)$$

Nella presente sezione analizziamo la connessione fra questi due approcci.

#### Momento angolare orbitale come generatore di rotazioni

Notiamo subito che per l'operatore momento angolare orbitale definito da (3.6.1) valgono le relazioni di commutazione

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar L_k \quad (3.6.2)$$

a causa delle relazioni di commutazione fra le componenti di  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{p}$ . Questo si può facilmente dimostrare nel modo seguente:

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\ &= yp_x[p_z, z] + p_yx[z, p_z] \\ &= i\hbar(xp_y - yp_x) \\ &= i\hbar L_z \\ &\vdots \end{aligned} \quad (3.6.3)$$

Poi facciamo agire l'operatore

$$1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z = 1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)(xp_y - yp_x) \quad (3.6.4)$$

su un arbitrario autoket della posizione  $|x', y', z'\rangle$  per vedere se esso si può interpretare come l'operatore di rotazione infinitesima dell'angolo  $\delta\phi$  attorno all'asse  $z$ . Utilizzando il

fatto che l'imp

$$\left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)\right]$$

Questo è preci  
all'asse  $z$ . C  
rotazione.

Supponia  
da  $\langle x', y', z' | \alpha$   
d'onda per lo

È meglio pas

Allora da (3.

Poiché  $\langle r, \theta,$

che è un be  
essere otten  
coordinate,  
della rotazi

Consid  
(3.6.6) abbi

$\langle x$

Esprimendo

8) verrà fatto che l'impulso è il generatore della traslazione otteniamo [vedi (1.6.32)]

$$\begin{aligned} \left[ 1 - i \left( \frac{\delta\phi}{\hbar} \right) L_z \right] |x', y', z'\rangle &= \left[ 1 - i \left( \frac{p_y}{\hbar} \right) (\delta\phi x') + i \left( \frac{p_x}{\hbar} \right) (\delta\phi y') \right] |x', y', z'\rangle \\ &= |x' - y' \delta\phi, y' + x' \delta\phi, z'\rangle. \end{aligned} \quad (3.6.5)$$

Questo è precisamente quello che ci si aspetta se  $L_z$  genera la rotazione infinitesima attorno all'asse  $z$ . Così abbiamo dimostrato che se  $p$  genera la traslazione, allora  $L$  genera la rotazione.

Supponiamo che la funzione d'onda di uno stato di una particella priva di spin sia data da  $\langle x', y', z' | \alpha \rangle$ . Dopo aver fatto una rotazione infinitesima attorno all'asse  $z$ , la funzione d'onda per lo stato ruotato è

$$\langle x', y', z' | \left[ 1 - i \left( \frac{\delta\phi}{\hbar} \right) L_z \right] | \alpha \rangle = \langle x' + y' \delta\phi, y' - x' \delta\phi, z' | \alpha \rangle. \quad (3.6.6)$$

È meglio passare a coordinate polari

$$\langle x', y', z' | \alpha \rangle \rightarrow \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle. \quad (3.6.7)$$

Allora da (3.6.6) otteniamo

$$\begin{aligned} \langle r, \theta, \phi | \left[ 1 - i \left( \frac{\delta\phi}{\hbar} \right) L_z \right] | \alpha \rangle &= \langle r, \theta, \phi - \delta\phi | \alpha \rangle \\ &= \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle - \delta\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle. \end{aligned} \quad (3.6.8)$$

Poiché  $\langle r, \theta, \phi |$  è un arbitrario autoket della posizione possiamo identificare

$$\langle x' | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle x' | \alpha \rangle \quad (3.6.9)$$

che è un ben noto risultato della meccanica ondulatoria. Anche se questa relazione può essere ottenuta altrettanto facilmente a partire dall'impulso nella rappresentazione delle coordinate, la derivazione qui presentata mette in risalto il ruolo di  $L_z$  come generatore della rotazione.

Consideriamo ora una rotazione attorno all'asse  $x$  di un angolo  $\delta\phi_x$ . In analogia con (3.6.6) abbiamo

$$\langle x', y', z' | \left[ 1 - i \left( \frac{\delta\phi_x}{\hbar} \right) L_x \right] | \alpha \rangle = \langle x', y' + z' \delta\phi_x, z' - y' \delta\phi_x | \alpha \rangle. \quad (3.6.10)$$

Esprimendo  $x', y'$  e  $z'$  in coordinate polari possiamo dimostrare che

$$\langle x' | L_x | \alpha \rangle = -i\hbar \left( -\sin\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle x' | \alpha \rangle. \quad (3.6.11)$$



Similmente

$$\langle \mathbf{x}' | L_y | \alpha \rangle = -i\hbar \left( \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle. \quad (3.6.12)$$

Facendo uso di (3.6.11) e (3.6.12) per gli operatori a scala  $L_{\pm}$  definiti come in (3.5.5) otteniamo

$$\langle \mathbf{x}' | L_{\pm} | \alpha \rangle = -i\hbar e^{\pm i\phi} \left( \pm i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle. \quad (3.6.13)$$

È inoltre possibile valutare  $\langle \mathbf{x}' | L^2 | \alpha \rangle$  a partire dalle relazioni (3.6.9), (3.6.13), tenendo conto che

$$\mathbf{L}^2 = L_z^2 + \left( \frac{1}{2} \right) (L_+ L_- + L_- L_+). \quad (3.6.14)$$

Ne consegue:

$$\langle \mathbf{x}' | L^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle. \quad (3.6.15)$$

A meno del fattore  $1/r^2$ , riconosciamo lo stesso operatore differenziale della parte angolare del Laplaciano in coordinate sferiche.

È istruttivo stabilire indipendentemente la connessione fra l'operatore  $L^2$  e la parte angolare del Laplaciano, studiando direttamente l'operatore energia cinetica. Partiamo dall'identità operatoriale,

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} \quad (3.6.16)$$

dove  $\mathbf{x}^2$  rappresenta l'operatore  $\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}$ , come  $\mathbf{p}^2$  sta per  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$ . La dimostrazione non presenta difficoltà

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= \sum_{ijklmk} \epsilon_{ijk} x_i p_j \epsilon_{lmk} x_l p_m \\ &= \sum_{ijklmk} (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) x_i p_j x_l p_m \\ &= \sum_{ijklmk} [\delta_{il} \delta_{jm} x_i (x_l p_j - i\hbar \delta_{jl}) p_m - \delta_{im} \delta_{jl} x_i p_j (p_m x_l + i\hbar \delta_{lm})] \\ &= \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} - \sum_{ijklmk} \delta_{im} \delta_{jl} [x_i p_m (x_l p_j - i\hbar \delta_{jl}) + i\hbar \delta_{lm} x_i p_j] \\ &= \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}. \end{aligned} \quad (3.6.17)$$

Prima di calcolare l'elemento di matrice fra  $\langle \mathbf{x}' |$  e  $| \alpha \rangle$  notiamo che

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} | \alpha \rangle &= \mathbf{x}' \cdot (-i\hbar \nabla' \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle) \\ &= -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle. \end{aligned} \quad (3.6.18)$$

e similmente

così

$\langle \mathbf{x}'$

Arriviamo pe

$$\frac{1}{2m} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle$$

I primi due t  
l'ultimo terr  
accordo con

Armonich

Consideria  
che l'equaz  
possono sc:

dove il vet  
un numero  
di stato le  
3.10, quest  
rotazionale  
con  $L_z$  e  
 $L_z$ . Poich  
autovalori  
Poich  
siamo met

dove abbi  
l'ampiezz  
 $\theta$  e  $\phi$ .

e similmente

$$\begin{aligned}
 (3.6.12) \quad \langle \mathbf{x}' | (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 | \alpha \rangle &= -\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right) \\
 (3.5.5) \quad &= -\hbar^2 \left( r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right)
 \end{aligned}
 \tag{3.6.19}$$

3.6.13) così

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = r^2 \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle + \hbar^2 \left( r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + 2r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right).
 \tag{3.6.20}$$

arrivando

Arriviamo pertanto alla relazione per l'energia cinetica

$$\begin{aligned}
 (3.6.14) \quad \frac{1}{2m} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle &= - \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \\
 (3.6.15) \quad &= - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle \right).
 \end{aligned}
 \tag{3.6.21}$$

I primi due termini nell'ultima riga sono la parte radiale del Laplaciano applicato a  $\langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$  e l'ultimo termine è pertanto la parte angolare del Laplaciano applicato a  $\langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$  in completo accordo con (3.6.15).

parte  
biamo

### Armoniche sferiche

6.16)

Consideriamo una particella priva di spin, in un potenziale a simmetria sferica. È noto che l'equazione d'onda è separabile in coordinate sferiche e le autofunzioni dell'energia si possono scrivere come

$$\langle \mathbf{x}' | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)
 \tag{3.6.22}$$

3.17)

dove il vettore posizione  $\mathbf{x}'$  è specificato dalle coordinate sferiche  $r, \theta$  e  $\phi$  e  $n$  rappresenta un numero quantico diverso da  $l$  e  $m$ , per esempio il numero quantico radiale per problemi di stato legato o l'energia per onde sferiche libere. Come sarà chiarito nel paragrafo 3.10, questa struttura può essere considerata come una diretta conseguenza dell'invarianza rotazionale del problema. Quando la hamiltoniana è sfericamente simmetrica,  $H$  commuta con  $L_z$  e  $\mathbf{L}^2$ , e gli autoket dell'energia possono simultaneamente essere autoket di  $\mathbf{L}^2$  e  $L_z$ . Poiché  $L_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ) soddisfano le regole di commutazione del momento angolare gli autovalori di  $\mathbf{L}^2$  e  $L_z$  sono  $l(l+1)\hbar^2$  e  $m\hbar = [-l\hbar, (-l+1)\hbar, \dots, (l-1)\hbar, l\hbar]$ .

Poiché la dipendenza angolare è comune a tutti i problemi a simmetria sferica, possiamo metterla in evidenza e considerare

$$\langle \hat{\mathbf{n}} | l, m \rangle = Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\hat{\mathbf{n}})
 \tag{3.6.23}$$

18)

dove abbiamo introdotto un autoket direzionale  $|\hat{\mathbf{n}}\rangle$ . Da questo punto di vista  $Y_l^m(\theta, \phi)$  è l'ampiezza per uno stato caratterizzato da  $l, m$ , di trovarsi nella direzione  $\hat{\mathbf{n}}$  specificata da  $\theta$  e  $\phi$ .

Supponiamo di avere delle relazioni fra autoket del momento angolare orbitale, possiamo immediatamente scrivere le corrispondenti relazioni fra armoniche sferiche. Per esempio, si prenda l'equazione agli autovalori

$$L_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle. \quad (3.6.24)$$

Moltiplicando per  $\langle \hat{n} |$  a sinistra e facendo uso di (3.6.9) otteniamo

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \hat{n} |l, m\rangle = m\hbar \langle \hat{n} |l, m\rangle \quad (3.6.25)$$

ovvero

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi), \quad (3.6.26)$$

che implica che la dipendenza da  $\phi$  di  $Y_l^m(\theta, \phi)$  deve essere del tipo  $e^{im\phi}$ . Analogamente in corrispondenza a

$$L^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle \quad (3.6.27)$$

abbiamo [vedi (3.6.15)]

$$\left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + l(l+1) \right] Y_l^m = 0 \quad (3.6.28)$$

che è semplicemente l'equazione alle derivate parziali soddisfatta dalle  $Y_l^m$ . La relazione di ortogonalità

$$\langle l', m' |l, m\rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3.6.29)$$

ha come conseguenza

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_l^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (3.6.30)$$

dove abbiamo fatto uso della relazione di completezza per gli autoket della direzione,

$$\int d\Omega_{\hat{n}} |\hat{n}\rangle \langle \hat{n}| = 1. \quad (3.6.31)$$

Per ottenere esplicitamente le  $Y_l^m$  possiamo cominciare dal caso  $m = l$ . Abbiamo

$$L_+ |l, l\rangle = 0 \quad (3.6.32)$$

che a causa di (3.6.13) fornisce l'equazione

$$-i\hbar e^{i\phi} \left[ i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \langle \hat{n} |l, l\rangle = 0 \quad (3.6.33)$$

Ricordando c  
equazione all

dove la costa

A comin

$\langle \hat{n} |l, m-1\rangle$

in successio:  
in molti libri  
per  $m \geq 0$

$Y_l^m$

e  $Y_l^{-m}$  è de

Per qualsiasi  
un polinomi

Se ci l  
ragione per  
gli  $l$  semi-in  
acquisteret

per una rot  
nel paragr:

† Natura  
è inserito in  
ad ottenere  
[vedi (3.6.39

itale, pos-  
iche. Per

Ricordando che la dipendenza da  $\phi$  è del tipo  $e^{il\phi}$  possiamo facilmente verificare che questa equazione alle derivate parziali è soddisfatta da

$$(3.6.24) \quad \langle \hat{n}|l, l\rangle = Y_l^l(\theta, \phi) = c_l e^{il\phi} \sin^l \theta, \quad (3.6.34)$$

dove la costante di normalizzazione  $c_l$  è determinata da (3.6.30)†

$$(3.6.25) \quad c_l = \left[ \frac{(-1)^l}{2^l l!} \right] \sqrt{\frac{[(2l+1)(2l)!]}{4\pi}}. \quad (3.6.35)$$

A cominciare da (3.6.34) possiamo utilizzare

$$(3.6.26) \quad \langle \hat{n}|l, m-1\rangle = \frac{\langle \hat{n}|L_-|l, m\rangle}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)\hbar}} \quad (3.6.36)$$

logamente

$$(3.6.27) \quad = \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \hat{n}|l, m\rangle$$

in successione per ottenere tutte le  $Y_l^m$  con  $l$  fissato. Poiché questo argomento è trattato in molti libri elementari di meccanica quantistica, non daremo qui i dettagli. Il risultato è per  $m \geq 0$

$$(3.6.28) \quad Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l}, \quad (3.6.37)$$

relazione

$$(3.6.29) \quad e Y_l^{-m} \text{ è definita da } Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^*. \quad (3.6.38)$$

Per qualsiasi  $m$  positivo o negativo, la parte che dipende da  $\theta$  di  $Y_l^m(\theta, \phi)$  è  $[\sin \theta]^{|m|}$  per un polinomio in  $\cos \theta$  di grado  $l - |m|$ . Per  $m = 0$ , abbiamo

$$(3.6.30) \quad Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta). \quad (3.6.39)$$

zione,

(3.6.31) Se ci limitiamo alle regole di commutazione del momento angolare, non è ovvia la ragione per cui  $l$  non può essere semi-intero. Diversi argomenti si possono sollevare contro gli  $l$  semi-interi. Dapprima per  $l$  semi-intero, e perciò per  $m$  semi-intero, la funzione d'onda acquisterebbe un segno meno

bbiamo

$$(3.6.32) \quad e^{im(2\pi)} = -1, \quad (3.6.40)$$

per una rotazione di  $2\pi$ . Di conseguenza la funzione d'onda non sarebbe ad un solo valore; nel paragrafo 2.4 abbiamo già puntualizzato il fatto che la funzione d'onda deve essere ad

(3.6.33) † Naturalmente la condizione di normalizzazione (3.6.30) non determina la fase di  $c_l$ . Il fattore  $(-1)^l$  è inserito in modo tale che la applicazione in successione di  $L_-$  fino ad ottenere lo stato con  $m=0$  ci porta ad ottenere  $Y_l^0$  con lo stesso segno del polinomio  $P_l(\cos \theta)$  la cui fase è fissata dalla condizione  $P_l(1)=1$  [vedi (3.6.39)].

un solo valore, grazie alla richiesta che lo sviluppo di un ket di stato in termini degli autoket della posizione sia unica. Possiamo dimostrare che se  $\mathbf{L}$ , definito come  $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$ , è identificato col generatore della rotazione, allora la funzione d'onda deve acquistare un segno + per una rotazione di  $2\pi$ . Questo segue dal fatto che la funzione d'onda per uno stato ruotato di  $2\pi$  è la funzione d'onda originale con nessun cambiamento di segno (l'operatore di Rotazione è supposto agire sul bra)

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | \exp \left( \frac{-iL_z 2\pi}{\hbar} \right) | \alpha \rangle &= \langle x' \cos 2\pi + y' \sin 2\pi, y' \cos 2\pi - x' \sin 2\pi | \alpha \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle, \end{aligned} \quad (3.6.41)$$

dove abbiamo fatto uso della versione di (3.6.6) per un angolo finito. Supponiamo ora che esista una  $Y_l^m(\theta, \phi)$  con  $l$  semi-intero. Per chiarezza, prendiamo il caso più semplice  $l = m = \frac{1}{2}$ . Da (3.6.34) avremmo

$$Y_{1/2}^{1/2}(\theta, \phi) = c_{1/2} e^{i\phi/2} \sqrt{\sin \theta}. \quad (3.6.42)$$

Dalla (3.6.36) per  $L_-$ , seguirebbe

$$\begin{aligned} Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) &= e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) (c_{1/2} e^{i\phi/2} \sqrt{\sin \theta}) \\ &= -c_{1/2} e^{-i\phi/2} \cot \theta \sqrt{\sin \theta}. \end{aligned} \quad (3.6.43)$$

Questa espressione non è lecita perché è singolare in  $\theta = 0$  e  $\pi$ . Quel che è peggio, dall'equazione alle derivate parziali

$$\langle \hat{n} | L_- | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = -i\hbar e^{-i\phi} \left( -i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \hat{n} | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = 0 \quad (3.6.44)$$

otteniamo direttamente

$$Y_{1/2}^{-1/2} = c'_{1/2} e^{-i\phi/2} \sqrt{\sin \theta}. \quad (3.6.45)$$

in contrasto stridente con (3.6.43). In aggiunta, sappiamo dalla teoria delle equazioni differenziali (problema di Sturm-Liouville) che le soluzioni di (3.6.28) con  $l$  intero formano un set completo. Una funzione arbitraria di  $\theta$  e  $\phi$  può essere sviluppata in termini di  $Y_l^m$  con  $l$  e  $m$  interi. Per tutte queste ragioni è futile contemplare l'esistenza di momenti angolari orbitali con  $l$  semi-intero.

Armonic

Concludia  
punto di  
facilmente  
una gener  
della dire:Possiamo  
Ruotiamc  
phi; vedi F

Scrivendc

constatia  
Però, qu  
sommatoOra  $\langle l, m$   
minato.  
fatto che

Ritorna

o