

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Corso di Laurea in Fisica

IL GRUPPO DELLE ROTAZIONI IN FISICA QUANTISTICA

Relatore:
Prof. Roberto Zucchini

Presentata da:
Danica Sugic

Sessione II
Anno Accademico 2013/2014

Sommario

Lo scopo del presente lavoro é quello di analizzare il ben noto concetto di rotazione attraverso un formalismo matematico.

Nella prima parte dell'elaborato si é fatto uso di alcune nozioni di teoria dei gruppi nella quale si definisce il gruppo ortogonale speciale in n dimensioni. Vengono studiati nel dettaglio i casi di rotazione in 2 e 3 dimensioni introducendo le parametrizzazioni piú utilizzate. Nella seconda parte si introduce l'operatore di rotazione, il quale puó essere applicato ad un sistema fisico di tipo quantistico. Vengono infine studiate le proprietá di simmetria di rotazione, definendone le caratteristiche e analizzando il caso particolare del potenziale centrale.

Indice

Introduzione e Conclusioni	1
1 I gruppi	3
1.1 Il gruppo Ortogonale Speciale	3
1.2 Il gruppo $SO(2)$	5
1.3 Il gruppo $SO(3)$	6
1.3.1 La parametrizzazione asse angolo	6
1.3.2 Angoli di Eulero	10
1.4 L'Algebra di Lie	11
1.4.1 Rotazioni infinitesime	11
1.4.2 Corrispondenza fra Algebra e Gruppo di Lie	12
2 Le rotazioni in meccanica quantistica	17
2.1 L'operatore di rotazione	17
2.1.1 Rotazioni infinitesime e Momento angolare	19
2.1.2 Momento angolare totale	20
3 Le simmetrie	23
3.1 Le leggi di conservazione	25
3.2 La simmetria di rotazione	26
3.3 Degenerazione dei livelli di energia	26
3.3.1 Azione dell'operatore di rotazione sugli autoket $ n, j, m\rangle$	27
3.4 Elementi della matrice associata dell'operatore di rotazione	28
3.4.1 Proprietá delle matrici $D^{(j)}(R)$	32
3.5 Potenziali a simmetria sferica	33
Bibliografia	37

Introduzione e Conclusioni

Tutti sanno cosa siano le rotazioni. É abbastanza facile identificarle. Quali siano le leggi matematiche che le governano rimane però mistero per tanti. Lo scopo di questa trattazione é, appunto, analizzare tale argomento, il quale permette di descrivere sistemi fisici di fondamentale importanza. Gli strumenti matematici utilizzati si trovano principalmente nella teoria dei gruppi. Essa é considerata dai fisici una teoria che svolge un ruolo fondamentale nella scoperta delle proprietá simmetriche dei sistemi fisici.

Nel primo capitolo vengono definite le caratteristiche del gruppo delle rotazioni (detto anche gruppo ortogonale speciale), nel quale si utilizza un formalismo matriciale. Dopo di che si studiano le proprietá delle rotazioni nel piano e nello spazio tridimensionale. Si introducono le due parametrizzazioni piú utilizzate: la parametrizzazione asse angolo e la parametrizzazione per angoli di Eulero. Di seguito si analizzano rotazioni di angoli infinitesimi. Studiando le trasformazioni infinitesime generate dal gruppo si ottiene l'algebra di Lie del gruppo. Nel secondo capitolo si introducono concetti di meccanica quantistica e si applicano le rotazioni a stati fisici di tipo quantistico. A tale scopo si introduce l'operatore di rotazione e si studia la sua azione sulle funzioni d'onda. Si ricava, inoltre, che in meccanica quantistica a generare le rotazioni é l'operatore momento angolare. Nel terzo ed ultimo capitolo vengono analizzate le simmetrie dal punto di vista della meccanica quantistica. Esse sono molto importanti in quanto descrivono il comportamento di molti sistemi fisici. Conoscendo le proprietá di simmetria di un sistema si é in grado di predirne molte caratteristiche senza la necessitá di fare esperimenti o calcoli complicati. Le simmetrie si ritrovano anche nel modo di disporsi degli atomi nella materia: in figura 1 si puó osservare, a titolo di esempio, la fotografia scattata da W.A. Bentley che rappresenta dei fiocchi di neve con evidenti proprietá di simmetria. Nel seguente elaborato si studiano in particolar modo le simmetrie di rotazione. Si studiano i sistemi la cui hamiltoniana é invariante per trasformazioni di rotazione. Viene introdotta una nuova rappresentazione per l'operatore di rotazione la quale corrisponde a una matrice e se ne calcolano gli elementi. Infine vengono analizzati i sistemi che presentano potenziali a simmetria sferica.

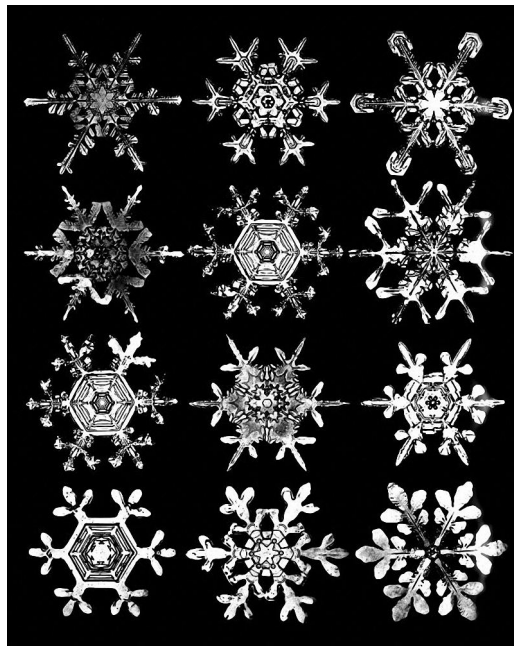


Figura 1: La fotografia é stata scattata da W.A. Bentley. Essa rappresenta dei fiocchi di neve con evidenti proprietá di simmetria.

Capitolo 1

I gruppi

Per i matematici il concetto di gruppo ha un significato ben preciso: é un insieme di elementi che verifica quattro assiomi. A partire da essi é stata costruita un'elaborata e affascinante teoria, la quale non dipende dalla natura degli elementi del gruppo. Essa si é rivelata utilissima nel campo della fisica, nel quale gli elementi del gruppo corrispondono solitamente a trasformazioni. Il concetto di gruppo é di fondamentale importanza nello studio delle simmetrie dei sistemi fisici, le quali, come é noto, sono alla base della fisica.

1.1 Il gruppo Ortogonale Speciale

Definizione 1.1.1. Un *gruppo* (G, \bullet) é un insieme G in cui é definita un'operazione binaria \bullet detta legge di composizione

$$\bullet : (a, b) \longrightarrow a \bullet b \quad t.c.$$

- i) ad ogni coppia di elementi $a, b \in G$ associa un elemento $a \bullet b \in G$;
- ii) vale la legge associativa: $\forall a, b, c \in G$,

$$(a \bullet b) \bullet c = a \bullet (b \bullet c);$$

- iii) esiste un elemento neutro $u \in G$ tale che: $\forall a \in G$,

$$a \bullet u = u \bullet a = a;$$

- iv) ogni elemento $a \in G$ ammette l'elemento inverso a^{-1} tale che:

$$a \bullet a^{-1} = u = a^{-1} \bullet a.$$

Definizione 1.1.2. Un sottoinsieme H di un gruppo G é detto *sottogruppo* se verifica le seguenti proprietá:

- i) chiusura: se $a, b, \in H$, allora $(a \bullet b) \in H$;
- ii) l'identità appartiene ad H : $I \in H$;
- iii) l'elemento inverso di ogni elemento di H appartiene ad H : $\forall a \in H, a^{-1} \in H$.

Definizione 1.1.3. Un gruppo (G, \bullet) si definisce *abeliano* (o *commutativo*) se la sua operazione binaria \bullet gode della proprietà commutativa:

$$a \bullet b = b \bullet a, \quad \forall a, b \in G.$$

É noto che l'insieme delle matrici $n \times n$ reali, indicato con $M_n(\mathbb{R})$, é uno spazio vettoriale reale di dimensione n^2 sul quale é definito il cosiddetto *prodotto righe per colonne* nel seguente modo: se $A, B \in M_n(\mathbb{R})$ con elementi A_{ij}, B_{ij} , la matrice prodotto $C = AB$ é ancora appartenente a M_n e i suoi elementi sono:

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} B_{kj}. \quad (1.1)$$

Si tenga presente che una matrice $A \in M_n(\mathbb{R})$ é *invertibile* se e solo se $\det A \neq 0$ e, in questo caso, esiste una matrice A^{-1} tale che

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I. \quad (1.2)$$

Valgono, inoltre, le seguenti proprietà per il determinante:

$$\det(AB) = \det A \det B, \quad \det A^{-1} = (\det A)^{-1}. \quad (1.3)$$

Si dimostra che l'insieme delle matrici non singolari $n \times n \in M_n(\mathbb{R})$ (cioé le matrici quadrate M ad elementi reali tali che $\det M \neq 0$) con il prodotto righe per colonne costituisce un gruppo. Tale prodotto é infatti associativo; il prodotto di matrici di determinante non nullo é ancora una matrice di determinante non nullo; inoltre l'identità ha determinante 1 ed ogni matrice non singolare si inverte con una matrice ancora non singolare. Da ciò seguono le definizioni seguenti:

Definizione 1.1.4. Il *gruppo generale lineare reale*, denotato con $GL(n, \mathbb{R})$ é l'insieme delle matrici invertibili $\in M_n(\mathbb{R})$ con il prodotto righe per colonne.

Il *gruppo speciale lineare reale*, denotato con $SL(n, \mathbb{R})$ é il sottogruppo delle matrici $A \in GL(n, \mathbb{R})$ tali che $\det A = 1$.

Definizione 1.1.5. Il *gruppo ortogonale* $O(n)$ é il sottogruppo delle matrici di $GL(n, \mathbb{R})$ che conservano il prodotto scalare:

$$O(n) = \{A \in GL(n, \mathbb{R}) \mid A\mathbf{x} \cdot A\mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n\}.$$

La definizione equivale alla seguente:

$$O(n) = \{A \in GL(n, \mathbb{R}) \mid A^T A = I\}.$$

Infatti $A\mathbf{x} \cdot A\mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \Rightarrow \mathbf{x} \cdot A^T A \mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \Rightarrow A^T A = I$ e viceversa.

Dalla relazione $A^T A = I$ segue che se $A \in O(n)$, $\det A = \pm 1$.

Definizione 1.1.6. Il gruppo ortogonale speciale $SO(n)$ - é dato da

$$SO(n) = O(n) \cap SL(n, \mathbb{R}).$$

Per dimostrare che $O(n)$ e $SO(n)$ sono gruppi e che $SO(n) \leq O(n)$ é sufficiente notare che il prodotto di matrici reali é reale; la matrice identità é reale; si ha $\forall A, B \in O(n)$, $(AB)^T = B^T A^T = B^{-1} A^{-1} = (AB)^{-1}$, cioè $AB \in O(n)$ e quindi l'insieme é chiuso rispetto al prodotto. Non solo, ma se, in particolare, $A, B \in SO(n)$, allora si ha anche $\det(AB^{-1}) = \det A \det B^{-1} = \det A / \det B = 1 \Rightarrow AB^{-1} \in SO(n)$, cioè $SO(n) \leq O(n)$.

1.2 Il gruppo $SO(2)$

Si consideri il gruppo $SO(2)$ per il quale $n = 2$. Esso rappresenta il gruppo delle rotazioni nel piano Euclideo \mathbb{R}^2 . In due dimensioni le rotazioni sono denotate con $R(\varphi)$ in quanto sono definite da un unico parametro: l'angolo di rotazione il quale assume valori $\varphi \in \mathbb{R}$. Geometricamente parlando, esse conservano la lunghezza dei vettori e gli angoli compresi tra essi.

L'azione delle rotazioni $R(\varphi)$ é rappresentata da matrici 2×2 applicate a vettori di dimensione 2. Si noti che

$$R = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \in SO(2)$$

se e solo se

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^T, \quad ac - ad = 1 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix} \Leftrightarrow c = -b; \quad d = a.$$

Dunque

$$R = \begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix}, \quad a^2 + b^2 = 1.$$

Imponendo $a = \cos \varphi$, $b = -\sin \varphi$, si ottiene la seguente espressione valida per tutte le matrici che definiscono le rotazioni nel piano:

$$R(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}, \quad \varphi \in \mathbb{R}. \quad (1.4)$$

Il gruppo $SO(2)$ é un gruppo abeliano, infatti é facile dimostrare che:

$$R(\varphi)R(\theta) = R(\theta)R(\varphi). \quad (1.5)$$

1.3 Il gruppo $SO(3)$

Si consideri, ora, il gruppo $SO(3)$ per il quale $n = 3$. Esso rappresenta il gruppo delle rotazioni nello spazio Euclideo \mathbb{R}^3 .

Si possono distinguere le *rotazioni proprie* $R_{pr} \in SO(3)$ per le quali $\det R_{pr} = +1$; dalle *rotazioni improprie* $R_{im} \notin SO(3)$ per le quali $\det R_{im} = -1$.

Valgono la seguenti relazioni:

$$R_{pr}\mathbf{x} \cdot (R_{pr}\mathbf{y} \times R_{pr}\mathbf{z}) = +\mathbf{x} \cdot (\mathbf{y} \cdot \mathbf{z}), \quad R_{im}\mathbf{x} \cdot (R_{im}\mathbf{y} \times R_{im}\mathbf{z}) = -\mathbf{x} \cdot (\mathbf{y} \cdot \mathbf{z}).$$

Nel caso generale si ha che $\forall R \in O(3)$:

$$R\mathbf{x} \cdot (R\mathbf{y} \times R\mathbf{z}) = (\det R)(\mathbf{x} \cdot (\mathbf{y} \cdot \mathbf{z})).$$

Gli elementi del gruppo $SO(3)$ sono descritti da tre parametri, esistono infiniti modi di scegliere questi ultimi. Verranno menzionate di seguito le parametrizzazioni piú utilizzate.

1.3.1 La parametrizzazione asse angolo

Ogni rotazione $R \in SO(3)$ puó essere parametrizzata attraverso due valori: un versore $\hat{\mathbf{n}}$, la cui direzione é quella dell'asse di rotazione, e un angolo φ , che indica l'ampiezza della rotazione attorno a tale asse. La rotazione viene comunemente indicata con $R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi)$.

Il seguente teorema assicura la validitá della parametrizzazione:

Teorema 1.3.1. *Ogni matrice $A \in SO(3)$, é una rotazione di un angolo φ attorno a un asse di direzione $\hat{\mathbf{n}}$.*

Dimostrazione. Poiché ogni matrice $A \in SO(3)$ ha (almeno) un autovalore uguale a +1, allora esiste un autovettore \mathbf{n} tale che $A\mathbf{n} = \mathbf{n}$. La retta individuata da \mathbf{n} é invariante rispetto alla rotazione. Si consideri il piano π ortogonale a tale retta: $\pi = \{\mathbf{r} \mid \mathbf{n} \cdot \mathbf{r} = 0\}$. Poiché la matrice A é ortogonale, si ha che $A(\pi) = \pi$. Si consideri la base $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2$ ortogonale su π , A puó essere scritta relativamente alla terna $\mathbf{n}, \hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2$ come:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & a_2 \\ 0 & a_3 & a_4 \end{bmatrix}.$$

Inoltre, la matrice

$$A' = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \in SO(2).$$

Ció dimostra che A é una rotazione attorno alla direzione individuata da \mathbf{n} . □

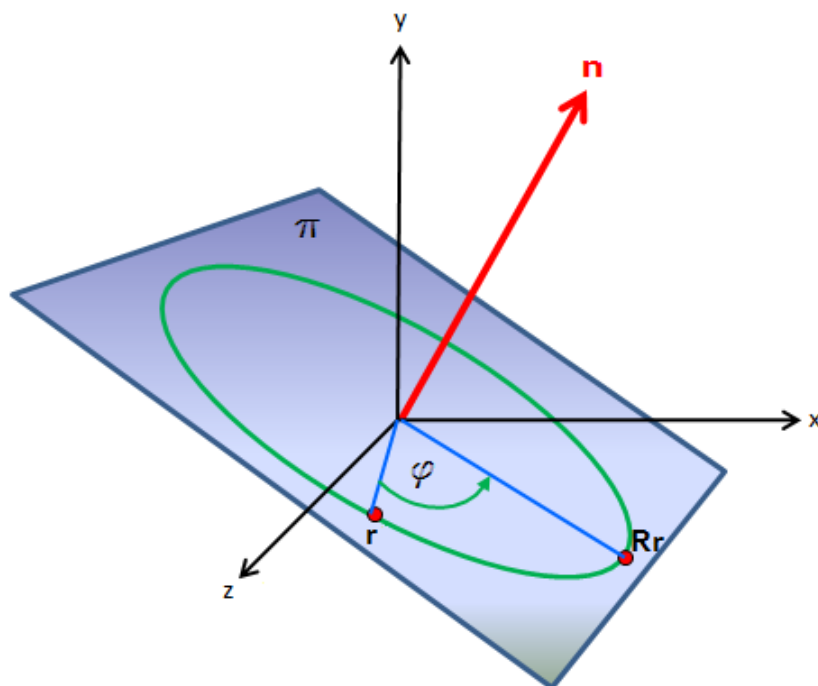


Figura 1.1: In figura si riporta uno schema della rotazione $R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi)$. Sono messi in evidenza l'asse di rotazione \mathbf{n} , l'angolo di rotazione φ , il piano in cui giace la rotazione π .

Osservazione 1. I tre parametri che descrivono la rotazione potrebbero essere scelti come le componenti di un vettore $\boldsymbol{\varphi}$ avente modulo φ e direzione $\hat{\mathbf{n}}$:

$$\boldsymbol{\varphi} = \varphi \hat{\mathbf{n}}.$$

Osservazione 2. Le coppie $(\hat{\mathbf{n}}, \varphi)$ e $(-\hat{\mathbf{n}}, -\varphi)$ rappresentano la medesima rotazione. Si può dunque considerare $\varphi \in [0, \pi]$.

Ogni rotazione $R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi)$ può essere espressa nel seguente modo:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi) = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \cos \varphi (I_3 - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) - \sin \varphi * \mathbf{n}. \quad (1.6)$$

Nella formula compaiono le matrici così definite:

$$\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} = \begin{bmatrix} n_1 n_1 & n_1 n_2 & n_1 n_3 \\ n_2 n_1 & n_2 n_2 & n_2 n_3 \\ n_3 n_1 & n_3 n_2 & n_3 n_3 \end{bmatrix}; \quad * \mathbf{n} = \begin{bmatrix} 0 & n_3 & -n_2 \\ -n_3 & 0 & n_1 \\ n_2 & -n_1 & 0 \end{bmatrix};$$

le quali, applicate al vettore \mathbf{r} , danno i seguenti risultati:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{r} &= \begin{bmatrix} n_1 n_1 & n_1 n_2 & n_1 n_3 \\ n_2 n_1 & n_2 n_2 & n_2 n_3 \\ n_3 n_1 & n_3 n_2 & n_3 n_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{n}; \\
(*\mathbf{n}) \cdot \mathbf{r} &= \begin{bmatrix} 0 & n_3 & -n_2 \\ -n_3 & 0 & n_1 \\ n_2 & -n_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = -\mathbf{n} \times \mathbf{r}.
\end{aligned}$$

Di conseguenza applicando la matrice R al vettore \mathbf{r} si ottiene:

$$R\mathbf{r} = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})\mathbf{n} + \cos \varphi(\mathbf{r} - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})\mathbf{n}) + \sin \varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r}. \quad (1.7)$$

Il gruppo $SO(3)$ non é abeliano, infatti

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi)R_{\hat{\mathbf{n}}'}(\varphi') \neq R_{\hat{\mathbf{n}}'}(\varphi')R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi).$$

Nonostante questo, esiste una relazione di fondamentale importanza che lega la matrice di rotazione di $R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi)$ con quella di una rotazione effettuata lungo un altro asse $\hat{\mathbf{n}}' = R\hat{\mathbf{n}}$ e stesso angolo φ , ove R é una rotazione arbitraria. La relazione é la seguente:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}'}(\varphi) = RR_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi)R^{-1}. \quad (1.8)$$

Rotazioni improprie

Una formula analoga alla 1.6 puó essere ricavata per le rotazioni improprie. Si consideri la matrice *paritá* P :

$$P = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

tale che $P\mathbf{r} = -\mathbf{r}$; essa genera una rotazione impropria in quanto $\det P = -1$.

Teorema 1.3.2. *Ogni rotazione impropria R_{im} é il prodotto di P e una rotazione propria R_{pr} :*

$$R_{im} = PR_{pr}.$$

Dimostrazione. Si definisca R' come $R' = PR_{im}$. Si ha $\det R' = \det P \det R_{im} = (-1)^2 = 1$, allora R' é una matrice associata a una rotazione propria. Si ha inoltre $R = P^2R = P(PR) = PR'$, in quanto $P^2 = I$. \square

Applicando il teorema 1.3.2 ad una rotazione impropria $R_{im}(\varphi, \hat{\mathbf{n}})$ e facendo uso della relazione 1.6 si ricava la seguente espressione valida per le rotazioni improprie:

$$R_{im} = -[\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \cos \varphi(I_3 - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) - \sin \varphi *\mathbf{n}]. \quad (1.9)$$

Rotazioni attorno agli assi x, y, z

Si vogliono trovare le matrici corrispondenti alle rotazioni attorno agli assi principali x, y, z .

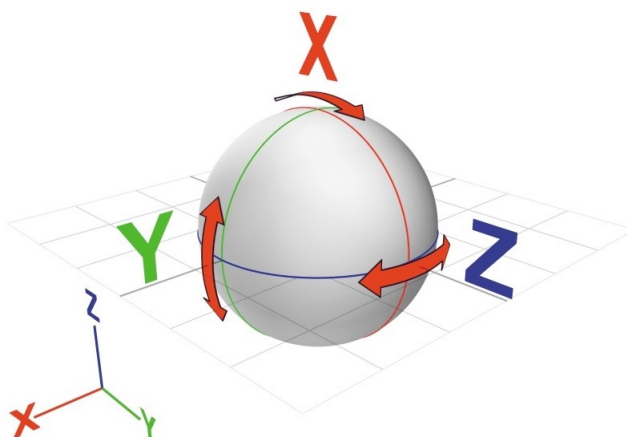


Figura 1.2: In figura si riporta un'idea intuitiva di rotazioni effettuate lungo gli assi x, y, z nello spazio tridimensionale.

Si consideri la rotazione del vettore \mathbf{r} effettuata attorno all'asse x , il cui versore é $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{e}}_1 = \hat{\mathbf{i}}$, attraverso la formula (1.6) si ricava la seguente:

$$R_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}. \quad (1.10)$$

Analogamente, nel caso di rotazione attorno all'asse y , con versore $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{e}}_2 = \hat{\mathbf{j}}$, risulta:

$$R_2 = \begin{bmatrix} \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{bmatrix}. \quad (1.11)$$

Nell'ultimo caso di rotazione attorno all'asse z , con versore $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{e}}_3 = \hat{\mathbf{k}}$, si trova:

$$R_3 = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (1.12)$$

1.3.2 Angoli di Eulero

Si consideri un sistema di riferimento cartesiano fisso $(1, 2, 3)$ e uno ruotato $(1', 2', 3')$ aventi origine comune. È possibile passare dall'uno all'altro mediante l'applicazione di tre successive matrici di rotazione. Gli *angoli di Eulero* (α, β, γ) individuano l'orientamento di $(1', 2', 3')$ rispetto a $(1, 2, 3)$ con $0 \leq \alpha, \gamma \leq 2\pi$ e $0 \leq \beta \leq \pi$. Viene definita, inoltre, una *linea dei nodi* corrispondente alla retta di intersezione dei piani $(1, 2)$ e $(1', 2')$ la cui direzione è quella del versore $\widehat{\mathbf{N}}$. È possibile descrivere ogni rotazione in termini di angoli di Eulero:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{3'}(\gamma)R_{\widehat{\mathbf{N}}}(\beta)R_3(\alpha) \quad (1.13)$$

È conveniente esprimere $R(\alpha, \beta, \gamma)$ in termini di rotazioni intorno agli assi fissi. Utilizzando l'equazione 1.8 si possono scrivere le relazioni:

$$\begin{aligned} R_{3'}(\gamma) &= R_{\widehat{\mathbf{N}}}(\beta)R_3(\gamma)R_{\widehat{\mathbf{N}}}^{-1}(\beta); \\ R_{\widehat{\mathbf{N}}}(\beta) &= R_3(\alpha)R_2(\beta)R_3^{-1}(\alpha); \end{aligned}$$

che, inserite nella 1.13, conducono alla seguente espressione:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_3(\alpha)R_2(\beta)R_3(\gamma). \quad (1.14)$$

Ogni rotazione, perciò, può essere decomposta nel prodotto di rotazioni attorno agli assi fissi $\widehat{\mathbf{e}}_2$ ed $\widehat{\mathbf{e}}_3$. Tale caratteristica evidenzia il vantaggio di esprimere le rotazioni in termini di angoli di Eulero.

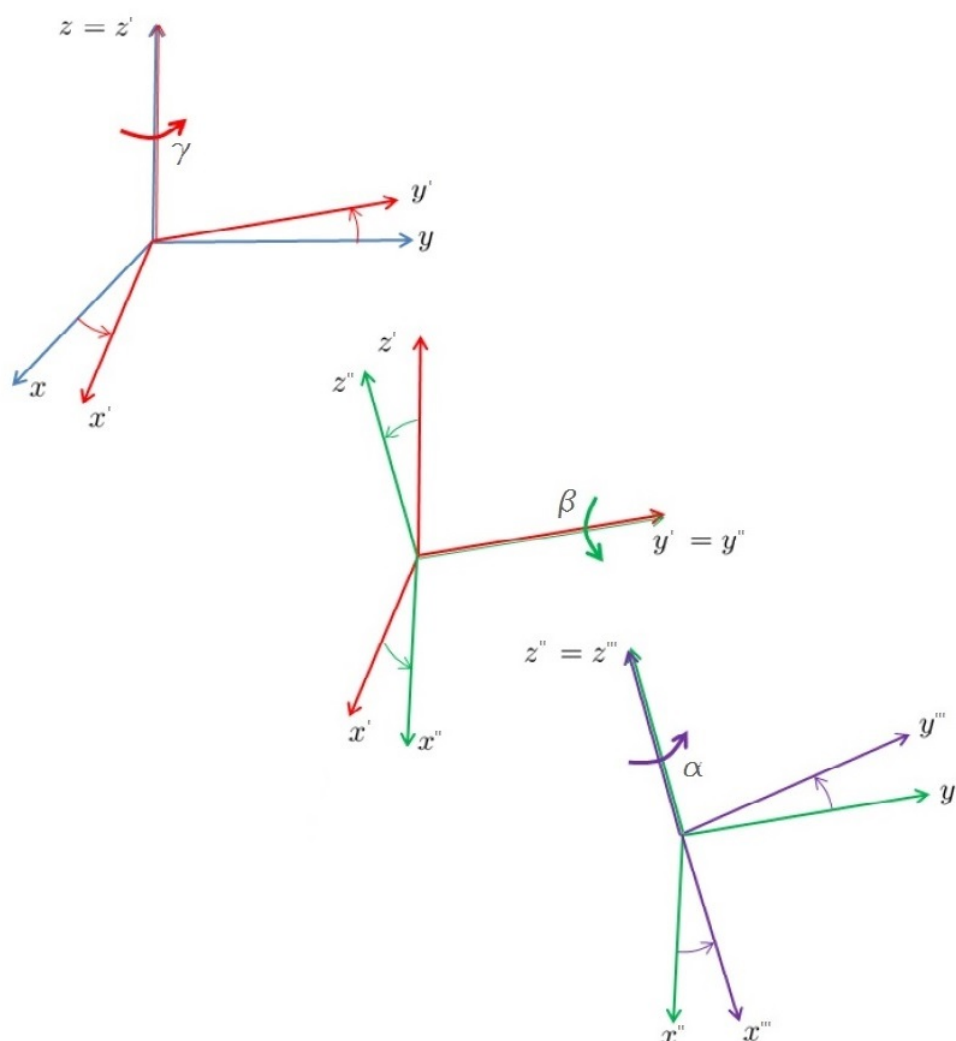


Figura 1.3: In figura é stata rappresentata la parametrizzazione che utilizza gli angoli di Eulero. Una generica rotazione viene scomposta in tre rotazioni successive: γ attorno all'asse z , β attorno all'asse y , α di nuovo attorno all'asse z .

1.4 L'Algebra di Lie

1.4.1 Rotazioni infinitesime

Una volta definito un gruppo, si può introdurre il concetto di trasformazione infinitesima. L'idea di base é quella di non considerare il gruppo nella sua interezza, ma solamente le trasformazioni infinitamente vicine all'identità. Ogni altra trasformazione del gruppo

puó essere ricavata, di conseguenza, applicando ripetutamente trasformazioni infinitesime.

Si consideri, ora, una rotazione attorno ad un asse $\hat{\mathbf{n}}$ e di angolo φ . Facendo uso della formula 1.6 per le rotazioni finite, é possibile ricavare l'espressione della matrice delle rotazioni infinitesime facendo tendere l'angolo ad un infinitesimo $\delta\varphi$. Sostituendo φ con $\delta\varphi$ e sviluppando $\cos \varphi = 1 + O(\delta\varphi^2)$ e $\sin \varphi = \delta\varphi + O(\delta\varphi^2)$ si ottiene il risultato seguente:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\delta\varphi) = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + [1 + O(\delta\varphi^2)] (I_3 - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) - [\delta\varphi + O(\delta\varphi^3)] * \mathbf{n} = I_3 - \delta\varphi * \mathbf{n} + O(\delta\varphi^3); \quad (1.15)$$

che, applicato ad un vettore \mathbf{r} , conduce alla seguente formula:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\delta\varphi)\mathbf{r} = \mathbf{r} + \delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{r}. \quad (1.16)$$

Le trasformazioni infinitesime sono di fondamentale importanza nella definizione dei gruppi di Lie, argomento trattato nel paragrafo seguente.

1.4.2 Corrispondenza fra Algebra e Gruppo di Lie

Un *gruppo di Lie* é per definizione un gruppo di trasformazioni che dipendono in modo continuo da alcuni parametri. Il gruppo delle rotazioni in $SO(3)$ é un esempio di gruppo di Lie: ogni rotazione, infatti, é parametrizzata da 3 parametri reali (ad esempio gli angoli di Eulero). Studiando le trasformazioni infinitesime generate dal gruppo si ottiene l'*algebra di Lie* del gruppo.

Definizione 1.4.1. Dato un gruppo G si definisce *curva* in G passante per l'identitá la funzione differenziabile $\gamma(t) : \mathbb{R} \rightarrow G$ per la quale $\gamma(0) = I_G$, ove I_G denota l'elemento neutro di G .

Si puó immaginare G come un'ipersuperficie in un'algebra di matrici, si puó fare riferimento alla figura 1.4.2 per una migliore visualizzazione.

Definizione 1.4.2. Si definisce *algebra di Lie* \mathfrak{a} uno spazio vettoriale su \mathbb{R} dotato di un'applicazione, indicata con $[\cdot, \cdot]$, che soddisfa le seguenti proprietá:

1. linearitá: $[\mathbf{x}, \alpha\mathbf{y} + \beta\mathbf{z}] = \alpha[\mathbf{x}, \mathbf{y}] + \beta[\mathbf{x}, \mathbf{z}], \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R} \text{ e } \forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in \mathfrak{g};$
2. antisimmetria: $[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = -[\mathbf{y}, \mathbf{x}];$
3. identitá di Jacobi : $[\mathbf{x}, [\mathbf{y}, \mathbf{z}]] + [\mathbf{y}, [\mathbf{z}, \mathbf{x}]] + [\mathbf{z}, [\mathbf{x}, \mathbf{y}]] = 0.$

L'operazione bilineare $[\cdot, \cdot]$ é detta *commutatore* o *parentesi di Lie*.

Dato il gruppo di Lie G , il seguente insieme

$$\mathfrak{g} = \left\{ X \mid \text{esiste una curva } \gamma \text{ in } G \text{ tale che } X = \left. \frac{d\gamma(t)}{dt} \right|_{t=0} \right\}$$

é lo spazio tangente a G nell'identitá.

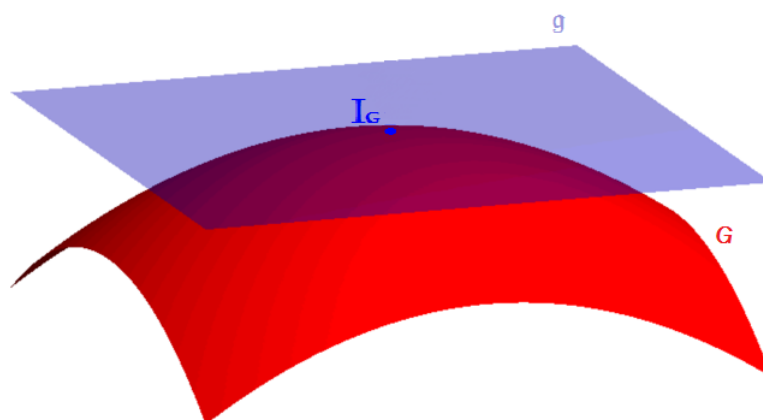


Figura 1.4: Si riporta una raffigurazione dell'ipersuperficie che rappresenta il gruppo G e della superficie \mathfrak{g} tangente ad essa nel punto I_G .

Teorema 1.4.1. *Lo spazio tangente ad un gruppo di Lie G nell'identità, \mathfrak{g} , con l'operazione binaria*

$$[X, Y] = XY - YX \in \mathfrak{g}, \quad X, Y \in \mathfrak{g}$$

è un'algebra di Lie, l'algebra di Lie del gruppo G .

Si dá ora la definizione di matrice esponenziale. Occorre prima ricordare che la norma di una matrice quadrata A di ordine n , é definita come:

$$\|A\| = \left(\sum_{i,j=1}^n |A_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Poiché in tale norma la serie $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{A^k}{k!}$ é convergente (cioé questo oggetto é anch'esso una matrice $n \times n$), risulta definita la matrice *esponenziale* di A nel seguente modo:

$$e^A = I + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A^k}{k!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}.$$

Teorema 1.4.2. *Dato il gruppo chiuso G , l'esponenziale matriciale*

$$\exp : \mathfrak{g} \rightarrow G$$

mappa l'algebra di Lie \mathfrak{g} nel gruppo G : $A \in \mathfrak{g} \rightarrow e^A \in G$.

In particolare, si ha che se G é compatto, come nel caso di $SO(2)$, $SO(3)$, ogni $R \in G$ può essere espresso come e^A per un $A \in \mathfrak{g}$ (si noti che A non é unico).

Si può dare la seguente definizione:

Definizione 1.4.3. Un insieme di *generatori di un gruppo* G é una base di \mathfrak{g} .

Definizione 1.4.4. Sia G é un gruppo e \mathfrak{g} la sua algebra di Lie, per $R \in G$ e $X \in \mathfrak{g}$ si ha $RXR^{-1} \in \mathfrak{g}$. L'applicazione $X \in \mathfrak{g} \rightarrow RXR^{-1} \in \mathfrak{g}$ é chiamata *azione aggiunta* di R su \mathfrak{g} .

Vengono ora analizzati i gruppi di Lie $SO(2)$ ed $SO(3)$.

$SO(2)$ come gruppo di Lie e la sua algebra $\mathfrak{so}(2)$

Si riprenda l'espressione 1.4 delle matrici che definiscono le rotazioni nel piano:

$$R(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}, \varphi \in \mathbb{R}.$$

Ricordando la seconda matrice di Pauli

$$\sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.17)$$

si può riscrivere ogni matrice $R \in SO(2)$ nel seguente modo:

$$R = (\cos \varphi)I_2 + i(\sin \varphi)\sigma_2 = e^{i\varphi\sigma_2}. \quad (1.18)$$

Si vuole trovare una rappresentazione dell'algebra $\mathfrak{so}(2)$: si consideri la parametrizzazione appena trovata

$$\varphi \in \mathbb{R} \mapsto e^{i\varphi\sigma_2} = \Gamma(\varphi) \in SO(2) \quad (1.19)$$

e si derivi rispetto al parametro φ :

$$\left. \frac{\partial \Gamma(\varphi)}{\partial \varphi} \right|_{\varphi=0} = i\sigma_2.$$

Essendo σ_2 una base di $\mathfrak{so}(2)$, essa é il generatore del gruppo $SO(2)$.

$SO(3)$ come gruppo di Lie e la sua algebra $\mathfrak{so}(3)$

Si considerino le espressioni 1.10, 1.11, 1.12 delle rotazioni intorno agli assi x, y, z , nelle quali l'angolo φ é il parametro di Lie. Si cercano, ora, i corrispondenti generatori infinitesimali denotati rispettivamente con A_1, A_2, A_3 :

$$A_1 = \left. \frac{\partial R_1(\varphi)}{\partial \varphi} \right|_{\varphi=0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sin \varphi & -\cos \varphi \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \end{bmatrix} \Big|_{\varphi=0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix};$$

analogamente

$$A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad A_3 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Si noti che valgono le seguenti regole di commutazione:

$$[A_i, A_j] = \varepsilon_{ijk} A_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3.$$

L'algebra di Lie del gruppo $SO(3)$ é indicata con $\mathfrak{so}(3)$ ed é l'insieme delle matrici corrispondenti a rotazioni infinitesime, cioè matrici della forma $-\mathbf{*u}$ dove \mathbf{u} é un vettore unitario:

$$\mathbf{*u} = \begin{bmatrix} 0 & u_3 & -u_2 \\ -u_3 & 0 & u_1 \\ u_2 & -u_1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Dati $-\mathbf{*u}, -\mathbf{*v} \in \mathfrak{so}(3)$, vale la seguente relazione:

$$[-\mathbf{*u}, -\mathbf{*v}] = -\mathbf{*}(\mathbf{u} \times \mathbf{v}). \quad (1.20)$$

Data la matrice $A = -\mathbf{*n} \in \mathfrak{so}(3)$ corrispondente ad una rotazione infinitesima, ogni matrice $R \in SO(3)$ si può esprimere come esponenziale di A , in particolare:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi) = e^{-\varphi \mathbf{*n}} = \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \cos \varphi (I - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) - \sin \varphi \mathbf{*n}. \quad (1.21)$$

Si può dare una dimostrazione intuitiva considerando N rotazioni successive attorno all'asse $\hat{\mathbf{n}}$ e di angolo $\frac{\varphi}{N}$. Si intuisce che per N molto grande si ottiene una successione di rotazioni infinitesime il cui risultato é una rotazione finita di asse $\hat{\mathbf{n}}$ e angolo φ :

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi) = \left[R_{\hat{\mathbf{n}}}\left(\frac{\varphi}{N}\right) \right]^N.$$

Dato che per $N \gg 1$ si ha

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}\left(\frac{\varphi}{N}\right) \simeq I_3 - \frac{\varphi}{N} \mathbf{*n},$$

rammentando che $e^x = \lim_{N \rightarrow \infty} (1 - \frac{x}{N})^N$ e passando al limite $N \rightarrow \infty$ risulta:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[I_3 - \frac{\varphi}{N} * \mathbf{n} \right]^N = e^{-\varphi * \mathbf{n}}.$$

In conclusione si é ottenuta la 1.21.

Il sottogruppo di $SO(3)$ definito come l'insieme delle rotazioni attorno ad un asse $\hat{\mathbf{n}}$ é isomorfo al gruppo delle rotazioni $SO(2)$ nel piano perpendicolare all'asse $\hat{\mathbf{n}}$.

Si usa scrivere ogni rotazione $R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi) \in SO(3)$ nel seguente modo:

$$R_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi) = e^{-i\varphi J_n}, \quad J_n = -i * \mathbf{n} \quad (1.22)$$

e si associa, quindi, ad ogni versore $\hat{\mathbf{n}}$ il generatore denotato con J_n .

Con questa nuova notazione i generatori delle rotazioni infinitesime lungo gli assi x, y, z sono rispettivamente:

$$J_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad J_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad J_3 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.23)$$

Teorema 1.4.3. *I generatori $\{J_k, k = 1, 2, 3\}$ soddisfano la seguente algebra di Lie:*

$$[J_k, J_l] = i\varepsilon_{klm} J_m. \quad (1.24)$$

Si noti che le regole di commutazione appena ricavate sono le stesse delle componenti dell'operatore momento angolare totale $\hat{\mathbf{J}}$ di singola particella della meccanica quantistica riportate di seguito:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} \hat{J}_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3. \quad (1.25)$$

I generatori J_k con $k = 1, 2, 3$ descritti dalle matrici 1.23 hanno un significato fisico molto importante in quanto corrispondono ad osservabili fisiche, cioè quantità misurabili. Nel prossimo paragrafo si mostrerá come in meccanica quantistica é proprio $\hat{\mathbf{J}}$ a generare le rotazioni infinitesime.

Capitolo 2

Le rotazioni in meccanica quantistica

Fino ad ora non sono state utilizzate nozioni di meccanica quantistica. È interessante studiare gli effetti di una rotazione su un sistema quantistico.

Si considerino degli elettroni il cui stato è descritto dalla funzione d'onda $\psi(\mathbf{x})$. Essi sono preparati con momento $\mathbf{p} = \sqrt{2mE}\mathbf{k}$, in un cannone elettronico diretto lungo il versore \mathbf{k} . Ruotando il cannone attraverso R , \mathbf{k} viene trasformato in $R\mathbf{k}$ e conseguentemente gli elettroni hanno momento $R\mathbf{p}$. L'effetto è quello di cambiare lo stato degli elettroni, nonché la loro funzione d'onda. Si vuole trovare l'espressione dell'operatore applicato alla funzione d'onda.

2.1 L'operatore di rotazione

Definizione 2.1.1. Si definisce *operatore unitario* un operatore \hat{A} tale che

$$\hat{A}^\dagger \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^\dagger = I. \quad (2.1)$$

Dalla definizione discende che per un operatore unitario vale

$$A^\dagger = \hat{A}^{-1}. \quad (2.2)$$

Gli operatori unitari, inoltre, conservano la norma:

$$\langle \hat{A}\psi_1, \hat{A}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1, \hat{A}^\dagger \hat{A}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1, \hat{A}^{-1} \hat{A}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle. \quad (2.3)$$

Teorema 2.1.1. *Ad ogni matrice R di $SO(3)$ è associato un operatore unitario $\hat{U}(R)$ nello spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3)$ che rappresenta l'azione di R sugli stati (funzioni d'onda) del sistema. L'azione di $\hat{U}(R)$ su $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ è:*

$$\psi'(\mathbf{x}) = (\hat{U}(R)\psi)\mathbf{x} = \psi(R^{-1}\mathbf{x}). \quad (2.4)$$

Dimostrazione. Si consideri un vettore $|\psi\rangle$ nello spazio di Hilbert degli stati del sistema e lo si faccia ruotare applicando l'operatore $\widehat{U}(R)$:

$$|\psi'\rangle = \widehat{U}(R)|\psi\rangle.$$

Si esprimono i vettori nella base delle coordinate spaziali:

$$|\psi\rangle = \int |\mathbf{x}\rangle\psi(\mathbf{x})d^3x, \quad (2.5)$$

$$|\psi'\rangle = \widehat{U}(R)|\psi\rangle = \int |\mathbf{x}\rangle\psi'(\mathbf{x})d^3x \quad (2.6)$$

e si applica l'operatore rotazione ad entrambi i membri di 2.5 ottenendo:

$$\begin{aligned} \widehat{U}(R)|\psi\rangle &= \int \widehat{U}(R)|\mathbf{x}\rangle\psi(\mathbf{x})d^3x = \int R|\mathbf{x}\rangle\psi(\mathbf{x})d^3x = \\ &= \int |\mathbf{x}'\rangle\psi(R^{-1}\mathbf{x}')d^3x'. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \psi'(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x}).$$

Si dimostra, inoltre, che l'operatore di rotazione $\widehat{U}(R)$ conserva le norme ed é, quindi, unitario:

$$\langle\psi', \psi'\rangle = \langle\psi, \psi\rangle.$$

Infatti denotando $\mathbf{x}' = R^{-1}\mathbf{x}$, ove lo jacobiano ha il valore $\det R = 1$, si ha:

$$\langle\psi', \psi'\rangle = \int d^3x|\psi'(x)|^2 = \int d^3x|\psi(R^{-1}\mathbf{x})|^2 = \int d^3x'|\psi(x')|^2 = \langle\psi, \psi\rangle.$$

□

Per una dimostrazione piú intuitiva si faccia riferimento alla figura 2.1.

Per ogni coppia R_1, R_2 vale $\widehat{U}(R_1)\widehat{U}(R_2) = \widehat{U}(R_1R_2)$; l'insieme delle trasformazioni $\widehat{U}(R)$ (al variare di $R \in SO(3)$) costituisce, quindi, una *rappresentazione unitaria* di dimensione infinita del gruppo $SO(3)$: esso non viene piú rappresentato con matrici ma con operatori su spazi di Hilbert.

L'applicazione $R \rightarrow \widehat{U}(R)$ rispetta la legge di composizione di $SO(3)$.

Osservazione 3. Si noti che la matrice R trasforma un vettore di dimensione 3 in un altro vettore di dimensione 3, mentre l'operatore $\widehat{U}(R)$ agisce su un ket appartenente allo spazio di Hilbert di dimensione ∞ .

Al fine di ricavare l'espressione dell'operatore rotazione si proceda con l'esempio alquanto significativo presentato nel prossimo paragrafo.

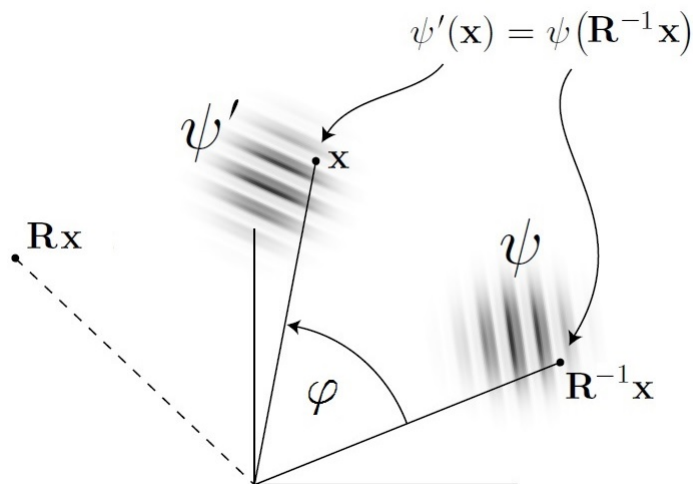


Figura 2.1: In figura si dá un'idea intuitiva dell'azione dell'operatore di rotazione su uno stato ψ il cui risultato é $\psi'(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x})$.

2.1.1 Rotazioni infinitesime e Momento angolare

Si consideri una rotazione infinitesima $R_{\mathbf{n}}(\delta\varphi) = I_3 - \delta\varphi^*\mathbf{n}$, con inversa $R^{-1} = I_3 + \delta\varphi^*\mathbf{n}$ e si calcoli la funzione d'onda $\psi'(\mathbf{x})$ applicando la formula 2.4:

$$\begin{aligned}
 \psi'(\mathbf{x}) &= \psi(R^{-1}\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x} - \delta\varphi\mathbf{n} \times \mathbf{x}) = \\
 &= \psi(\mathbf{x}) - (\delta\varphi\mathbf{n} \times \mathbf{x}) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x}) + O(\delta\varphi^2) = \\
 &= \psi(\mathbf{x}) - \delta\varphi\mathbf{n} \cdot \mathbf{x} \times \nabla\psi(\mathbf{x}) + O(\delta\varphi^2) = \\
 &= \psi(\mathbf{x}) - \frac{i}{\hbar}\delta\varphi\mathbf{n}(-i\hbar)\mathbf{x} \times \nabla\psi(\mathbf{x}) + O(\delta\varphi^2).
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Indicando con $\hat{\mathbf{L}}$ l'operatore momento angolare orbitale, definito come

$$\hat{\mathbf{L}}\psi(\mathbf{x}) = -i\hbar\mathbf{x} \times \nabla\psi(\mathbf{x}), \tag{2.8}$$

si ottiene la seguente espressione:

$$\psi'(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) - \frac{i}{\hbar}\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}\delta\varphi\psi(\mathbf{x}) + O(\delta\varphi^2). \tag{2.9}$$

In conclusione, indicando con $|\psi\rangle$ lo stato originale e con $|\psi'\rangle$ lo stato ruotato attraverso $R_{\hat{\mathbf{n}}}(\delta\varphi)$:

$$|\psi'\rangle = \hat{U}_{\hat{\mathbf{n}}}(\delta\varphi)|\psi\rangle \tag{2.10}$$

vale la seguente relazione:

$$|\psi'\rangle = \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} \delta\varphi \right) |\psi\rangle. \quad (2.11)$$

$\hat{\mathbf{L}}$ corrisponde al generatore infinitesimale della rotazione nello spazio di Hilbert e

$$\hat{U}_{\mathbf{n}}(\delta\varphi) = I - i \left(\frac{\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{\hbar} \right) \delta\varphi \quad (2.12)$$

é l'operatore che descrive una rotazione infinitesima.

Nel caso di rotazioni finite si ha

$$R_{\mathbf{n}}(\varphi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[R_{\mathbf{n}} \left(\frac{\varphi}{N} \right) \right]^N. \quad (2.13)$$

Dato che

$$|\psi'\rangle = \hat{U}_{\mathbf{n}}(\varphi) |\psi\rangle \quad (2.14)$$

vale

$$|\psi'\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} \frac{\varphi}{N} \right]^N |\psi\rangle = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} \varphi \right) |\psi\rangle. \quad (2.15)$$

L'operatore che descrive una rotazione finita $R_{\mathbf{n}}(\varphi)$ risulta essere:

$$\hat{U}_{\mathbf{n}}(\varphi) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} \varphi \right). \quad (2.16)$$

2.1.2 Momento angolare totale

Le conclusioni tratte nel paragrafo precedente sono valide nel caso in cui lo spin della particella considerata abbia valore pari a 0. In Meccanica Quantistica, alle particelle é attribuito un momento angolare totale dato dalla somma di due contributi: quello orbitale e quello dovuto ad un momento intrinseco detto di spin. In tal caso il generatore della rotazione non é piú il momento angolare orbitale, bensí il *momento angolare totale* $\hat{\mathbf{J}}$ il quale é definito come:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}. \quad (2.17)$$

Il momento di spin puó assumere valori discreti ed in particolare all'elettrone si associano due possibili valori: $\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$. É per tale ragione che all'elettrone non viene associata una singola funzione d'onda, ma piuttosto una funzione d'onda a due componenti:

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{+}(\mathbf{x}) \\ \psi_{-}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Si ipotizza che l'operatore di rotazione dia un risultato che é combinazione lineare di $\psi_+(\mathbf{x})$ e $\psi_-(\mathbf{x})$ con certi coefficienti $D_{\sigma'\sigma}(R)$ che rimescolano le componenti della funzione d'onda:

$$\psi'_\sigma(\mathbf{x}) = \sum_{\sigma'} \psi_{\sigma'}(R^{-1}\mathbf{x}) D_{\sigma'\sigma}(R). \quad (2.19)$$

Per ricavare la formula della funzione d'onda ruotata si puó procedere in modo analogo all'espressione 2.7, considerando una rotazione infinitesima $R = I_3 - \delta\varphi^* \mathbf{n}$ e ipotizzando che i coefficienti $D_{\sigma'\sigma}(R)$ possano essere riscritti come $\delta_{\sigma'\sigma} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\sigma'\sigma} \cdot \mathbf{n} \delta\varphi$. Si noti infatti che se R é la rotazione identica non avviene nessun rimescolamento delle componenti, altrimenti il rimescolamento dipende linearmente dalla quantità infinitesima $\delta\varphi$. Si ottiene pertanto:

$$\begin{aligned} \psi'_\sigma(\mathbf{x}) &= \sum_{\sigma'} \psi_{\sigma'}(\mathbf{x} - \delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{x}) \left(\delta_{\sigma'\sigma} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_{\sigma'\sigma} \cdot \mathbf{n} \delta\varphi \right) = \\ &= \psi_\sigma(\mathbf{x}) - \delta\varphi \mathbf{n} \times \mathbf{x} \cdot \nabla \psi_\sigma(\mathbf{x}) - \frac{i}{\hbar} \sum_{\sigma'} \psi_{\sigma'}(\mathbf{x}) \mathbf{S}_{\sigma'\sigma} \cdot \mathbf{n} \delta\varphi. \end{aligned} \quad (2.20)$$

In questo caso lo stato ruotato $|\psi'\rangle$ viene trasformato come segue:

$$|\psi'\rangle = |\psi\rangle - \frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \widehat{\mathbf{L}} \delta\varphi |\psi\rangle - \frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \widehat{\mathbf{S}} \delta\varphi |\psi\rangle = |\psi\rangle - \frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \widehat{\mathbf{J}} \delta\varphi |\psi\rangle. \quad (2.21)$$

Procedendo in modo analogo al paragrafo precedente, l'operatore di rotazione infinitesima risulta essere

$$\widehat{U}_\mathbf{n}(\delta\varphi) = I - i \left(\frac{\mathbf{n} \cdot \widehat{\mathbf{J}}}{\hbar} \right) d\varphi \quad (2.22)$$

e quello di rotazione finita

$$\widehat{U}_\mathbf{n}(\varphi) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \widehat{\mathbf{J}} \varphi \right). \quad (2.23)$$

Si é quindi dimostrato che le espressioni di $\widehat{U}_\mathbf{n}(\delta\varphi)$ e $\widehat{U}_\mathbf{n}(\varphi)$ nel caso in cui il termine di spin sia diverso da zero possono essere ricavate dalle formule 2.12 e 2.16 semplicemente sostituendo l'operatore $\widehat{\mathbf{J}}$ ad $\widehat{\mathbf{L}}$.

Autovalori ed autovettori del momento angolare totale

Si ricordi la 1.25:

$$\left[\widehat{J}_i, \widehat{J}_j \right] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \widehat{J}_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3;$$

essa esprime che i generatori delle rotazioni infinitesimali non commutano mutuamente. É conveniente definire un operatore $\hat{\mathcal{J}}^2 = \hat{\mathcal{J}} \cdot \hat{\mathcal{J}} = \hat{\mathcal{J}}_1^2 + \hat{\mathcal{J}}_2^2 + \hat{\mathcal{J}}_3^2$ il quale verifica $[\hat{\mathcal{J}}_k, \hat{\mathcal{J}}^2] = 0$, per $k = 1, 2, 3$.

La base di stati nello spazio di Hilbert viene convenzionalmente scelta con $|j, m\rangle$, che sono gli autovettori simultanei di $\hat{\mathcal{J}}^2$ e $\hat{\mathcal{J}}_3$:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{J}}^2|j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle; \\ \hat{\mathcal{J}}_3|j, m\rangle &= m\hbar|j, m\rangle;\end{aligned}$$

dove j é intero o semintero ed $m = -j, j+1, \dots, j-1, j$.

Vale la seguente relazione di ortonormalitá tra i ket della base:

$$\langle j', m'|j, m\rangle = \delta_{m'm}\delta_{j'j}. \quad (2.24)$$

Si ricordi, inoltre, la relazione di completezza

$$\sum_j \sum_{m=-j}^j |j, m\rangle\langle j, m| = \hat{I}. \quad (2.25)$$

Se esistono altri gradi di libertá corrispondenti ad ulteriori numeri quantici n , le relazioni 2.24 e 2.25 diventano le seguenti:

$$\langle n', j', m'|n, j, m\rangle = \delta_{m'm}\delta_{j'j}\delta_{n'n}; \quad (2.26)$$

$$\sum_n \sum_j \sum_{m=-j}^j |n, j, m\rangle\langle n, j, m| = \hat{I}. \quad (2.27)$$

Vengono definiti due nuovi operatori nel seguente modo:

$$\hat{\mathcal{J}}_+ = \hat{\mathcal{J}}_1 + i\hat{\mathcal{J}}_2, \quad \hat{\mathcal{J}}_- = \hat{\mathcal{J}}_1 - i\hat{\mathcal{J}}_2. \quad (2.28)$$

La loro azione su un ket é quella di modificarne il numero quantico m come segue:

$$\hat{\mathcal{J}}_{\pm}|j, m\rangle = \hbar [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} |j, m \pm 1\rangle. \quad (2.29)$$

Dalla definizione discende che gli operatori $\hat{\mathcal{J}}_1, \hat{\mathcal{J}}_2$ possono essere riscritti in termini di $\hat{\mathcal{J}}_+, \hat{\mathcal{J}}_-$:

$$\hat{\mathcal{J}}_1 = \frac{1}{2i}(\hat{\mathcal{J}}_+ + \hat{\mathcal{J}}_-), \quad (2.30)$$

$$\hat{\mathcal{J}}_2 = \frac{1}{2i}(\hat{\mathcal{J}}_+ - \hat{\mathcal{J}}_-). \quad (2.31)$$

Capitolo 3

Le simmetrie

Si considerino nuovamente degli elettroni preparati nello stato $|\psi\rangle$ caratterizzato da momento $\mathbf{p} = \sqrt{2mE}\mathbf{k}$ con un cannone elettronico diretto lungo il versore \mathbf{k} . Si consideri, inoltre, un misuratore di energia posto lungo la direzione \mathbf{k} che inizialmente rileva un'energia media pari a E_m .

Il *principio di isotropia* dello spazio afferma che non ci sono direzioni preferenziali nello spazio vuoto, tutte le direzioni sono matematicamente e fisicamente equivalenti: il concetto di orientazione assoluta non ha significato fisico.

Si ruoti di un angolo φ l'intero dispositivo costituito da cannone elettronico e misuratore di energia. Secondo il principio di isotropia l'esito dell'esperimento non dipende dall'orientazione spaziale del dispositivo: una volta ruotato quest'ultimo, la misura dell'energia dar  lo stesso esito E_m . Si ipotizzi che l'azione della rotazione sia dovuta ad un operatore unitario $\widehat{U}(R)$. Si possono considerare delle altre osservabili corrispondenti ad operatori autoaggiunti \widehat{A} . Si ricorda che un operatore \widehat{A} si dice *autoaggiunto* se verifica la seguente uguaglianza: $\widehat{A} = \widehat{A}^\dagger$. Se $\widehat{U}(R)$   un operatore di simmetria gli stati e le osservabili si trasformeranno come segue

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\rightarrow |\psi'\rangle = \widehat{U}(R)|\psi\rangle, \\ \widehat{A} &\rightarrow \widehat{A}' = \widehat{U}(R)\widehat{A}\widehat{U}^\dagger(R). \end{aligned}$$

Da tali relazioni segue che il valor medio di \widehat{A} non cambia sotto la trasformazione di simmetria operata da $\widehat{U}(R)$:

$$\langle \widehat{A}' \rangle = \langle \psi' | \widehat{A}' | \psi' \rangle = \langle \psi | \widehat{U}^\dagger(R) \widehat{U}(R) \widehat{A} \widehat{U}^\dagger(R) \widehat{U}(R) | \psi \rangle = \langle \psi | \widehat{A} | \psi \rangle = \langle \widehat{A} \rangle. \quad (3.1)$$

Generalizzando si ha che dato un operatore unitario \widehat{U} che rappresenta una certa trasformazione di simmetria, uno stato $|\psi\rangle$ si dice invariante per la trasformazione operata da \widehat{U} se il ket trasformato e quello originale rappresentano lo stesso stato fisico, cio  se:

$$\widehat{U}|\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (3.2)$$

A titolo di esempio é noto che lo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno é invariante per trasformazioni di rotazione.

In secondo luogo, un operatore autoaggiunto \hat{A} si dice invariante sotto l'operazione di simmetria data da \hat{U} se il suo valore di aspettazione non viene modificato per trasformazioni dello stato: per ogni stato $|\psi\rangle$ vale

$$\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle.$$

La condizione puó essere riscritta in termini di soli operatori:

$$\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U} = \hat{A} \Leftrightarrow \hat{A} = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger. \quad (3.3)$$

A titolo di esempio si puó considerare il caso dell'energia dell'atomo idrogeno, la quale é rappresentata dall'hamiltoniana che é invariante rispetto alle rotazioni.

Il comportamento di ogni sistema quantistico é descritto dal suo operatore hamiltoniano \hat{H} . Se esso verifica la condizione:

$$\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U} = \hat{H}, \quad (3.4)$$

il sistema si dice invariante sotto la trasformazione di simmetria operata da \hat{U} . Poiché \hat{U} é un operatore unitario, la condizione puó essere riscritta come $\hat{H}\hat{U} = \hat{U}\hat{H}$, perciò vale:

$$[\hat{U}, \hat{H}] = 0. \quad (3.5)$$

Inoltre se l'operatore di simmetria \hat{U} dipende da un parametro α ed é generato dall'operatore hermitiano \hat{G} , cioè $\hat{U}(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{G}\alpha}$, si ha

$$[\hat{G}, \hat{H}] = 0. \quad (3.6)$$

Dimostrazione.

$$[\hat{U}(\alpha), \hat{H}] = 0 \Rightarrow i\hbar \frac{d}{d\alpha} [\hat{U}(\alpha), \hat{H}] \Big|_{\alpha=0} = 0 \Rightarrow \left[i\hbar \frac{d}{d\alpha} \hat{U}(\alpha) \Big|_{\alpha=0}, \hat{H} \right] = 0 \Rightarrow [\hat{G}, \hat{H}] = 0.$$

□

Le espressioni riportate in questo paragrafo sono di fondamentale importanza e determinano in modo profondo la natura e le caratteristiche di un sistema fisico che le verifica.

3.1 Le leggi di conservazione

Si vuole ora dare la definizione di un concetto fondamentale in fisica: le *leggi di conservazione*.

Si prenda in considerazione un sistema invariante sotto la trasformazione di simmetria operata da \hat{U} .

Per ogni operatore \hat{A} , vale l'*equazione di Heisenberg* la quale determina l'evoluzione temporale dell'operatore:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}]. \quad (3.7)$$

Se il sistema ha la simmetria data da \hat{U} , \hat{U} commuta con l'hamiltoniana \hat{H} , così come il generatore \hat{G} : $[\hat{G}, \hat{H}] = 0$. Si può quindi applicare la 3.7 ottenendo:

$$\frac{d\hat{G}}{dt} = 0. \quad (3.8)$$

Il risultato ha un significato notevole poiché esprime che \hat{G} è un'osservabile invariante rispetto all'evoluzione temporale del sistema di hamiltoniana \hat{H} : a \hat{G} è associata, quindi, una costante del moto.

In meccanica classica la stretta correlazione tra simmetrie e leggi di conservazione è descritta dal teorema di Noether.

È interessante analizzare il caso dal punto di vista degli autovalori di \hat{G} . Si denoti con $\hat{U}(t, t_0)$ l'operatore di evoluzione temporale tale che $|g', t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|g'\rangle$ e sia $|g'\rangle$ un autoket di \hat{G} con autovalore g' : $\hat{G}|g'\rangle = g'|g'\rangle$; se un sistema è invariante sotto la trasformazione operata da $\hat{U}(\alpha)$, anche il suo evoluto temporale $\hat{U}(t, t_0)|g'\rangle$ è autoket di \hat{G} con autovalore g' .

Dimostrazione. \hat{G} commuta con $\hat{U}(t, t_0)$, infatti:

$$[\hat{G}, \hat{H}] = 0, \quad \hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}} \Rightarrow [\hat{G}, \hat{U}(t, t_0)] = 0$$

Allora

$$\hat{G}|g', t_0; t\rangle = \hat{G} [\hat{U}(t, t_0)|g'\rangle] = \hat{U}(t, t_0)\hat{G}|g'\rangle = g' [\hat{U}(t, t_0)|g'\rangle] = g'|g', t_0; t\rangle.$$

Perciò anche $\hat{U}(t, t_0)\hat{G}|g'\rangle$ è autoket di \hat{G} con autovalore g' . □

Risulta che lo spettro dell'operatore \hat{G} rimane inalterato e quindi l'evoluzione temporale della grandezza osservabile associata a \hat{G} non modifica l'insieme dei suoi valori possibili.

Nel paragrafo successivo viene analizzata in dettaglio la simmetria di un sistema invariante per rotazioni.

3.2 La simmetria di rotazione

Definizione 3.2.1. Un sistema si dice *invariante per rotazioni* se l'energia non viene modificata da una rotazione arbitraria.

Viene qui di seguito analizzato il caso di un sistema invariante per rotazioni. Si riprendono i concetti della sezione precedente applicandoli all'operatore di rotazione $\hat{U}_{\mathbf{n}}(\varphi)$ e al suo generatore $\hat{\mathbf{J}}$:

$$\hat{U}(\alpha) \rightarrow \hat{U}_{\mathbf{n}}(\varphi) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\varphi\right),$$

$$\hat{G} \rightarrow \hat{\mathbf{J}}.$$

Un sistema fisico invariante per rotazioni é descritto da un'hamiltoniana \hat{H} la quale secondo 3.5 e 3.6 commuta con $\hat{U}_{\mathbf{n}}(\varphi)$ e $\hat{\mathbf{J}}$:

$$\left[\hat{U}_{\mathbf{n}}(\varphi), \hat{H}\right] = 0, \quad (3.9)$$

$$\left[\hat{\mathbf{J}}, \hat{H}\right] = 0. \quad (3.10)$$

Secondo la definizione 3.4 vale inoltre:

$$\hat{U}_{\mathbf{n}}^\dagger(\varphi) \hat{H} \hat{U}_{\mathbf{n}}(\varphi) = \hat{H} \Rightarrow \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\varphi\right) \hat{H} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\varphi\right) = \hat{H}.$$

Secondo la formula 3.8 il momento angolare totale é, come già detto, una grandezza conservata:

$$\frac{d\hat{\mathbf{J}}}{dt} = 0.$$

3.3 Degenerazione dei livelli di energia

Il concetto di *degenerazione* già noto in meccanica classica assume un ruolo molto importante in meccanica quantistica. Si supponga che per l'operatore di simmetria \hat{U} valga

$$\left[\hat{H}, \hat{U}\right] = 0.$$

Sia $|n\rangle$ un autoket dell'energia con autovalore E_n , allora anche $\widehat{U}|n\rangle$ é un autoket dell'energia, con stesso autovalore E_n , infatti:

$$\widehat{H}(\widehat{U}|n\rangle) = \widehat{U}\widehat{H}|n\rangle = E_n(\widehat{U}|n\rangle). \quad (3.11)$$

Se $|n\rangle$ e $\widehat{U}|n\rangle$ rappresentano diversi stati, essi sono per definizione degeneri.

3.3.1 Azione dell'operatore di rotazione sugli autoket $|n, j, m\rangle$

Si consideri il caso in cui l'operatore \widehat{U} del paragrafo precedente coincida con l'operatore di rotazione $\widehat{U}(R)$:

$$\widehat{U} \rightarrow \widehat{U}(R).$$

Si ha che l'Hamiltoniana é invariante per rotazioni:

$$[\widehat{H}, \widehat{U}(R)] = 0,$$

inoltre, come visto precedentemente, anche $\widehat{\mathbf{J}}$ commuta con \widehat{H} e, di conseguenza, anche $\widehat{\mathbf{J}}^2$:

$$[\widehat{\mathbf{J}}, \widehat{H}] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\widehat{\mathbf{J}}^2, \widehat{H}] = 0.$$

Si consideri lo spazio di Hilbert degli stati del sistema considerato, é possibile definire una sua base prendendo gli autoket simultanei di \widehat{H} , $\widehat{\mathbf{J}}^2$, \widehat{J}_3 denotati con $|n, j, m\rangle$. Essi hanno un autovalore corrispondente all'energia pari a E_n . Il calcolo 3.11 puó essere ripreso nel caso in questione:

$$\widehat{H}(\widehat{U}(R)|n, j, m\rangle) = \widehat{U}(R)\widehat{H}|n, j, m\rangle = E_n(\widehat{U}(R)|n, j, m\rangle). \quad (3.12)$$

Si é visto, perció, che sotto la trasformazione operata da $\widehat{U}(R)$, i ket della base $|n, j, m\rangle$ si trasformano in stati con la medesima energia E_n .

Si consideri, adesso, l'azione dell'operatore \mathbf{J}^2 sullo stato ruotato e non:

$$\mathbf{J}^2|n, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|n, j, m\rangle,$$

$$\mathbf{J}^2 \left[\widehat{U}(R)|n, j, m\rangle \right] = \widehat{U}(R) \left[\mathbf{J}^2|n, j, m\rangle \right] = j(j+1)\hbar^2 \left[\widehat{U}(R)|n, j, m\rangle \right].$$

I due ket $|n, j, m\rangle$ e $\widehat{U}(R)|n, j, m\rangle$ sono entrambi autoket di \mathbf{J}^2 con autovalore $j(j+1)\hbar^2$.

Si é dimostrato che le rotazioni non possono modificare il valore di n e j degli autoket simultanei di \widehat{H} , $\widehat{\mathbf{J}}^2$, \widehat{J}_3 . Il valore di m viene invece modificato ed é opportuno riscrivere la base nel seguente modo:

$$\widehat{U}(R)|n, j, m\rangle = |\psi_m\rangle.$$

Si può esprimere tale termine usando la completezza degli $|n, j, m\rangle$ espressa dalla 2.27:

$$\begin{aligned} |\psi_m\rangle &= \widehat{U}(R)|n, j, m\rangle = \sum_{m'=-j}^j |n, j, m'\rangle \langle n, j, m' | \widehat{U}(R) |n, j, m\rangle = \\ &= \sum_{m'=-j}^j |n, j, m'\rangle D_{m'm}^{(j)}(R); \end{aligned} \quad (3.13)$$

dove i coefficienti $D_{m'm}^{(j)}(R)$ sono definiti nel seguente modo

$$D_{m'm}^{(j)}(R) = \langle j, m' | \widehat{U}(R) |j, m\rangle. \quad (3.14)$$

e non dipendono da n .

Si verifica, quindi, una degenerazione di $2j + 1$ stati con diverso valore di m e stessa energia E_n .

3.4 Elementi della matrice associata dell'operatore di rotazione

Si vogliono ricavare gli elementi della matrice $D(R)$ associati all'operatore di rotazione $\widehat{U}(R)$. Si consideri la formula 3.13:

$$\widehat{U}(R)|j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m' | \widehat{U}(R) |j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle D_{m'm}^{(j)}(R).$$

Si considerino due rotazioni successive R_2, R_1 applicate ad un ket della base $|n, j, m\rangle$ denotato con $|m\rangle$ (i termini n, j non sono più menzionati in quanto non modificati dalle rotazioni). Per le proprietà di gruppo e applicando la 3.13 si ottiene:

$$\begin{aligned} \widehat{U}(R_1 R_2)|m\rangle &= \widehat{U}(R_1)\widehat{U}(R_2)|m\rangle = \widehat{U}(R_1) \sum_{m'} |m'\rangle D_{m'm}(R_2) = \\ &= \sum_{m'} \widehat{U}(R_1)|m'\rangle D_{m'm}(R_2) = \sum_{m'} \left(\sum_{m''} |m''\rangle D_{m''m'}(R_1) \right) D_{m'm}(R_2) = \\ &= \sum_{m''} |m''\rangle \sum_{m'} D_{m''m'}(R_1) D_{m'm}(R_2) = \sum_{m''} |m''\rangle (D(R_1)D(R_2))_{m''m} \\ \widehat{U}(R_1 R_2)|m\rangle &= \sum_{m''} |m''\rangle D_{m''m}(R_1 R_2). \end{aligned}$$

Eguagliando le due espressioni precedenti si ottiene la seguente uguaglianza

$$D(R_1 R_2) = D(R_1) D(R_2) \quad (3.15)$$

la quale dimostra che la matrice $D(R)$ di elementi $D_{m'm}(R)$ corrisponde a una rappresentazione di $SO(3)$. Gli elementi della matrice $D(R)$ sono definiti dalla 3.4:

$$D_{m'm}^{(j)}(R) = \langle j, m' | \widehat{U}(R) | j, m \rangle.$$

Utilizzando la parametrizzazione asse angolo essi possono essere riscritti come segue:

$$D_{m'm}^{(j)}(R) = \langle j, m' | \exp \left(-\frac{i \widehat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n} \varphi}{\hbar} \right) | j, m \rangle. \quad (3.16)$$

Scegliendo un'opportuna base $|j, m\rangle$ del momento angolare, la matrice che rappresenta l'operatore unitario $\widehat{U}(R)$ può essere suddivisa in un numero infinito di matrici $D^{(j)}(R)$ di ordine $2j + 1$ i cui elementi sono $D_{m'm}^{(j)}(R)$; essa assume una forma diagonalizzata a blocchi del tipo:

$$D(R) = \begin{pmatrix} D^{(j_1)}(R) & 0 & \cdots \\ 0 & D^{(j_2)}(R) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

Le matrici di rotazione $D^{(j)}(R)$, caratterizzate da un certo j , formano un gruppo e sono chiamate la *rappresentazione irriducibile* dell'operatore di rotazione $\widehat{U}(R)$.

Gli elementi della matrice possono essere riscritti anche in termini di angoli di Eulero:

$$\begin{aligned} D_{m',m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle j, m' | \exp \left(-\frac{i \widehat{J}_3 \alpha}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{i \widehat{J}_2 \beta}{\hbar} \right) \exp \left(-\frac{i \widehat{J}_3 \gamma}{\hbar} \right) | j, m \rangle = \\ &= e^{-i(m'\alpha + m\gamma)} \langle j, m' | \exp \left(-\frac{i \widehat{J}_2 \beta}{\hbar} \right) | j, m \rangle. \end{aligned} \quad (3.18)$$

L'ultima uguaglianza segue dal fatto che gli stati $|j, m\rangle$ sono autoket di \widehat{J}_3 . Non resta che determinare i termini della matrice $d^{(j)}(\beta)$ i cui elementi sono:

$$d_{m',m}^{(j)}(\beta) = \langle j, m' | \exp \left(-\frac{i \widehat{J}_2 \beta}{\hbar} \right) | j, m \rangle. \quad (3.19)$$

Si adotta la convenzione di scrivere le matrici $D_{m'm}^{(j)}(R)$ di ordine $2j + 1$ posizionando i valori massimi di m' ed m ($m' = m = j$) nella prima riga e prima colonna e ordinando gli altri valori in modo decrescente da sinistra a destra e dall'alto verso il basso.

Si vogliono ora calcolare tali matrici per i valori di $j = \frac{1}{2}$ e $j = 1$.

Determinazione della matrice $D^{(\frac{1}{2})}(\alpha, \beta, \gamma)$

Si consideri il caso $j = \frac{1}{2}$. Poiché gli operatori $\widehat{J}_1, \widehat{J}_2, \widehat{J}_3$ non commutano, le matrici che li rappresentano possono essere espressi in una loro base arbitraria. Si scelga la base di \widehat{J}_3 . In tale base le matrici corrispondenti a $\widehat{J}_+, \widehat{J}_-$ sono:

$$J_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad J_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Applicando la 2.31 la matrice che rappresenta \widehat{J}_2 risulta:

$$J_2 = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) = \frac{\hbar}{2i} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \frac{\hbar}{2i} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_2,$$

ove σ_2 é la seconda matrice di Pauli. Dalla 3.19 si ricava:

$$d^{(\frac{1}{2})}(\beta) = \exp\left(-\frac{iJ_2\beta}{\hbar}\right) = \exp\left(\begin{array}{cc} 0 & \frac{\beta}{2} \\ -\frac{\beta}{2} & 0 \end{array}\right).$$

Per sviluppare l'esponenziale si noti che denotando con $k^{(\frac{1}{2})} = -i\frac{J_2}{\hbar}$ e indicando con l é un numero naturale (zero compreso) si ha

$$k^{(\frac{1}{2})2l} = 2^{-2l}(-1)^l \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.20)$$

$$k^{(\frac{1}{2})2l+1} = 2^{-(2l+1)}(-1)^l \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

In generale:

$$\begin{aligned} \exp\left(\beta k^{(\frac{1}{2})}\right) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^l}{l!} k^{(\frac{1}{2})l} = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^{2l}}{(2l)!} k^{(\frac{1}{2})2l} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^{(2l+1)}}{(2l+1)!} k^{(\frac{1}{2})2l+1} = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^{2l}}{(2l)!} \frac{(-1)^l}{2^{2l}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^{(2l+1)}}{(2l+1)!} \frac{(-1)^l}{2^{(2l+1)}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \quad (3.22) \\ &= \cos \frac{\beta}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \sin \frac{\beta}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & \sin \frac{\beta}{2} \\ -\sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

In conclusione:

$$d^{\frac{1}{2}}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & \sin \frac{\beta}{2} \\ -\sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

$$D^{\frac{1}{2}}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i\gamma/2} & -e^{-i\alpha/2} \sin \frac{\beta}{2} e^{i\gamma/2} \\ e^{i\alpha/2} \sin \frac{\beta}{2} e^{-i\gamma/2} & e^{i\alpha/2} \cos \frac{\beta}{2} e^{i\gamma/2} \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Determinazione della matrice $D^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma)$

Si consideri il caso $j = 1$. Procedendo in modo analogo al caso precedente si ha che le matrici corrispondenti a \hat{J}_+ , \hat{J}_- sono

$$J_+ = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad J_- = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Applicando di nuovo la 2.31 la matrice che rappresenta \hat{J}_2 é:

$$J_2 = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{\hbar\sqrt{2}}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Si denota $k^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}J_2$:

$$k^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -2^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 0 & -2^{-\frac{1}{2}} \\ 0 & 2^{-\frac{1}{2}} & 0 \end{pmatrix},$$

Quindi

$$d^1(\beta) = \exp(\beta k^{(1)}) = \exp \begin{pmatrix} 0 & -2^{-\frac{1}{2}}\beta & 0 \\ 2^{-\frac{1}{2}}\beta & 0 & -2^{-\frac{1}{2}}\beta \\ 0 & 2^{-\frac{1}{2}}\beta & 0 \end{pmatrix}.$$

In modo analogo al caso precedente si può sviluppare l'esponenziale nel seguente modo:

$$k^{(1)2l} = 2^{-1}(-1)^l \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

$$k^{(1)2l+1} = 2^{-\frac{1}{2}}(-1)^l \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Perció

$$\begin{aligned}
d^1(\beta) &= \exp(\beta k^{(1)}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^l}{l!} k^{(1)l} = \\
&= I_3 + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^{2l}}{(2l)!} k^{(1)2l} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^{(2l+1)}}{(2l+1)!} k^{(1)2l+1} = \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^{2l}}{(2l)!} \frac{(-1)^l}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\beta^{(2l+1)}}{(2l+1)!} \frac{(-1)^l}{2^{\frac{1}{2}}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{(\cos \beta - 1)}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\sin \beta}{2^{\frac{1}{2}}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} (1 + \cos \beta)/2 & -\sin \beta/2^{\frac{1}{2}} & (1 - \cos \beta)/2 \\ \sin \beta/2^{\frac{1}{2}} & \cos \beta & -\sin \beta/2^{\frac{1}{2}} \\ (1 - \cos \beta)/2 & \sin \beta/2^{\frac{1}{2}} & (1 + \cos \beta)/2 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

In conclusione:

$$d^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} (1 + \cos \beta)/2 & -\sin \beta/2^{\frac{1}{2}} & (1 - \cos \beta)/2 \\ \sin \beta/2^{\frac{1}{2}} & \cos \beta & -\sin \beta/2^{\frac{1}{2}} \\ (1 - \cos \beta)/2 & \sin \beta/2^{\frac{1}{2}} & (1 + \cos \beta)/2 \end{pmatrix}.$$

Il calcolo di $d^{(j)}(\beta)$ attraverso la metodologia appena utilizzata risulta troppo elaborato per j maggiori di 1, vengono in tal caso applicate altre tecniche, che, però non vengono qui riportate.

3.4.1 Proprietá delle matrici $D^{(j)}(R)$

1. Tutte le matrici $D^{(j)}(R)$ sono unitarie, esse perciò soddisfano le relazioni:

$$D^{(j)\dagger}(R) = D^{(j)-1}(R). \quad (3.27)$$

2. Il determinante di tutte le matrici $D^{(j)}(R)$ é pari a 1. Infatti utilizzando la parametrizzazione asse angolo si ha:

$$D^{(j)}(R_{\hat{n}}(\varphi)) = \det D^{(j)}(RR_3(\varphi)R^{-1}) = \det D^{(j)}(R_3(\varphi)), \quad (3.28)$$

poiché nella base canonica la matrice $D^{(j)}(R_3(\varphi))$ é diagonale il suo determinante vale:

$$\det D^{(j)}(R_3(\varphi)) = \prod_{m=-j}^j e^{-im\varphi} = 1 \Rightarrow \det D^{(j)}(R_{\hat{n}}(\varphi)) = 1. \quad (3.29)$$

3. Si può dimostrare che tutte le matrici $d^{(j)}(\beta)$ sono ad elementi reali. (DIM?) Si ha, quindi:

$$d^{(j)-1}(\beta) = d^{(j)}(-\beta) = d^{(j)T}(\beta). \quad (3.30)$$

4. Considerando che la matrice J_3 ha elementi reali, si può esprimere il complesso coniugato di $D^{(j)}(R)$ nel seguente modo:

$$D^{(j)*}(R_3(\varphi)) = D^{(j)*}(e^{-i\varphi J_3}) = D^{(j)}(R_3(-\varphi)) = D^{(j)}(R_2(\pi)R_3(\varphi)R_2(-\pi)); \quad (3.31)$$

inoltre si ha:

$$D^{(j)*}(R_2(\varphi)) = D^{(j)}(R_2(\varphi)) = D^{(j)}(R_2(\pi)R_2(\varphi)R_2(-\pi)). \quad (3.32)$$

Indicando con Y la matrice

$$Y \equiv D^{(j)}(R_2(\pi)), \quad Y_{m'm} = \delta_{(m')(-m)}^{j-m} \quad (3.33)$$

e ricordando che una generica rotazione R può essere espressa in termini di angoli di Eulero come

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_3(\alpha)R_2(\beta)R_3(\gamma), \quad (3.34)$$

si deduce che

$$D^*(\alpha, \beta, \gamma) = YD(\alpha, \beta, \gamma)Y^{-1}. \quad (3.35)$$

5. Dalle proprietà precedenti è facile dimostrare che le matrici $d^{(j)}(\beta)$ soddisfano le seguenti relazioni di simmetria:

$$d^{(j)}(\beta)_{m'm} = d^{(j)}(-\beta)_{mm'} = d^{(j)}(\pi - \beta)_{(-m')(-m)}(-1)^{j-m'} = d^{(j)}(\beta)_{(-m')(-m)}(-1)^{m'-m}. \quad (3.36)$$

3.5 Potenziali a simmetria sferica

Si vuole analizzare il caso di un particolare sistema il quale presenta una simmetria di rotazione. La sua hamiltoniana è espressa da

$$H = H_0 + V(\mathbf{x}), \quad (3.37)$$

ove H_0 rappresenta l'hamiltoniana di una particella libera e $V(\mathbf{x})$ il suo potenziale. Un potenziale $V(\mathbf{x})$ è definito a simmetria sferica se non dipende dalla direzione di \mathbf{x} , ma soltanto dalla sua distanza dall'origine:

$$V(\mathbf{x}) \rightarrow V(r), \quad r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}.$$

Ogni qualvolta $V(\mathbf{x})$ abbia simmetria sferica, anche il sistema stesso ha simmetria sferica. Per dimostrare ciò non si esprime piú la posizione di un punto attraverso un sistema di riferimento cartesiano, ma utilizzandone uno in coordinate sferiche, le quali sono rappresentate in figura 3.1. Esse sono definite come:

$$\begin{aligned}x_1(r, \theta, \varphi) &= r \sin \theta \cos \varphi, \\x_2(r, \theta, \varphi) &= r \sin \theta \sin \varphi, \\x_3(r, \theta, \varphi) &= r \cos \theta.\end{aligned}\tag{3.38}$$

I versori del nuovo sistema di riferimento sono:

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_r &= (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \\ \mathbf{e}_\theta &= (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta), \\ \mathbf{e}_\varphi &= (\sin \varphi, \cos \varphi, 0).\end{aligned}\tag{3.39}$$

É utile ricavare le coordinate sferiche in termini di coordinate cartesiane:

$$\begin{aligned}r(x_1, x_2, x_3) &= |x| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} \in (0, \infty), \\ \theta(x_1, x_2, x_3) &= \arccos(x_3/|x|) \in [0, \pi], \\ \varphi(x_1, x_2, x_3) &= \arctan(x_1, x_2) \in (\pi, \pi].\end{aligned}\tag{3.40}$$

Gli operatori $\widehat{\mathbf{L}}, \widehat{\mathbf{L}}^2$ possono essere espressi in coordinate sferiche come segue:

$$\widehat{\mathbf{L}} = -i\hbar \mathbf{x} \times \nabla = -i\hbar \left(\mathbf{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{e}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right); \tag{3.41}$$

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right). \tag{3.42}$$

Gli autostati simultanei di $\widehat{\mathbf{L}}, \widehat{\mathbf{L}}^2$, nelle stesse coordinate, sono espressi dalle armoniche sferiche $Y_l^m(\theta, \varphi)$:

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi), \tag{3.43}$$

$$\widehat{\mathbf{L}}_3 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi). \tag{3.44}$$

Le armoniche sferiche $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sono solitamente definite come segue (nei testi le definizioni possono differire di una fase):

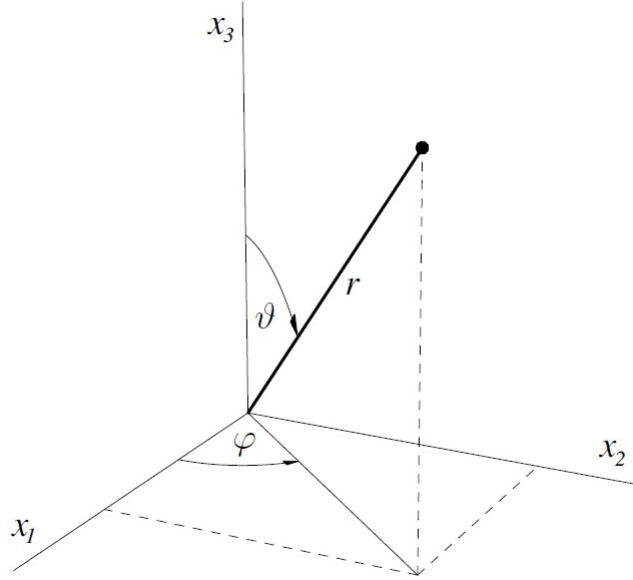


Figura 3.1: In figura sono rappresentate le coordinate sferiche in \mathbb{R}^3 . Invece di specificare la posizione di un vettore \mathbf{x} attraverso le sue coordinate cartesiane x_1, x_2, x_3 si utilizzano le coordinate sferiche r, θ, φ .

$$Y_m^l(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta), \quad 0 \leq m \leq l; \quad (3.45)$$

$$Y_m^l(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{-m}^l(\theta, \varphi), \quad -l \leq m \leq 0;$$

Le funzioni $P_l^m(z)$ sono le funzioni di Legendre associate:

$$P_l^{|m|}(z) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-z^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2-1)^l, \quad -1 \leq z \leq 1, \quad 0 \leq m \leq l. \quad (3.46)$$

La funzione $P_l^0(z)$ viene chiamata polinomio di Legendre di grado l .

Poiché l'operatore $\widehat{\mathbf{L}}$ coinvolge derivate rispetto alle sole variabili angolari φ, θ e l'operatore $\widehat{V}(r)$ dipende dalla sola variabile radiale, vale la seguente legge di commutazione:

$$[\widehat{\mathbf{L}}, \widehat{V}(R)] = 0. \quad (3.47)$$

Il momento angolare, inoltre, commuta con l'energia cinetica e di conseguenza con l'hamiltoniana del sistema:

$$[\widehat{\mathbf{L}}, \widehat{H}] = 0. \quad (3.48)$$

Si é dimostrato, perciò, che in presenza di un potenziale a simmetria sferica il sistema é invariante per rotazioni.

Bibliografia

- [1] Michael Artin “*Algebra*”, Prentice Hall 1991;
- [2] Andrew Baker “*Matrix Groups - An Introduction to Lie Group Theory*”, Springer 2002;
- [3] Wu-Ki Tung “*Group Theory in Physics*”, World Scientific 1985;
- [4] J.J. Sakurai, Jim Napolitano “*Modern Quantum Mechanics*”, Pearson;
- [5] Prof. Roberto Catenacci, Università degli Studi del Piemonte Orientale “Amedeo Avogadro” “*Appunti su alcune classi importanti di matrici e gruppi di matrici*”;
- [6] Dr. Jasper van Wezel, University of Bristol “*Quantum Mechanics Lecture Notes*”; 2013
- [7] Masud Chaichian, Rolf Hagedorn “*Symmetries in Quantum Mechanics - From Angular Momentum to Super Symmetries*”;
- [8] Iacopo Borsi, Dipartimento di Matematica “Dini” Università di Firenze “*Lezioni di Metodi Matematici per la Fisica*”; 2008
- [9] Bernt Thaller, “*Advanced Visual Quantum Mechanics*”; Springer 2005