

Questa parte delle lezioni segue il libro Cohen-Tannoudjim, Diu, Laloë, Quantum Mechanics.

1 Ripasso di fisica classica

Guardiamo un attimo il moto di un punto su una circonferenza. Questo puo' essere descritto da un angolo θ , e $dr = R d\theta$ (con R fissato). La velocita' e'

$$v \equiv \frac{dr}{dt} = R \frac{d\theta}{dt} \equiv R\omega$$

Il momento angolare e' invece definito come

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

per cui $|L| = R^2\omega$. Possiamo quindi esprimere l' energia cinetica di un punto che ruota intorno ad una circonferenza come

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mR^2\omega^2 = \frac{1}{2mR^2}L^2$$

Generalizziamo ora al moto su una sfera. In questo caso la posizione della particella e' fissata da (R, θ, ϕ) . Scomponiamo lo spostamento nelle due sue componenti $Rd\theta$ e $R \sin \theta d\phi$, troviamo che l' energia cinetica e'

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mR^2 \left[\left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \left(\sin \theta \frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right]$$

Il corrispondente momento angolare, $\vec{r} \times \vec{p}$ ha anche esso due componenti. Possiamo scrivere per il suo modulo quadro

$$L^2 = m^2 R^4 \left[\left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \left(\sin \theta \frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right]$$

per cui ancora una volta

$$K = \frac{1}{2mR^2}L^2$$

Infine ricordiamo che se calcoliamo il prodotto vettoriale per \vec{r} , l' equazione di Newton $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$ si trasforma in

$$\vec{\tau} \equiv \vec{r} \times \vec{F} = \vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d\vec{L}}{dt}$$

cioe' il momento della forza e' la variazione del momento angolare. Se $\vec{\tau} = 0$, \vec{L} si conserva.

2 Considerazioni

Una molecola rigida biatomica, nel sistema di riferimento del centro di massa si comporta esattamente come un punto che si muove su una sfera. Quindi, l' analogo della particella libera che abbiamo studiato, quando emerge una limitazione a muoversi su una sfera, si trasforma nel problema

$$H = K = \frac{L^2}{2mR^2} = \frac{L^2}{2I}$$

Differentemente dal caso delle traslazioni, qui la posizione della particella e' definita da due angoli, cioe' da due quantita' definite tra 0 e π e tra 0 e 2π . Quindi, essendo confinate, ci aspettiamo che diano i fenomeni tipici del confinamento. Stati discreti in energia ed energia dello stato fondamentale diversa da zero.

3 Introduzione

Lo studio del momento angolare in meccanica quantistica e' un problema estremamente importante, ed i risultati che stiamo per stabilire sono usati in molti campi della fisica: la classificazione degli spettri atomici, molecolari e nucleari, lo spin delle particelle elementari, il magnetismo, ecc ... Conosciamo gia' l'importante ruolo svolto dal momento angolare in meccanica classica; il momento angolare totale di un sistema fisico isolato e' una costante del moto. Inoltre, questo e' vero anche in alcuni casi in cui il sistema non e' isolato. Ad esempio, se una particella puntiforme P, di massa m, si sta muovendo in un potenziale centrale (un potenziale che dipende solo dalla distanza tra P e un punto fisso O), la forza a cui P e' sottoposta e' sempre diretta verso O. Il suo momento rispetto a O e' di conseguenza zero, e il momento angolare \mathbf{L} soddisfa

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = 0$$

cioe' si conserva. Questo fatto ha importanti conseguenze: il movimento della particella e' limitato ad un piano (il piano passante per O e perpendicolare al momento angolare); inoltre, il moto obbedisce alla legge della velocita' areale costante (seconda legge di Keplero). Tutte queste proprieta'hanno i loro equivalenti in meccanica quantistica. Con il momento angolare di un sistema classico e' associato un osservabile \mathbf{L} , in realta' un insieme di tre osservabili, L_x , L_y e L_z , che corrispondono alle tre componenti di \mathbf{L} in un sistema di riferimento cartesiano. Se il sistema fisico in studio e' un punto in movimento in un potenziale centrale, vedremo che L_x , L_y e L_z sono costanti del moto, cioe' commutano con la Hamiltoniana che descrive la particella nel potenziale centrale $V(r)$. Questo importante proprieta'semplifica considerevolmente la determinazione e la classificazione degli autostati di H .

Inoltre vedremo che il momento angolare intrinseco di un atomo (spin) puo' assumere solo certi valori discreti. Vedremo che tutti i momenti angolari sono quantizzati in questo

modo. Questo permette di capire il magnetismo atomico, l'effetto Zeeman, ecc ... D'ora in poi, denoteremo per momento angolare orbitale qualsiasi momento angolare che ha un equivalente classico (e con \mathbf{L} , il corrispondente osservabile), e per momento angolare di spin qualsiasi momento angolare intrinseco di un particella elementare (per il quale riserviamo la lettera \mathbf{S}). In un sistema complesso, come un atomo, un nucleo o una molecola, in momento angolare orbitale \mathbf{L} , delle varie particelle elementari che costituiscono il sistema (elettroni, protoni, neutroni, ...) si combinano tra loro e con il momento angolare \mathbf{S} di queste stesse particelle per formare il momento angolare totale \mathbf{J} del sistema. Infine, aggiungiamo che verra' usato anche \mathbf{J} per denotare un momento angolare arbitrario quando non e' necessario specificare se abbiamo a che fare con un momento angolare orbitale, una rotazione o una combinazione di diversi momenti angolari. Prima di iniziare lo studio dei problemi fisici appena menzionati (livelli energetici di una particella in un potenziale centrale, rotazione, effetto Zeeman, somma di momenti angolari, ...), stabiliremo le quantistica proprieta' generale associate a tutti i momenti angolari in meccanica quantistica, qualunque sia la loro natura.

4 Momenti Angulari

Gli osservabili L_x , L_y e L_z associati alle tre componenti del momento angolare possono essere costruiti a partire dalle espressioni classiche

$$\mathcal{L}_x = yp_z - zp_y$$

e simili. Poiche' Y commuta con P_z e Z con P_y non sorgono problemi di simmetrizzazione e dunque

$$L_x = YP_z - ZP_y$$

o in forma vettoriale

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$$

Le regole di commutazione tra le varie componenti di \mathbf{L} sono

$$[L_x, L_y] = [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] = [YP_z, ZP_x] - [YP_z, XP_z] - [ZP_y, ZP_x] + [ZP_y, XP_z] =$$

poiche' YP_z commuta con XP_z e ZP_y commuta con ZP_x ,

$$= [YP_z, ZP_x] + [ZP_y, XP_z] = Y[P_z, Z]P_x + X[Z, P_z]P_y = -i\hbar(YP_x - XP_y) = i\hbar L_z$$

Analoghi calcoli portano alle seguenti regole di commutazione tra le componenti

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

Nel caso di piu' momenti angolari $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{R}_i \times \mathbf{P}_i$ le regole restano immutate. E' possibile mostrare che queste regole di commutazione originano delle proprieta' di invarianza per rotazione. Queste regole possono essere scelte come definizione di un operatore momento angolare, per il quale useremo il simbolo \mathbf{J} .

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y$$

Definiamo anche l' operatore $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$. \mathbf{J}^2 commuta con le componenti di \mathbf{J}

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}] = 0$$

Infatti (ricordando che $[B^2, A] = B[B, A] + [B, A]B$, che si dimostra sommando e sottraendo BAB)

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, J_x] &= [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_x] = [J_y^2 + J_z^2, J_x] = J_y[J_y, J_x] + [J_y, J_x]J_y + J_z[J_z, J_x] + [J_z, J_x]J_z = \\ &= -i\hbar J_x J_z - i\hbar J_z J_y + i\hbar J_z J_y + i\hbar J_y J_z = 0 \end{aligned}$$

Quindi, dalle regole di commutazione impariamo che di un momento angolare e' possibile definire il modulo ed una sua proiezione, ma non contemporaneamente la proiezione lungo due assi.

5 Gli operatori J_+ e J_-

Invece di usare J_x e J_y e' conveniente definire due altri operatori (non Hermitiani)

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad J_- = J_x - iJ_y$$

Questi operatori soddisfano queste regole di commutazione

$$[J_z, J_+] = \hbar J_+ \quad [J_z, J_-] = -\hbar J_- \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad [\mathbf{J}^2, J_+] = [\mathbf{J}^2, J_-] = [\mathbf{J}^2, J_z] = 0$$

Se calcoliamo il prodotto J_+J_- e J_-J_+ troviamo

$$J_+J_- = (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 - i[J_x, J_y] = J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z$$

e

$$J_-J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y] = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z$$

per cui

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

e

$$\mathbf{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2$$

Iniziamo a studiare lo spettro di \mathbf{J}^2 e J_z . \mathbf{J}^2 e' la somma di tre operatori hermitiani e dunque

$$\langle \psi | \mathbf{J}^2 | \psi \rangle = \langle \psi | J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 | \psi \rangle = \|J_x|\psi\rangle\|^2 + \|J_y|\psi\rangle\|^2 + \|J_z|\psi\rangle\|^2 \geq 0$$

Se $|\psi\rangle$ e' una autofunzione, l' espressione precedente ci dice che gli autovalori di \mathbf{J}^2 devono essere non-negativi. Per comodita' indichiamo questo autovalore positivo $\lambda\hbar^2$ con $j(j+1)\hbar^2$, con $j \geq 0$. L' equazione $\lambda = j(j+1)$ ammette due soluzioni $j_{\pm} = (-1 \pm \sqrt{1+4\lambda})/2$, una con j positivo ed una con j negativo. Scegliendo $j \geq 0$ si stabilisce una corrispondenza precisa tra λ e j .

Analogamente, indicheremo con $m\hbar$ gli autovalori di J_z .

Cerchiamo una base comune di \mathbf{J}^2 e J_z risolvendo le due equazioni

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

dove l' indice k ci serve per distinguere eventuali autovettori multipli con lo stesso j e lo stesso m .

Iniziamo con il dimostrare varie relazioni, in analogia con quanto fatto per l' oscillatore armonico. Prima di tutto dimostriamo che $-j \leq m \leq j$. Per farlo consideriamo la norma

$$\|J_+|k, j, m\rangle\|^2 = \langle k, j, m | J_- J_+ | k, j, m \rangle \geq 0 \quad \|J_-|k, j, m\rangle\|^2 = \langle k, j, m | J_+ J_- | k, j, m \rangle \geq 0$$

sostituendo le espressioni trovate precedentemente

$$\langle k, j, m | J_- J_+ | k, j, m \rangle = \langle k, j, m | \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z | k, j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2$$

e analogamente

$$\langle k, j, m | J_+ J_- | k, j, m \rangle = \langle k, j, m | \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z | k, j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2$$

per cui

$$j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1) \geq 0 \quad \text{e} \quad j(j+1) - m(m-1) = (j-m+1)(j+m) \geq 0$$

che danno le due relazioni

$$-(j+1) \leq m \leq j \quad \text{e} \quad -j \leq m \leq j+1$$

che implicano $-j \leq m \leq j$.

Dimostriamo adesso che, chiamato $|k, j, m\rangle$ un autovettore di \mathbf{J}^2 e J_z con autovalori $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$,

- If $m = -j$, $J_-|k, j, -j\rangle = 0$

- If $m > -j$, $J_-|k, j, -j >$ e' un autovettore di \mathbf{J}^2 e J_z con autovalori $j(j+1)\hbar^2$ e $(m-1)\hbar$

Per dimostrarlo, prima di tutto notiamo che il quadrato della norma di $J_-|k, j, -j >$ e' $\hbar^2[j(j+1) - m(m-1)]$, quindi nullo per $m = -j$. Poiche' la norma e' nulla se e solo se il vettore e' un vettore nullo, il fatto che $m = -j$ implica che $J_-|k, j, -j > = 0$.

Analogamente, $J_-|k, j, m > = 0$ implica $m = -j$. Infatti facendo agire J_+ si ottiene

$$\hbar^2[j(j+1) - m^2 + m]|k, j, m > = \hbar^2[(j+m)(j-m+1)]|k, j, m > = 0$$

che ammette come soluzioni $m = -j$ e $m = j+1$. Poiche' questa ultima non e' ammessa (essendo $-j < m < j$) l' unica soluzione e' $m = -j$.

Ora assumiamo $m > -j$. $J_-|k, j, m >$ e' un vettore non nullo, poiche' il suo modulo e' diverso da zero. Ma $J_-|k, j, m >$ e' anche un autovettore di \mathbf{J}^2 e J_z . Infatti poiche' il commutatore $[\mathbf{J}^2, J_-] = 0$,

$$[\mathbf{J}^2, J_-]|k, j, m > = 0 \text{ che implica } \mathbf{J}^2 J_-|k, j, m > = J_- \mathbf{J}^2|k, j, m > = \hbar^2 j(j+1) J_-|k, j, m >$$

e dunque $J_-|k, j, m >$ e' anche un autovettore di \mathbf{J}^2 . Mostriamo che lo e' anche di J_z sempre a partire dal commutatore $[J_z, J_-] = -\hbar J_-$

$$[J_z, J_-]|k, j, m > = -\hbar J_-|k, j, m >$$

e scrivendo esplicitamente il commutatore

$$J_z J_-|k, j, m > - J_- J_z|k, j, m > = -\hbar J_-|k, j, m >$$

$$J_z J_-|k, j, m > = (m-1)\hbar J_-|k, j, m >$$

che mostra che $J_-|k, j, m >$ e' un autovettore di J_z con autovalore $(m-1)\hbar$.

Ripetiamo lo stesso procedimento per J_+ . Possiamo dimostrare che

- If $m = j$, $J_+|k, j, j > = 0$
- If $m < j$, $J_+|k, j, m >$ e' un autovettore di \mathbf{J}^2 e J_z con autovalori $j(j+1)\hbar^2$ e $(m+1)\hbar$

Infatti la norma quadrata di $J_+|k, j, m >$ e' nulla se $m = j$, e dunque $J_+|k, j, j > = 0$. Analogamente se $J_+|k, j, j > = 0$ segue che $m = j$. Sempre come fatto sopra per J_- troviamo che

$$\mathbf{J}^2 J_+|k, j, m > = \hbar^2 j(j+1) J_+|k, j, m >$$

$$J_z J_+|k, j, m > = (m+1)\hbar J_+|k, j, m >$$

5.1 Spettro di \mathbf{J}^2 e J_z

Siamo ora in grado di trovare lo spettro di \mathbf{J}^2 e J_z . Sia $|k, j, m\rangle$ un autovettore non nullo con autovalori $j(j+1)\hbar^2$ e $m\hbar$. Abbiamo visto che $-j \leq m \leq j$. Quindi esiste un intero nullo o positivo p tale che sia possibile soddisfare la relazione $-j \leq m - p < -j + 1$, cioè che $m - p$ stia tra $-j$ e $-j + 1$ (vedi disegno per un caso in cui $j = 2$ e $m = 0.3$).

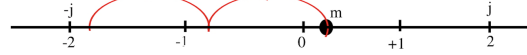


Figure 1:

Consideriamo la serie dei vettori

$$|k, j, m\rangle \quad J_-|k, j, m\rangle \quad J_-J_-|k, j, m\rangle \quad \dots \quad (J_-)^p|k, j, m\rangle$$

per costruzione, tutti questi autovettori sono non nulli. L'applicazione successiva n volte (con $n = 0, 1, \dots, p$) di J_- al vettore $|k, j, m\rangle$ crea un autovettore con autovalore $j(j+1)\hbar^2$ e $(m-n)\hbar$. L'applicazione ulteriore di J_- crea un autovettore per il quale m sarebbe minore di $-j$. Poiché questo è impossibile dobbiamo assumere che

$$m - p = -j$$

Fino a qui non sappiamo ancora se j è intero o reale. Se ripetiamo però lo stesso argomento per J_+ arriviamo in modo analogo, definendo un intero q analogo a p alla relazione

$$m + q = j$$

Se eliminiamo da queste ultime due relazioni m troviamo

$$q + p = 2j$$

e poiché q e p sono interi, j può solo assumere valori interi o semi-interi. Se dunque \mathbf{J} è un momento angolare, i soli possibili valori di j sono $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ e, per ogni valore di j , i possibili $(2j+1)$ valori di m sono $-j, -j-1, \dots, 0, \dots, j-1, j$.

6 Rappresentazione matriciale degli operatori momento angolare

Tecnicamente dunque, per ogni k e j esistono $2j+1$ stati, individuati dall'autovalore m . Formalmente la rappresentazione matriciale di un operatore momento angolare ha una

forma diagonale a blocchi, ogni blocco corrispondente ad un valore di k e j di dimensione $(2j+1) \times (2j+1)$

	$\mathcal{E}(k, j)$	$\mathcal{E}(k, j')$	$\mathcal{E}(k', j)$	
	<i>matrix</i>			
$\mathcal{E}(k, j)$	$(2j+1)(2j+1)$	0	0
$\mathcal{E}(k, j')$	0	<i>matrix</i> $(2j'+1)(2j'+1)$	0
$\mathcal{E}(k', j)$	0	0	<i>matrix</i> $(2j+1)(2j+1)$

L' azione degli operatori sugli elementi della base e' come abbiamo visto

$$\begin{aligned}
J_z |k, j, m\rangle &= m\hbar |k, j, m\rangle \\
J_+ |k, j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) + m(m+1)} |k, j, m+1\rangle \\
J_- |k, j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |k, j, m-1\rangle
\end{aligned}$$

cosi' che

$$\langle k, j, m | J_z | k', j', m' \rangle = m\hbar \delta_{m, m'} \delta_{j, j'} \delta_{k, k'}$$

e

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

Esaminiamo il caso $j = 1/2$

$$\begin{aligned}
J_z^{1/2} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
J_+^{1/2} &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & J_-^{1/2} &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
J_x^{1/2} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & J_y^{1/2} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

ed infine

$$(\mathbf{J}^2)^{1/2} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Nel caso $j = 1$

$$J_z^1 = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

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

così che

$$J_x^1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad J_y^1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

ed infine

$$(\mathbf{J}^2)^1 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

7 Momento angolare orbitale. Rappresentazione $|\mathbf{r}\rangle$

Nella rappresentazione $|\mathbf{r}\rangle$

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Cambiando dal sistema cartesiano al sistema sferico, i tre operatori diventano

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

e, rispettivamente

$$\mathbf{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

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

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

La autofunzioni devono dunque soddisfare

$$-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi(r, \theta, \phi) = l(l+1) \psi(r, \theta, \phi)$$

e

$$-i \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(r, \theta, \phi) = m \psi(r, \theta, \phi)$$

Visto che r non compare nelle equazioni, denotiamo con $Y_l^m(\theta, \phi)$ le autofunzioni di L^2 e L_z

$$\mathbf{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) \quad L_z Y_l^m(\theta, \phi) = m \hbar Y_l^m(\theta, \phi)$$

così che poi $\psi(r, \theta, \phi) = f(r) Y_l^m(\theta, \phi)$. Per comodità normalizzeremo indipendentemente la parte in r e la parte in θ e ϕ .

Se ci focalizziamo sulla soluzione di L_z vediamo subito che

$$Y_l^m(\theta, \phi) = F_l^m(\theta) e^{im\phi}$$

Per la continuità della funzione d'onda nello spazio deve essere $e^{im2\pi} = 1$, che impone che m sia un intero (e di conseguenza anche l). Quindi, tutti i momenti angolari orbitali (per distinguerli da quelli di spin) sono caratterizzati da valori di l interi.

Per trovare la funzione $F_l^m(\theta)$ utilizziamo la condizione $L_+ Y_l^l(\theta, \phi) = 0$

$$\hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) F_l^l(\theta) e^{il\phi} = 0$$

$$\left(\frac{d}{d\theta} - l \cot \theta \right) F_l^l(\theta) = 0$$

da cui

$$\frac{dF_l^l}{F_l^l} = l \frac{\cos \theta}{\sin \theta} d\theta \quad d \ln F_l^l = d \ln \sin \theta^l$$

da cui $F_l^l = c_l \sin \theta^l$ e $Y_l^l(\theta, \phi) = c_l e^{il\phi} \sin \theta^l$. Il coefficiente c_l può essere determinato imponendo la normalizzazione. Si trova così

$$c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

L'applicazione successiva di L_- ci consente di trovare tutte le altre autofunzioni.

7.1 Normalizzazione

Come esempio di un prodotto scalare guardiamo la normalizzazione di $Y_l^l(\theta, \phi)$

$$\int_0^\pi (c_l e^{il\phi} \sin \theta^l)^* c_l e^{il\phi} \sin \theta^l \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

$$2\pi |c_l|^2 \int_0^\pi \sin \theta^{2l+1} d\theta = -2\pi |c_l|^2 \int_0^\pi (1 - \cos \theta)^l d \cos \theta = 2\pi |c_l|^2 \int_{-1}^1 (1 - u^2)^l du = 1$$

Questo integrale puo' essere calcolato per ricorrenza. Definendo $I_l = \int_{-1}^1 (1 - u^2)^l du$,

$$I_l = \int_{-1}^1 (1 - u^2)(1 - u^2)^{l-1} du = I_{l-1} - \int_{-1}^1 u^2(1 - u^2)^{l-1} du = I_{l-1} - \int_{-1}^1 \frac{d(1 - u^2)^l}{du} u du \frac{1}{-2l}$$

$$I_l = I_{l-1} + \frac{1}{2l} \left[(1 - u^2)^l u \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 (1 - u^2)^l du \right] = I_{l-1} - \frac{1}{2l} I_l$$

Dunque

$$I_l = \frac{2l}{2l+1} I_{l-1}$$

e poiche' $I_0 = 2$, troviamo $I_1 = \frac{2}{3} I_0$, $I_2 = \frac{4}{5} I_1 = \frac{4}{5} \frac{2}{3} I_0$, $I_3 = \frac{6}{7} \frac{4}{5} \frac{2}{3} I_0$ e generalizzando

$$I_l = 2 \frac{(2l)!!}{(2l+1)!!} = 2 \frac{2^l l!}{(2l+1)!!} = 2 \frac{2^l l! 2l!!}{(2l+1)!} = \frac{2^{2l+1}}{(2l+1)!}$$

e

$$2\pi |c_l|^2 \frac{2^{2l+1}}{(2l+1)!} = 1 \quad |c_l|^2 = \frac{(2l+1)!}{4\pi 2^{2l}}$$

Scegliendo come fase arbitraria $(-1)^l$, ritroviamo la formula precedentemente scritta

$$c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

7.2 Parita'

Un cambio $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ (oppure $r \rightarrow r$, $\theta \rightarrow \pi - \theta$ e $\phi \rightarrow \pi + \phi$) determina

$$Y_m^l(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^l Y_m^l(\theta, \phi)$$

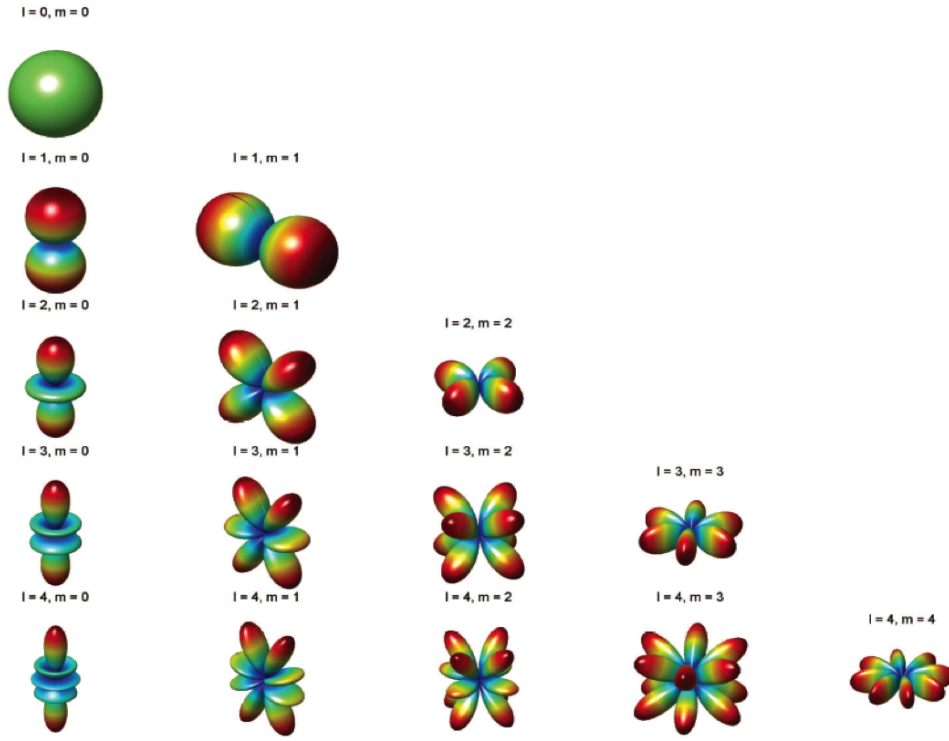
La parita' delle armoniche sferiche e' dunque controllata da l .

7.3 coniugazione complessa

E' anche facile vedere che

$$Y_l^m(\theta, \phi)^* = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \phi)$$

7.4 Come appaiono le armoniche sferiche



8 Considerazioni Fisiche

Abbiamo visto che L_x , L_y e L_z non commutano tra loro. Cerchiamo dunque di capire con che precisione possiamo misurare le tre componenti. I valori medi di L_x e L_y su un autostato sono nulli, essendo L_x e L_y scrivibili come combinazioni lineari di L_+ e L_- .

$$\langle k, l, m | L_x | k, l, m \rangle = \langle k, l, m | L_y | k, l, m \rangle = 0$$

Invece

$$\langle k, l, m | L_x^2 | k, l, m \rangle = \frac{1}{4} \langle k, l, m | L_+^2 + L_-^2 + L_+ L_- + L_- L_+ | k, l, m \rangle$$

Ricordando che $L_+ L_- + L_- L_+ = 2(\mathbf{L}^2 - L_z^2)$,

$$\langle k, l, m | L_x^2 | k, l, m \rangle = \frac{1}{2} [l(l+1) - m^2] \hbar^2$$

Un identico risultato vale per $\langle k, l, m | L_y^2 | k, l, m \rangle$.

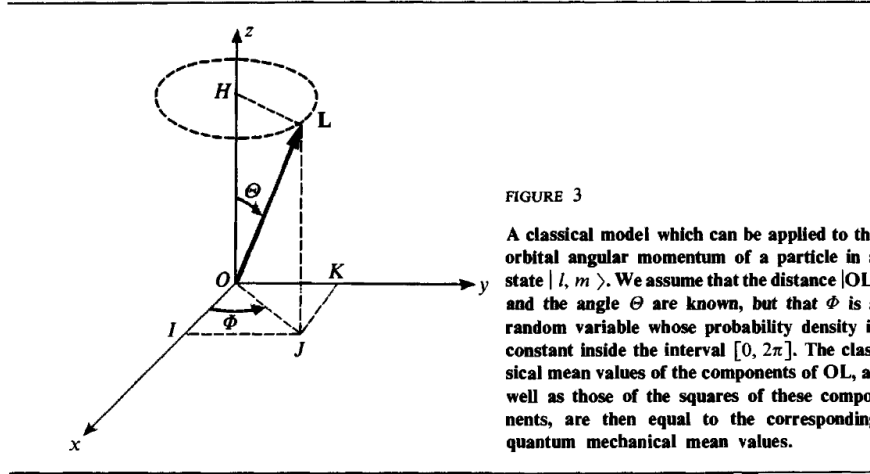


FIGURE 3

A classical model which can be applied to the orbital angular momentum of a particle in a state $|l, m\rangle$. We assume that the distance $|OL|$ and the angle Θ are known, but that Φ is a random variable whose probability density is constant inside the interval $[0, 2\pi]$. The classical mean values of the components of OL , as well as those of the squares of these components, are then equal to the corresponding quantum mechanical mean values.

669

8.1 Analogo Classico

Consideriamo un momento angolare classico, con modulo $\hbar\sqrt{l(l+1)}$. Indichiamo con Θ e Φ gli angoli polari che caratterizzano la sua direzione. Poiché il triangolo OLJ ha un angolo retto in J e $OH = JL$, abbiamo:

$$OJ = \sqrt{OL^2 - OH^2} = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2}$$

Di conseguenza, le componenti di un tale momento angolare classico sarebbero:

$$\bar{OI} = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2} \cos \Phi$$

$$\bar{OK} = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2} \sin \Phi$$

$$\bar{OH} = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2} \cos \Theta = m\hbar$$

Ora supponiamo che $|OL|$ e Θ sono noti e che Φ è una variabile casuale che può assumere qualsiasi valore nell'intervallo $[0, 2\pi]$, tutti questi valori essendo equiprobabili (una variabile casuale uniformemente distribuita). Abbiamo quindi, mediando su ϕ

$$\langle \bar{OI} \rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos \Phi d\Phi = 0$$

$$\langle \bar{OK} \rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin \Phi d\Phi = 0$$

Inoltre

$$\langle \bar{O}I^2 \rangle = \hbar^2[l(l+1) - m^2] \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^2 \Phi d\Phi = \frac{1}{2} \hbar^2[l(l+1) - m^2]$$

e, allo stesso modo:

$$\langle \bar{O}K^2 \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2[l(l+1) - m^2]$$

Questi valori medi sono identici a quelli che abbiamo trovato con il calcolo esatto quantistico. Di conseguenza, il momento angolare di una particella nello stato $|k, l, m\rangle$ si comporta, nella misura in cui i valori medi delle sue componenti e dei loro quadrati sono interessati, come un classico momento angolare di magnitudine $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ avente una proiezione $m\hbar$ lungo Oz , ma per il quale Φ e' una variabile casuale distribuita uniformemente tra 0 e 2π . Certo, questa immagine deve essere usata con attenzione: abbiamo mostrato per tutto questo capitolo quanto le proprieta' meccaniche quantistiche della momento angolare differiscono dalle loro proprieta' classiche. In particolare, dobbiamo sottolineare il fatto che una misura individuale di L_x o L_y su una particella nello stato $|k, l, m\rangle$ non puo' fornire un valore arbitrario tra $-\hbar\sqrt{l(l+1) - m^2}$ e $\hbar\sqrt{l(l+1) - m^2}$ come il modello precedente potrebbe portarci a credere. Gli unici risultati possibili sono gli autovalori di L_x o L_y , cioe' uno dei $2l+1$ valori $l\hbar, (l-1)\hbar, \dots, -l\hbar$.

9 Rotatore rigido: molecola biatomica eteronucleare

L' hamiltoniana di una molecola biatomica rigida, con momento di inerzia mr_e^2 e'

$$H = \frac{L^2}{2mr_e^2}$$

Dunque le autofunzioni di H coincidono con le armoniche sferiche. Gli autovalori possibili sono dunque

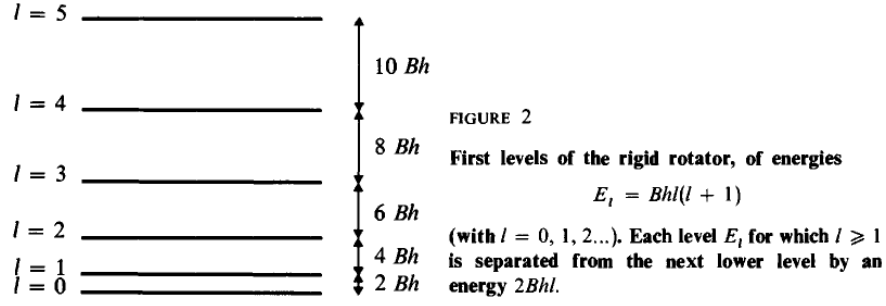
$$E_l = \frac{\hbar^2}{2mr_e^2} l(l+1)$$

con degenerazione $2l+1$. La separazione tra due livelli successivi e' dunque

$$E_l - E_{l-1} = \frac{\hbar^2}{2mr_e^2} (l^2 + l - l^2 + l) = 2l \frac{\hbar^2}{2mr_e^2} \equiv 2lB\hbar$$

9.1 Studio dell' osservabile Z

Studiamo la proiezione dell' asse molecolare su una direzione arbitraria che scegliamo come asse z attraverso il calcolo di $\langle Z(t) \rangle$. La funzione d' onda in generale sara' scrivibile



come

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{l,m} |l, m\rangle e^{-iE_l t/\hbar}$$

ed il valor medio

$$\langle \psi(t) | Z | \psi(t) \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{l,m}^* \langle l, m | e^{iE_l t/\hbar} Z \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} c_{l',m'} |l', m'\rangle e^{-iE_{l'} t/\hbar}$$

In coordinate sferiche $Z = r_e \cos\theta$. E' possibile mostrare che

$$\cos\theta Y_l^m = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^m + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1}^m$$

quindi, $m = m'$ e $l' = l \pm 1$

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | Z | \psi(t) \rangle &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{l'=0}^{\infty} e^{i(E_l - E_{l'})t/\hbar} c_{l,m}^* c_{l',m} \\ &\langle l, m | \left(\sqrt{\frac{(l'+m+1)(l'-m+1)}{(2l'+1)(2l+3)}} |l'+1, m\rangle + \sqrt{\frac{(l'+m)(l'-m)}{(2l'+1)(2l-1)}} |l'-1, m\rangle \right) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{l'=0}^{\infty} e^{i(E_l - E_{l'})t/\hbar} c_{l,m}^* c_{l',m} \left(\sqrt{\frac{(l'+m+1)(l'-m+1)}{(2l'+1)(2l+3)}} \delta_{l,l'+1} + \sqrt{\frac{(l'+m)(l'-m)}{(2l'+1)(2l-1)}} \delta_{l,l'-1} \right) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{i(E_l - E_{l-1})t/\hbar} c_{l,m}^* c_{l-1,m} \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}} + \\ &\sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{i(E_l - E_{l+1})t/\hbar} c_{l,m}^* c_{l+1,m} \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} = \end{aligned}$$

$$2Re \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{2ilBt} c_{l,m}^* c_{l-1,m} \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}} \right\}$$

cioe' frequenze equispaziate di $2lB$

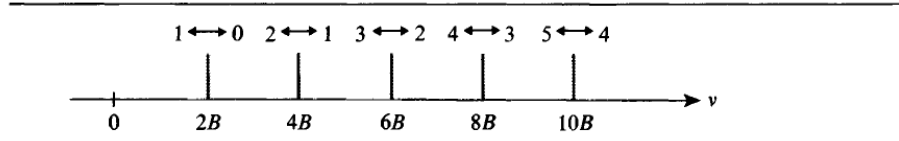


FIGURE 3

Frequencies appearing in the evolution of the mean value of the observable Z . Because of the selection rule $\Delta l = \pm 1$, only the Bohr frequencies $2Bl$ (with $l \geq 1$), associated with two adjacent levels E_l and E_{l-1} in figure 2, are observed.