

Università degli Studi di Roma “La Sapienza”  
Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali

# Teoria dei gruppi in meccanica quantistica

*Laureando: Alessandro Pilloni*

*Relatore: Prof. Massimo Testa*

Anno Accademico 2004/2005

## *Indice*

|  |    |
|--|----|
| Indice.....  | 2  |
| 1. Introduzione - Cenni di teoria dei gruppi.....      | 3  |
| 1.1. I gruppi di matrici.....                          | 3  |
| 1.2. Simmetrie in meccanica quantistica.....           | 4  |
| 1.3. Gruppi e algebre di Lie.....                      | 5  |
| 1.4. Esempi: $SO(2)$ , $SO(3)$ e $SU(2)$ .....         | 6  |
| 1.5. Operatori di Casimir.....                         | 8  |
| 2. L'atomo di idrogeno: degenerazione accidentale..... | 8  |
| 3. L'approccio algebrico: il metodo di Pauli.....      | 11 |
| 4. Il metodo di Fock e le coordinate paraboliche.....  | 12 |
| 5. Il vettore di Lenz come operatore a scala.....      | 17 |
| 6. Il modello di Schwinger e $SO(4)$ .....             | 20 |
| 7. Il gruppo dinamico dell'idrogeno.....               | 22 |
| 8. Conclusioni.....                                    | 26 |
| 9. Bibliografia.....                                   | 26 |
| 10. Appendice.....                                     | 27 |

## 1.1. Introduzione - Cenni di teoria dei gruppi

La simmetria è un attributo fondamentale del mondo fisico che permette di studiare particolari aspetti dei sistemi fisici. L'esistenza di una simmetria può dare origine alla presenza di quantità conservate, o comunque di proprietà che semplificano spesso in maniera determinante il problema da affrontare. La matematica necessaria per descrivere in maniera sintetica le proprietà di simmetria è fornita dalla teoria dei gruppi. Scopo di questa dissertazione è illustrare brevemente le principali caratteristiche della teoria dei gruppi e presentarne l'applicazione ad un problema altamente simmetrico come l'atomo di idrogeno.

Si definisce **gruppo** un insieme di elementi  $A, B, C, \dots$  dotati di un'operazione  $(\cdot)$  che soddisfi le seguenti proprietà:

1. Chiusura: il prodotto di due elementi del gruppo appartiene ancora al gruppo
2. Associatività:  $A \cdot (B \cdot C) = (A \cdot B) \cdot C$
3. Esistenza elemento neutro: esiste un elemento  $I$  tale che  $A \cdot I = I \cdot A = A$
4. Esistenza elemento inverso: per ogni  $A$  esiste un  $A^{-1}$  tale che  $A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = I$

Se in aggiunta, vale la proprietà commutativa ( $A \cdot B = B \cdot A$ ), il gruppo si dice **abeliano**. Esempi semplici di gruppi sono i numeri relativi sotto addizione  $\mathbf{Z}(+)$ , i numeri reali privati dello zero sotto moltiplicazione  $\mathbf{R}(\cdot)$ .

Un sottogruppo  $sg$  di un gruppo  $g$  si dice invariante se  $sg \cdot g = g \cdot sg$ ; un gruppo si dice **semplice** se non ammette sottogruppi invarianti non banali (il sottogruppo che contiene la sola identità è sempre invariante); si dice **semisemplice** se ammette solo sottogruppi non abeliani.

## 1.2. I gruppi di matrici

Particolare importanza assumono i gruppi di matrici. Tra le matrici a coefficienti reali  $n \times n$ , il gruppo più grande è il gruppo generale lineare  $GL(n, \mathbf{R})$ , formato da tutte le matrici a determinante diverso da zero. In esso tutti gli  $n^2$  elementi di ciascuna matrice sono indipendenti. La restrizione alle matrici a determinante unitario ci descrive il gruppo speciale lineare  $SL(n, \mathbf{R})$ , che dipende da  $n^2 - 1$  parametri. Un altro sottogruppo importante di  $GL(n, \mathbf{R})$  è il gruppo formato dalle matrici ortogonali (tali che  $M^t = M^{-1}$ ), che costituisce il gruppo ortogonale  $O(n, \mathbf{R})$ . Ora, è noto che il determinante di una matrice ortogonale ha modulo unitario; trattandosi di matrici reali, ciò implica che  $O(n, \mathbf{R})$  ha due componenti disgiunte, rispettivamente con determinante  $+1$  e  $-1$ . La componente a determinante unitario è anch'essa un gruppo, chiamato gruppo speciale ortogonale  $SO(n, \mathbf{R})$ . Una matrice ortogonale deve soddisfare  $n(n-1)/2$  condizioni di ortogonalità fra le colonne, e  $n$

condizioni di normalizzazione. Restano quindi  $n(n-1)/2$  parametri indipendenti. Più in generale, definiamo il gruppo  $O(p,q)$  (rispettivamente  $SO(p,q)$ ) come l'insieme delle matrici che lasciano invariata una forma quadratica diagonale di segnatura  $(p,q)$  del tipo  $\sum_{i=1}^p x_i^2 - \sum_{i=1}^q x_{p+i}^2$  (risp. con la condizione aggiuntiva di determinante unitario). Per fare un esempio, il gruppo  $O(3,1)$  è il gruppo delle trasformazioni di Lorentz che lasciano invariata la metrica  $(x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2$ .

Per quanto riguarda le matrici a coefficienti complessi, partiamo comunque dal gruppo generale lineare complesso  $GL(n,\mathbb{C})$ . Nelle matrici complesse ogni elemento dipende da due parametri reali indipendenti, e dunque ogni matrice complessa è individuata da  $2n^2$  parametri reali. Analogamente,  $SL(n,\mathbb{C})$  dipende da  $2n^2 - 1$  parametri reali. Al posto della nozione di ortogonalità, è più comodo in  $\mathbb{C}$  utilizzare la nozione di unitarietà: definiamo gruppo unitario  $U(n)$  (risp. speciale unitario  $SU(n)$ ) il gruppo delle matrici unitarie, tali che  $M^\dagger = M^{-1}$  (risp. con l'aggiunta del determinante unitario). A differenza del gruppo ortogonale, il gruppo unitario non ha due componenti disconnesse, dato che ogni matrice unitaria ha determinante unimodulare  $e^{i\theta}$ , e quindi è possibile collegare in maniera continua ogni matrice. Ogni matrice unitaria soddisfa  $2 \cdot n(n-1)/2$  condizioni di ortogonalità tra le colonne (sia per la parte reale che per la parte immaginaria), e  $n$  condizioni di normalizzazione, per cui ogni matrice unitaria dipende da  $n^2$  parametri; il determinante unitario richiede una condizione aggiuntiva (per cui le matrici di  $SU(n)$  dipendono da  $n^2 - 1$  parametri reali). Analogamente al caso reale, possiamo definire il gruppo  $U(p,q)$  (risp.  $SU(p,q)$ ) come l'insieme delle matrici che conservano una forma hermitiana del tipo  $\sum_{i=1}^p |z_i|^2 - \sum_{i=1}^q |z_{p+i}|^2$  (risp. con l'aggiunta del determinante unitario).

### 1.3. Simmetrie in meccanica quantistica

In un sistema quantistico, le operazioni di simmetria costituiscono sempre un gruppo. Consideriamo, ad esempio, l'Hamiltoniana di particella libera in una dimensione:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} = -\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2}$$

e consideriamo la funzione d'onda  $\psi(x)$ . Dire che l'Hamiltoniana è simmetrica per traslazioni, vuol dire che  $\langle \psi(x) | \hat{H} | \psi(x) \rangle = \langle \psi(x+a) | \hat{H} | \psi(x+a) \rangle$ . Chiamiamo  $\hat{T}_a$  l'operatore traslazione, tale che  $\hat{T}_a | \psi(x) \rangle = | \psi(x+a) \rangle$ . Dato che vogliamo che la norma del ket sia conservata dall'operazione di simmetria,  $\hat{T}_a$  dovrà essere unitario (cioè  $\hat{T}_a^\dagger = \hat{T}_a^{-1} \equiv \hat{T}_{-a}$ ). Dire che l'Hamiltoniana è simmetrica,

vuol dire che  $\hat{H} = \hat{T}_a^\dagger \hat{H} \hat{T}_a$ , oppure che  $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$ . La presenza di una simmetria implica dunque la presenza di una degenerazione, in quanto stati collegati da un operatore di simmetria (che per definizione commuta con l'Hamiltoniana) hanno la stessa energia. Pensando alle  $\hat{T}_a$  come a operatori unitari, è naturale che formino un gruppo (in quanto sono chiusi rispetto ad una moltiplicazione associativa, esiste la traslazione inversa e la traslazione nulla). In particolare, una traslazione è univocamente identificata dal parametro  $a$ . Questo costituisce il caso più semplice di gruppo di Lie, che andiamo a definire.

### 1.4. Gruppi e algebre di Lie

Un gruppo che può essere parametrizzato in maniera continua e differenziabile con una  $n$ -upla di parametri  $\alpha = \alpha^1 \dots \alpha^n$  si definisce gruppo di Lie. Se i parametri variano in un compatto, il gruppo si dice compatto, altrimenti si dice non compatto. Si può dimostrare che i gruppi di matrici sopra elencati sono anche gruppi di Lie.

Consideriamo il generico gruppo di Lie di operatori  $\hat{U}(\alpha)$ . Nell'intorno dell'identità, è sempre possibile scrivere:

$$\hat{U}(\alpha) = \hat{I} + \sum_j \alpha^j \left( \frac{\partial \hat{U}}{\partial \alpha^j} \right) \Big|_{\alpha=0} + O(\alpha^2) = \hat{I} + \sum_j \alpha^j \hat{X}_j + O(\alpha^2) \quad (1)$$

Gli operatori  $\hat{X}_j$  si dicono generatori del gruppo. Nel caso di gruppi connessi (ovvero di gruppi in cui due qualsiasi elementi sono collegabili da un cammino continuo), è possibile dare un'espressione generale della (1), non valida solo in un intorno dell'identità. Se  $\alpha$  è finito, possiamo scrivere (sommatoria sottointesa sugli indici ripetuti):

$$\hat{U}(\alpha) = \lim_{N \rightarrow \infty} (\hat{U}(\alpha/N))^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{\alpha^j X_j}{N} \right)^N = \exp(\alpha^j X_j) \quad (2)$$

In meccanica quantistica è conveniente imporre che le trasformazioni di simmetria siano unitarie. Per far questo definiamo dei generatori complessi  $Y_i = -iX_i$ , in modo che:

$$\hat{I} - i\alpha^j \hat{Y}_j \approx \hat{U}(\alpha)^{-1} = \hat{U}(\alpha)^\dagger \approx \hat{I} - i\alpha^j \hat{Y}_j^\dagger \Rightarrow \hat{Y}_j = \hat{Y}_j^\dagger \quad (3)$$

Abbiamo così dei generatori hermitiani, che possono costituire delle osservabili fisiche. Ad esempio, i generatori delle rotazioni sono dati dal vettore momento angolare  $\mathbf{J} \equiv (J_x, J_y, J_z)$ , mentre i generatori delle traslazioni dall'impulso  $\mathbf{p}$ . Ora, è noto che le rotazioni possono essere espresse

tramite l'azione di una matrice ortogonale  $3 \times 3$  a determinante unitario; il gruppo che le descrive in meccanica quantistica è dunque, a meno di isomorfismi, il gruppo  $SO(3)$ .

Costruiamo ora la trasformazione (al primo ordine):

$$\hat{U}^{-1}(\mathbf{a}_A)\hat{U}^{-1}(\mathbf{a}_B)\hat{U}(\mathbf{a}_A)\hat{U}(\mathbf{a}_B) = \hat{I} + \sum_{j,k} \alpha_A^j \alpha_B^k (X_j X_k - X_k X_j) + O(\mathbf{a}^2) \approx \hat{I} + \sum_{j,k} \alpha_A^j \alpha_B^k [X_j, X_k]$$

Ma per l'assioma di chiusura del gruppo,

$$\hat{U}^{-1}(\mathbf{a}_A)\hat{U}^{-1}(\mathbf{a}_B)\hat{U}(\mathbf{a}_A)\hat{U}(\mathbf{a}_B) = \hat{I} + \sum_{j,k,l} \alpha_A^j \alpha_B^k c_{jk}^l X_l + O(\mathbf{a}^2)$$

e dunque:

$$[X_j, X_k] = c_{jk}^l X_l \quad (4)$$

Le costanti  $c_{jk}^l$  si chiamano costanti di struttura, e verificano la proprietà di antisimmetria negli indici inferiori  $c_{jk}^l = -c_{kj}^l$  e un'altra diretta conseguenza dell'identità di Jacobi:

$c_{kl}^n c_{mn}^p + c_{lm}^n c_{kn}^p + c_{mk}^n c_{ln}^p = 0$ . La matrice simmetrica  $g_{\mu\nu} = c_{\mu\beta}^\alpha c_{\nu\alpha}^\beta$  si chiama forma di Killing o metrica.

I generatori di un gruppo costituiscono uno spazio vettoriale, e sotto l'operatore di commutazione costituiscono la struttura di **algebra di Lie**. Ogni gruppo di Lie ha una sua algebra di Lie, determinata dai suoi generatori e dalle sue regole di commutazione; l'algebra determina tutte le proprietà locali del gruppo. Due gruppi che hanno algebre isomorfe (come ad esempio  $SO(3)$  e  $SU(2)$ ), sono omomorfi. L'algebra associata ad un gruppo viene indicata di seguito in caratteri gotici minuscoli (l'algebra associata a  $SO(3)$  è dunque  $\mathfrak{so}(3)$ ).

Un'algebra si dice abeliana se tutti i suoi elementi commutano. Si dice rango dell'algebra il massimo numero di generatori che commutano simultaneamente. Un sottospazio  $I$  di un'algebra  $A$  si chiama ideale se  $[i, a] \in I$ . Un'algebra si dice semplice se non ammette ideali non banali, semisemplice se li ammette solo non abeliani.

### 1.5. Esempi: $SO(2)$ , $SO(3)$ e $SU(2)$

Studiamo la struttura di gruppo di  $SO(2)$ , il più piccolo gruppo ortogonale non banale. Esso ha un solo coefficiente indipendente, che può essere parametrizzato da un angolo  $\theta$ . La generica matrice di  $SO(2)$  può essere infatti scritta come:

$$O_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

Vi riconosciamo le matrici delle rotazioni proprie nel piano. Il gruppo ha dunque un solo generatore, che può essere rapidamente individuato da uno sviluppo al primo ordine. Per una rotazione infinitesima, infatti, si ha:

$$O_\varepsilon \approx \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix} = 1 + \varepsilon \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Per cui, il generatore della rotazione è dato dalla matrice antisimmetrica  $A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ . Questo è coerente con la (2), per cui  $O_\theta = e^{\theta A}$ .

Passiamo a  $SO(3)$ . Una rotazione infinitesima nello spazio intorno all'asse  $\hat{n}$  può essere descritta da  $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \varepsilon \hat{n} \times \mathbf{x}$ . Di conseguenza, le matrici che generano le rotazioni rispettivamente attorno agli assi  $x$ ,  $y$  e  $z$  sono:

$$X_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad X_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad X_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5a)$$

O, in termini di matrici hermitiane più utili in meccanica quantistica, definite da  $J_i = iX_i$ :

$$J_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad J_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5b)$$

Le rotazioni possono essere espresse da  $O_\omega = \exp(-i\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{J})$ , dove  $\boldsymbol{\omega}$  è il vettore che ha per modulo l'angolo di rotazione e per direzione l'asse. Notiamo che le matrici sono hermitiane immaginarie pure a traccia nulla, e che tramite l'esponenziale diventano ortogonali a determinante unitario.

L'algebra  $\mathfrak{so}(3)$  è data dalle familiari regole di commutazione  $[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k$ , quelle note del momento angolare. La forma matriciale (5b) è dunque una possibile rappresentazione del momento angolare stesso.

Come ultimo esempio descriviamo il gruppo  $SU(2)$ . Sappiamo che per ogni matrice unitaria  $U$  esiste una matrice hermitiana  $H$  tale che  $U = e^{iH}$ . Nel caso di matrici  $2 \times 2$  una base per le matrici hermitiane è data dalle matrici di Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Queste costituiscono dunque una possibile terna di generatori. L'algebra  $\mathfrak{su}(2)$  è quindi  $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ , o ponendo  $J_k = \sigma_k/2$ ,  $[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k$ . L'algebra  $\mathfrak{su}(2)$  è dunque isomorfa all'algebra  $\mathfrak{so}(3)$ . Questo implica un isomorfismo locale anche tra i gruppi  $SO(3)$  e  $SU(2)$ ; quest'ultimo rappresenta infatti le rotazioni in uno spazio di spinori di spin 1/2, per esempio. I due gruppi non sono comunque globalmente isomorfi: ad ogni elemento di  $SO(3)$  corrispondono due elementi distinti di  $SU(2)$ . È questo il motivo per cui un ket di spin 1/2 cambia segno dopo una rotazione di  $2\pi$  e torna se stesso solo dopo una rotazione di  $4\pi$ .

### 1.6. Operatori di Casimir

Torniamo alla meccanica quantistica e al momento angolare. Come è noto,  $\mathbf{J}^2$  commuta con  $J_x, J_y$  e  $J_z$ . Questo è il caso più semplice di operatore di Casimir. Si dice operatore di Casimir un operatore funzione dei generatori di un'algebra che commuta con tutti gli elementi dell'algebra. Si può dimostrare che ne esistono tanti quanto è il rango dell'algebra, e che uno di essi è sempre la forma quadratica  $g^{\mu\nu}X_\mu X_\nu$ , dove  $g_{\mu\nu}$  è la forma di Killing e  $g^{\alpha\mu}g_{\mu\beta} = \delta_\beta^\alpha$ .

## 2. L'atomo di idrogeno: degenerazione accidentale

Prendiamo in considerazione l'Hamiltoniana di una particella in un campo centrale.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \hat{V}(r)$$

La simmetria sferica è descritta dal ben noto gruppo  $SO(3)$ , avente per generatori gli operatori momento angolare  $\hat{J}_x, \hat{J}_y$  e  $\hat{J}_z$ . Poiché i generatori di una simmetria commutano con l'Hamiltoniana, è possibile scegliere una base ortonormale i cui elementi siano autofunzioni sia dell'energia che, ad esempio, di  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e  $\hat{J}_z$ . Questa è la classica base in coordinate sferiche  $|nlm\rangle$ , tale che

$$\begin{aligned}\hat{H}|nlm\rangle &= E_{n,l}|nlm\rangle \\ \hat{\mathbf{J}}^2|nlm\rangle &= l(l+1)|nlm\rangle \\ \hat{J}_z|nlm\rangle &= m|nlm\rangle\end{aligned}$$

con  $m, l \in \mathbf{Z}$  e  $0 \leq |m| \leq l$

Scegliere questa base corrisponde a separare l'equazione di Schrödinger in un'equazione angolare, che ha come soluzioni le armoniche sferiche  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , e un'equazione radiale dipendente solo dai

numeri quantici  $n$  ed  $l$ . Ad ogni autovalore dell'Hamiltoniana, dunque, corrispondono  $(2l+1)$  autostati degeneri, individuati dal numero quantico  $m$ .

Passiamo ora all'analisi dell'atomo di idrogeno. Il problema diventa dunque

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{\hat{r}}$$

Come noto, lo spettro di questo operatore è dato da  $E_n = -\frac{Z^2\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}$ , indipendente da  $l$ . Per quanto detto prima, ci aspettavamo uno spettro indipendente da  $m$  ma non da  $l$ , in quanto  $l$  compare nell'equazione radiale. La degenerazione in  $l$  aumenta la degenerazione degli autostati all'ordine  $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ . Siamo in presenza di una cosiddetta **simmetria** accidentale o **dinamica**, non dovuta alla geometria del sistema, ma alla particolare forma del potenziale.

Scopo di questa dissertazione sarà l'analisi approfondita di questa degenerazione accidentale, la costruzione di un gruppo di simmetria più generale di  $SO(3)$ , e infine l'ampliamento del gruppo di simmetria ad un gruppo dinamico i cui generatori colleghino fra loro i vari stati dell'atomo di idrogeno.

Nel caso classico, la conservazione del momento angolare impone che il moto della particella si svolge sul piano contenente il centro del potenziale e ortogonale al momento angolare. Nel caso del generico campo centrale, però, l'orbita non è generalmente chiusa. Il fatto che ogni orbita finita sia chiusa è una caratteristica peculiare del campo coulombiano e del campo armonico (in cui  $V(r) \propto r^2$ ). Nel caso coulombiano, questo implica la conservazione di un altro vettore, chiamato

vettore di Runge-Lenz, definito da  $\mathbf{A}_{classico} = \frac{1}{Ze^2\mu}(\mathbf{p} \times \mathbf{L}) - \frac{\mathbf{r}}{r}$ , avente per modulo l'eccentricità

dell'orbita e per direzione quella dell'asse maggiore dell'ellisse. Seguendo la trattazione di Pauli (1926), andiamo a dimostrare che un vettore analogo costituisce una quantità conservata anche nel caso quantistico; il nostro scopo è di aggiungerlo ai generatori del gruppo di simmetria, in modo tale da includere la simmetria dinamica nella nostra trattazione.

Come primo passo, rendiamo hermitiano il vettore precedente: il vettore di Runge-Lenz quantistico sarà dunque (d'ora in poi, per semplicità di notazione, sopprimeremo il simbolo di operatore):

$$\mathbf{A}' = \frac{1}{2Ze^2\mu}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{\mathbf{r}}{r}$$

In notazione di Heisenberg, abbiamo:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \frac{x}{r} &= \left[ \frac{x}{r}, H \right] = \frac{1}{2\mu} \left[ \frac{x}{r}, \mathbf{p}^2 \right] = \frac{1}{2\mu} \left( \mathbf{p} \left[ \frac{x}{r}, \mathbf{p} \right] + \left[ \frac{x}{r}, \mathbf{p} \right] \mathbf{p} \right) = \\
&= \frac{i\hbar}{2\mu} \left( p_x \frac{y^2 + z^2}{r^3} - p_y \frac{xy}{r^3} - p_z \frac{xz}{r^3} + \frac{y^2 + z^2}{r^3} p_x - \frac{xy}{r^3} p_y - \frac{xz}{r^3} p_z \right) = \\
\frac{i\hbar}{2\mu} &\left( (p_x y - p_y x) \frac{y}{r^3} + (p_x z - p_z x) \frac{z}{r^3} + \frac{y}{r^3} (y p_x - x p_y) + \frac{z}{r^3} (z p_x - x p_y) \right) = \\
&= \frac{i\hbar}{2\mu} \left( -L_z \frac{y}{r^3} + L_y \frac{z}{r^3} - \frac{y}{r^3} L_z + \frac{z}{r^3} L_y \right) = \frac{i\hbar}{2\mu} \left( \left( \mathbf{L} \times \frac{\mathbf{r}}{r^3} \right)_x - \left( \frac{\mathbf{r}}{r^3} \times \mathbf{L} \right)_x \right)
\end{aligned}$$

e analogamente per  $y$  e  $z$ . Dunque:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \mathbf{p} &= \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{p}, H] = -Ze^2 \frac{\mathbf{r}}{r^3} \\
\frac{d}{dt} \mathbf{A}' &= \frac{1}{2Ze^2\mu} \left( \frac{d\mathbf{p}}{dt} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} \right) - \frac{1}{2\mu} \left( \left( \mathbf{L} \times \frac{\mathbf{r}}{r^3} \right) - \left( \frac{\mathbf{r}}{r^3} \times \mathbf{L} \right) \right) = \\
&= \frac{1}{2\mu} \left( \left( \mathbf{L} \times \frac{\mathbf{r}}{r^3} \right) - \left( \frac{\mathbf{r}}{r^3} \times \mathbf{L} \right) - \left( \mathbf{L} \times \frac{\mathbf{r}}{r^3} \right) + \left( \frac{\mathbf{r}}{r^3} \times \mathbf{L} \right) \right) = 0
\end{aligned}$$

Si noti che, se consideriamo  $\mathbf{A}'$  come un vettore classico, coincide con  $\mathbf{A}_{classico}$ , e dunque il conto appena svolto è valido anche per il vettore  $\mathbf{A}_{classico}$ , sostituendo al commutatore  $i\hbar$  volte le parentesi di Poisson. Altre importanti proprietà di  $\mathbf{A}'$  sono:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}' \cdot \mathbf{L} &= \mathbf{L} \cdot \mathbf{A}' = 0 \\
[A'_i, L_j] &= i\hbar \varepsilon_{ijk} A'_k \\
[A'_i, A'_j] &= -2i\hbar \frac{H}{\mu Z^2 e^4} \varepsilon_{ijk} L_k \\
\mathbf{A}'^2 &= \frac{2H}{\mu Z^2 e^4} (\mathbf{L}^2 + \hbar^2) + 1
\end{aligned}$$

Notiamo come il vettore di Lenz  $\mathbf{A}'$  abbia regole di commutazione simili a quelle del momento angolare. Per aumentare l'analogia, definiamo un vettore di Lenz normalizzato  $\mathbf{A}$  e studiamone l'algebra.

$$\mathbf{A} = Ze^2 \sqrt{\frac{\mu}{2|H|}} \mathbf{A}' \tag{6}$$

Il modulo è stato posto per rendere positiva l'Hamiltoniana nel caso degli stati legati. A seconda che trattiamo stati legati o stati continui, abbiamo queste tre algebre:

$$\begin{array}{ccc}
E < 0 & E = 0 & E > 0 \\
\begin{array}{l} [L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \\ [L_i, A_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} A_k \\ [A_i, A_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \end{array} & \begin{array}{l} [L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \\ [L_i, A'_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} A'_k \\ [A'_i, A'_j] = 0 \end{array} & \begin{array}{l} [L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \\ [L_i, A_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} A_k \\ [A_i, A_j] = -i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k \end{array} \\
(7a) & (7b) & (7c)
\end{array}$$

Notiamo che la prima è isomorfa a  $\mathfrak{so}(4)$ , la seconda a  $\mathfrak{e}(3)$  (l'algebra euclidea nello spazio, formata dalle tre componenti dell'impulso come generatori delle traslazioni e dalle tre componenti del momento angolare come generatori delle rotazioni), e la terza a  $\mathfrak{so}(3,1)$ , con una componente non compatta legata alla natura continua degli stati non legati. In questa dissertazione ci limiteremo all'analisi degli stati legati.

### 3. L'approccio algebrico: il metodo di Pauli

Utilizzando l'algebra  $\mathfrak{so}(4)$ , andiamo a ricavare lo spettro dell'atomo di idrogeno. Utilizzeremo d'ora in poi unità di misura atomiche, in cui  $e = \mu = \hbar = 1$ . Definiamo altri due operatori vettoriali  $\mathbf{J} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{A})$  e  $\mathbf{J}' = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{A})$ . L'algebra risultante è:

$$\begin{array}{l} [J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k \\ [J'_i, J'_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J'_k \\ [J_i, J'_j] = 0 \end{array} \quad (8)$$

In questo modo si evidenzia la natura semisemplice dell'algebra, formata da due sottoalgebre disgiunte isomorfe a  $\mathfrak{so}(3)$ . I due ovvi operatori di Casimir sono  $\mathbf{J}^2$  e  $\mathbf{J}'^2$ , con autovalori rispettivamente  $j(j+1)$  e  $j'(j'+1)$ , con  $j$  e  $j'$  positivi seminteri. Notiamo che, siccome  $\mathbf{J}^2$  e  $\mathbf{J}'^2$  commutano, ammettono una base comune di autovettori  $|j\mu, j'\mu'\rangle$ . Gli unici di questi ad avere senso fisico, però, sono quelli per cui  $G = \mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{J}'^2 = 0$ , per cui avremo  $j = j'$ . Su un autostato dell'idrogeno, l'operatore  $F = \mathbf{J}^2 + \mathbf{J}'^2 = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{A}^2)$  avrà dunque autovalore  $2j(j+1)$ . Ora, ricordando la definizione di  $\mathbf{A}$  e il calcolo di  $\mathbf{A}^2$ , abbiamo:

$$F = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^2 - \frac{Z^2}{2H} \mathbf{A}^2) = -\frac{Z^2}{4H} - \frac{1}{2}$$

e per quanto riguarda gli autovalori,

$$\begin{array}{l} 2j(j+1) = -\frac{Z^2}{4E} - \frac{1}{2} \\ E = -\frac{Z^2}{2(2j+1)^2} \end{array} \quad (9)$$

con  $j$  semintero positivo. Siamo giunti alla formula nota, ponendo  $n = 2j + 1$ , che risulta intero  $\geq 1$ . Essendo poi gli autostati di  $\mathbf{J}^2$  e  $\mathbf{J}'^2$  degeneri di ordine  $(2j + 1) \cdot (2j' + 1) = n^2$ , ritorna anche l'ordine di degenerazione degli stati legati dell'idrogeno. Essendo poi  $\mathbf{L} = (\mathbf{J} + \mathbf{J}')$ , secondo le regole di composizione dei momenti angolari abbiamo che  $l$  è intero e  $0 \leq l \leq 2j = n - 1$ , come atteso.

Per capire meglio la natura fisica del vettore di Lenz, illustriamo ora il metodo che Fock utilizzò per esprimere la simmetria quadrimensionale del problema coulombiano.

#### 4. Il metodo di Fock e le coordinate paraboliche

L'approccio di Fock è basato su una trasformazione di coordinate dallo spazio tridimensionale degli impulsi a un'ipersfera di raggio unitario in uno spazio quadrimensionale. Il suo scopo è dimostrare che in questo spazio l'equazione di Schrödinger è equivalente a un'equazione di Laplace, e da questo attraverso le proprietà delle funzioni armoniche arrivare allo spettro dell'idrogeno. La potenza dell'approccio di Fock è data dall'indipendenza dalla dimensione del problema: si dimostra che l'atomo di idrogeno  $n$ -dimensionale ammette sempre una simmetria  $(n+1)$ -dimensionale (Alliluev 1957).

Esprimiamo intanto l'equazione di Schrödinger nello spazio degli impulsi. Il potenziale dà origine ad un integrale di convoluzione, per cui:

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} - E\right)\Phi(\mathbf{p}) = \frac{Z}{2\pi^2} \int \frac{\Phi(\mathbf{p}')d\mathbf{p}'}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2}$$

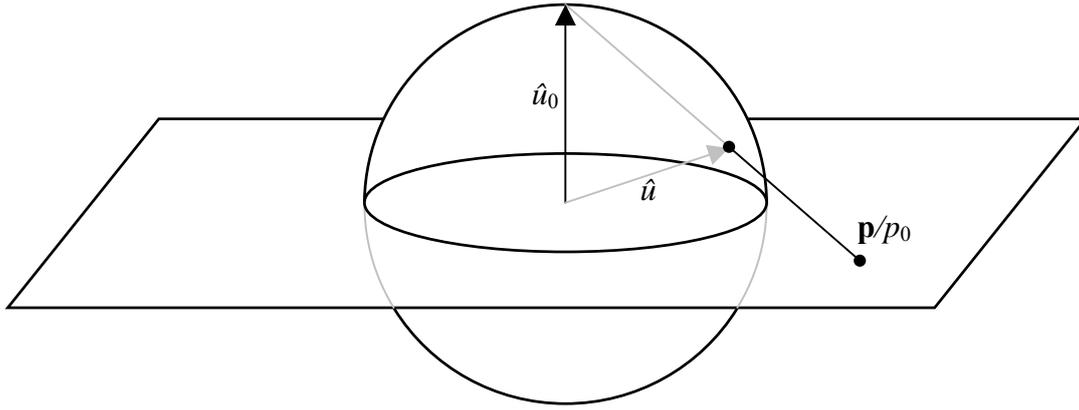
Ricordando che questa trattazione vale per gli stati discreti (a energia negativa) poniamo  $\frac{p_0^2}{2} = -E$ .

$$(\mathbf{p}^2 + p_0^2)\Phi(\mathbf{p}) = \frac{Z}{\pi^2} \int \frac{\Phi(\mathbf{p}')d\mathbf{p}'}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} \quad (10)$$

Data la dipendenza dal modulo quadro di  $\mathbf{p}$ , ci aspettiamo un'invarianza per rotazioni tridimensionali. Andiamo ora ad effettuare un cambio di coordinate: passeremo dall'iperpiano tridimensionale  $\mathbf{p}/p_0$  alla sfera unitaria quadrimensionale attraverso una proiezione stereografica:

$$\hat{u} = \frac{p^2 - p_0^2}{p^2 + p_0^2} \hat{u}_0 + \frac{2p_0}{p^2 + p_0^2} \mathbf{p}$$

Con un po' di calcoli, valutiamo l'elemento di superficie dell'ipersfera.



$$d\Omega = \left( \frac{2p_0}{p^2 + p_0^2} \right)^3 d\mathbf{p}$$

$$|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2 = \frac{(p^2 + p_0^2)(p'^2 + p_0^2)}{(2p_0)^2} |\hat{u} - \hat{u}'|^2$$

Definiamo ora una nuova funzione d'onda  $\tilde{\Phi}(\hat{u}) = \frac{(p^2 + p_0^2)^2}{4p_0^{5/2}} \Phi(\mathbf{p})$  (11a). L'equazione di Schrödinger diventa:

$$\tilde{\Phi}(\hat{u}) = \frac{Z}{2p_0\pi^2} \int \frac{\tilde{\Phi}(\hat{v}) d\Omega_v}{|\hat{u} - \hat{v}|^2} \quad (11b)$$

Notiamo che nella nuova rappresentazione è mantenuta la normalizzazione, essendo:

$$\int |\tilde{\Phi}(\hat{v})|^2 d\Omega_v = \int \frac{p^2 + p_0^2}{2p_0^2} |\Phi(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} = \int |\Phi(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} \quad (12)$$

(nell'ultimo passaggio è stato fatto uso del teorema del viriale, per cui  $\langle p^2 \rangle = \langle p_0^2 \rangle$ ).

Il nostro scopo è ora dimostrare che l'equazione (10) è equivalente all'equazione armonica nello spazio delle  $\mathbf{u}$ , ovviamente invariante per rotazioni quadridimensionali.

Togliendo la restrizione  $|\mathbf{u}|=1$ , chiamiamo  $Y_{\lambda,\alpha}(\hat{u})$  il sistema di armoniche sferiche e  $P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{u})$  il polinomio armonico ad esso associato dalla relazione  $P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{u}) = |\mathbf{u}|^\lambda Y_{\lambda,\alpha}\left(\frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{u}|}\right)$ . Si può facilmente

verificare che  $P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{u})$  è un polinomio omogeneo di grado  $\lambda$  e che verifica l'equazione di Laplace:

$$\nabla^2 P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{u}) = 0 \quad (13)$$

Un polinomio omogeneo di grado  $\lambda$  a 4 variabili dipende da  $\binom{\lambda+3}{\lambda}$  coefficienti, mentre

l'equazione (12) impone  $\binom{\lambda+1}{\lambda-2}$  condizioni omogenee, per cui un polinomio armonico è

individuato da un numero di coefficienti  $N_\lambda$  determinato da:

$$N_\lambda = \binom{\lambda+3}{\lambda} - \binom{\lambda+1}{\lambda-2} = (\lambda+1)^2 \quad (14)$$

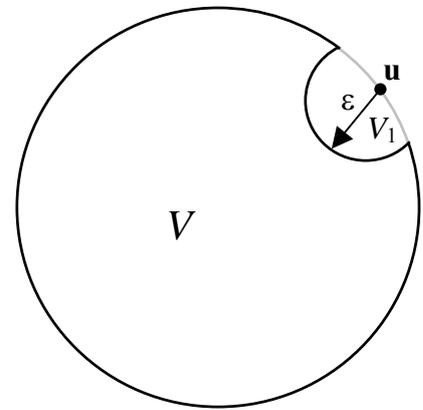
Ricordando che in 4 dimensioni vale  $\nabla^2 \frac{1}{|\mathbf{u}-\mathbf{v}|^2} = -2\pi^2 \delta(\mathbf{u}-\mathbf{v}) = 0$  per  $\mathbf{u} \neq \mathbf{v}$ <sup>1</sup>, possiamo integrare

all'interno della sfera  $|\mathbf{v}| = 1$ , esclusa una semisfera di raggio  $\varepsilon$  centrata in  $\mathbf{u}$  (vedi figura):

$$0 = \int_V \left( \frac{1}{|\mathbf{u}-\mathbf{v}|^2} \nabla^2 P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{v}) - P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{v}) \nabla^2 \frac{1}{|\mathbf{u}-\mathbf{v}|^2} \right) d\mathbf{v}$$

Dentro la  $\varepsilon$ -semisfera, l'integrale diventa:

$$I_1 = - \int_{V_1} P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{v}) \nabla^2 \frac{1}{|\mathbf{u}-\mathbf{v}|^2} d\mathbf{v} = 2\pi^2 P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{u})$$



$$V + V_1 = V_2$$

Nella regione 2, sfruttando l'identità di Green passiamo da un integrale di volume a uno sulla superficie dell'ipersfera unitaria.

Su di essa abbiamo:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dn} P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{v}) \right|_{|\mathbf{v}|=1} &= \left. \frac{d}{dn} |\mathbf{v}|^\lambda \right|_{|\mathbf{v}|=1} Y_{\lambda,\alpha}(\hat{\mathbf{v}}) = \lambda |\mathbf{v}|^{\lambda-1} \bigg|_{|\mathbf{v}|=1} Y_{\lambda,\alpha}(\hat{\mathbf{v}}) = \lambda Y_{\lambda,\alpha}(\hat{\mathbf{v}}) \\ \left. \frac{d}{dn} \frac{1}{|\mathbf{u}-\mathbf{v}|^2} \right|_{|\mathbf{u}|=|\mathbf{v}|=1} &= - \sum u_i \frac{2(u_i - v_i)}{|\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{v}}|^4} \bigg|_{|\mathbf{u}|=|\mathbf{v}|=1} = - \frac{\sum (u_i - v_i)^2}{|\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{v}}|^4} = - \frac{1}{|\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{v}}|^2} \end{aligned}$$

Per cui:

$$I_2 = \int_\Sigma \left( \frac{1}{|\mathbf{u}-\mathbf{v}|^2} \frac{d}{dn} P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{v}) - P_{\lambda,\alpha}(\mathbf{v}) \frac{d}{dn} \frac{1}{|\mathbf{u}-\mathbf{v}|^2} \right) d\sigma = \int_\Sigma \left( \frac{1}{|\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{v}}|^2} \lambda Y_{\lambda,\alpha}(\hat{\mathbf{v}}) + Y_{\lambda,\alpha}(\hat{\mathbf{v}}) \frac{1}{|\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{v}}|^2} \right) d\Omega_v$$

<sup>1</sup> In generale infatti  $\Delta^{(n)} \frac{1}{|\mathbf{u}-\mathbf{v}|^{n-2}} = -\omega_{n-1} \delta(\mathbf{u}-\mathbf{v})$ , con  $\omega_m$  l'area dell'ipersfera unitaria m-dimensionale  $S^m$ .

E infine:

$$0 = I_2 - I_1 = (\lambda + 1) \int Y_{\lambda, \alpha}(\hat{v}) \frac{1}{|\hat{u} - \hat{v}|^2} d\Omega_v - 2\pi^2 Y_{\lambda, \alpha}(\hat{u})$$

$$Y_{\lambda, \alpha}(\hat{u}) = \frac{(\lambda + 1)}{2\pi^2} \int Y_{\lambda, \alpha}(\hat{v}) \frac{1}{|\hat{u} - \hat{v}|^2} d\Omega_v \quad (15)$$

Notiamo che la (15) ha la stessa forma della (11b). Per la completezza e l'ortonormalità delle  $Y_{\lambda, \alpha}$ , esse rappresentano tutte e sole le soluzioni della (11b), identificando:

$$\frac{Z}{p_0} = \lambda + 1 \Rightarrow E = -\frac{Z^2}{2(\lambda + 1)^2}$$

da cui, ponendo  $n = \lambda + 1$ , la nota relazione. La degenerazione, come calcolato in (14), è di ordine  $(\lambda + 1)^2 = n^2$ . Il fatto che la trasformazione dallo spazio  $\mathbf{p}^3$  allo spazio  $\mathbf{u}^4$  sia unitaria (poiché mantiene la normalizzazione), fa sì che lo sviluppo delle  $\tilde{\Phi}(\hat{u})$  su una base ortonormale sia valido anche nello spazio  $\mathbf{p}^3$ .

Il metodo di Fock mette in luce la simmetria dell'atomo di idrogeno attraverso un cambiamento di coordinate che trasforma l'equazione di Schrödinger in una a simmetria più elevata; il metodo di Pauli, invece, sfrutta direttamente la proprietà del vettore  $\mathbf{A}$  di generare insieme a  $\mathbf{L}$  il gruppo  $SO(4)$ . Andiamo a vedere come i due approcci sono collegati.

Studiamo le rotazioni sulla sfera  $S^4$ . Le rotazioni nei piani  $(u_1u_2)$ ,  $(u_2u_3)$ ,  $(u_3u_1)$  sono generate da  $\mathbf{L}$  (dato che  $\hat{u}_i = \hat{p}_i$  e  $\mathbf{L} = \mathbf{p} \times (-\mathbf{r})$ ). Studiamo ora la rotazione infinitesima nel piano  $(u_0u_3)$ . Abbiamo:

$$\begin{aligned} u_0' &= u_0 - \varepsilon u_3 & u_3' &= u_3 + \varepsilon u_0 & u_i' &= u_i \\ \frac{p'^2 - p_0^2}{p'^2 + p_0^2} &= \frac{p^2 - p_0^2}{p^2 + p_0^2} - \varepsilon \frac{2p_0 p_3}{p^2 + p_0^2} & \frac{2p_0 p_3'}{p'^2 + p_0^2} &= \frac{2p_0 p_3}{p^2 + p_0^2} + \varepsilon \frac{p^2 - p_0^2}{p^2 + p_0^2} & \frac{2p_0 p_i'}{p'^2 + p_0^2} &= \frac{2p_0 p_i}{p^2 + p_0^2} \quad i = 1, 2 \end{aligned}$$

da cui:

$$\begin{aligned} \delta p_3 &= \varepsilon \frac{p^2 - p_0^2 - 2p_3^2}{2p_0} \\ \delta p_2 &= -\varepsilon \frac{p_3 p_2}{p_0} \\ \delta p_1 &= -\varepsilon \frac{p_3 p_1}{p_0} \end{aligned} \quad (16)$$

Ora, per la (11a), la variazione della funzione d'onda è:

$$\begin{aligned}\delta\Phi(\mathbf{p}) &= \frac{1}{(p^2 + p_0^2)^2} \left( \delta\mathbf{p} \cdot \frac{\partial}{\partial\mathbf{p}} \right) (p^2 + p_0^2)^2 \Phi(\mathbf{p}) = \\ &= \frac{\varepsilon}{(p^2 + p_0^2)^2} \left( \frac{p^2 - p_0^2 - 2p_3^2}{2p_0} \frac{\partial}{\partial p_3} - \frac{p_3 p_2}{p_0} \frac{\partial}{\partial p_2} - \frac{p_3 p_1}{p_0} \frac{\partial}{\partial p_1} \right) (p^2 + p_0^2)^2 \Phi(\mathbf{p})\end{aligned}$$

per cui, chiamando  $A'_3$  il generatore della rotazione  $(u_0 u_3)$ , e ricordando  $\delta\Phi(\mathbf{p}) = -\frac{iZ\varepsilon}{p_0} A'_3 \Phi(\mathbf{p})$  e

$x_i = i \frac{\partial}{\partial p_i}$ , otteniamo:

$$ZA'_3 = \frac{1}{(p^2 + p_0^2)^2} \left( \frac{p^2 - p_0^2}{2} x_3 - p_3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \right) (p^2 + p_0^2)^2 = \frac{p^2 - p_0^2}{2} x_3 - p_3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) - 2ip_3 \quad (17)$$

Se ora spostiamo  $p_0$  a destra di  $x_3$  e ricordiamo che  $E = -\frac{p_0^2}{2}$ , siccome  $A'_3$  agisce solo su autostati

dell'Hamiltoniana possiamo sostituire  $E$  con  $H = \frac{p^2}{2} - \frac{Z}{r}$ , e dunque:

$$ZA'_3 = \frac{p^2}{2} x_3 + x_3 \left( \frac{p^2}{2} - \frac{Z}{r} \right) - p_3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) - 2ip_3 = p^2 x_3 - p_3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) - ip_3 - Z \frac{x_3}{r}$$

o in generale:

$$\mathbf{A}' = \frac{1}{Z} (p^2 \mathbf{r} - \mathbf{p}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + i)) - \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{1}{2Z} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{\mathbf{r}}{r}$$

Ecco spiegata la connessione tra l'approccio di Pauli e quello di Fock: il vettore di Runge-Lenz introdotto come generatore di  $SO(4)$  induce le rotazioni sull'ipersfera  $S^4$  delle  $\mathbf{u}$  attraverso i piani contenenti l'asse  $u_0$ , e in quanto generatore di rotazioni segue la stessa algebra del momento angolare.

Inoltre, possiamo ora giustificare un'altra peculiarità dell'Hamiltoniana dell'idrogeno: la separabilità in coordinate paraboliche. Infatti, poiché  $L_3$  e  $A'_3$  generano rispettivamente le rotazioni nei piani  $(u_1 u_2)$  e  $(u_0 u_3)$ , ovvero in due piani a intersezione nulla, devono commutare tra loro, ed ammettere quindi una base comune di autovettori. Passando in coordinate paraboliche, abbiamo:

$$\begin{aligned}x &= \sqrt{\eta\xi} \cos \varphi, \quad y = \sqrt{\eta\xi} \sin \varphi, \quad z = \frac{1}{2}(\eta - \xi) \\ H|n_1 n_2 m\rangle &= -\frac{Z}{2n^2} |n_1 n_2 m\rangle \text{ con } n = n_1 + n_2 + |m| + 1 \\ L_z|n_1 n_2 m\rangle &= m|n_1 n_2 m\rangle\end{aligned} \quad (18)$$

Dopo laboriosi conti, si può arrivare alla conclusione per cui:

$$A'_z |n_1 n_2 m\rangle = \frac{n_2 - n_1}{n} |n_1 n_2 m\rangle, \quad A_z |n_1 n_2 m\rangle = (n_2 - n_1) |n_1 n_2 m\rangle \quad (19)$$

Ricordando la definizione di  $\mathbf{J}$  e  $\mathbf{J}'$ , abbiamo:

$$\begin{aligned} J_3 |n_1 n_2 m\rangle &= \frac{1}{2}(L_3 + A_3) |n_1 n_2 m\rangle = \frac{1}{2}(n_2 - n_1 + m) |n_1 n_2 m\rangle \equiv \mu |n_1 n_2 m\rangle \\ J'_3 |n_1 n_2 m\rangle &= \frac{1}{2}(L_3 - A_3) |n_1 n_2 m\rangle = \frac{1}{2}(n_1 - n_2 + m) |n_1 n_2 m\rangle \equiv \mu' |n_1 n_2 m\rangle \\ \mathbf{J}^2 |n_1 n_2 m\rangle &= \mathbf{J}'^2 |n_1 n_2 m\rangle = j(j+1) |n_1 n_2 m\rangle = \frac{1}{4}(n^2 - 1) |n_1 n_2 m\rangle \text{ con } n = n_1 + n_2 + |m| + 1 \\ \mathbf{J}^2 |nlm\rangle &= \mathbf{J}'^2 |nlm\rangle = \frac{1}{4}(n^2 - 1) |nlm\rangle \end{aligned} \quad (20)$$

E dunque, essendo  $\mathbf{L} = \mathbf{J} + \mathbf{J}'$ , per le regole di composizione dei momenti angolari abbiamo:

$$|nlm\rangle = \sum_{m=\mu+\mu'} \langle \mu\mu' | lm \rangle |\mu\mu'\rangle$$

dove  $\langle \mu\mu' | lm \rangle$  è l'appropriato coefficiente di Clebsch-Gordan corrispondente a  $j = j' = \frac{1}{2}(n-1)$ .

La relazione tra coordinate polari e coordinate paraboliche è dunque la stessa che c'è nella composizione di momenti angolari: la base di autoket simultanei di  $\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}'^2$ ,  $J_z$  e  $J'_z$  diagonalizza anche  $A_z$  ed  $L_z$  ed è dunque esprimibile in coordinate paraboliche, mentre la base di autoket di  $\mathbf{L}^2$ ,  $L_z$ ,  $\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}'^2$  è ovviamente la base "canonica" delle coordinate polari. Nella trattazione seguente utilizzeremo entrambe le basi.

## 5. Il vettore di Lenz come operatore a scala

Come avevamo annunciato, il nostro scopo è costruire un'algebra i cui elementi colleghino fra loro i vari autostati dell'idrogeno. Gli stati con diverso  $m$  sono collegati dagli operatori a scala  $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ , di cui ricordiamo gli elementi di matrice:

$$\begin{aligned} L_{\pm} |nlm\rangle &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |nl m \pm 1\rangle \\ L_+ &= L_-^\dagger, \quad L_z |nlm\rangle = m |nlm\rangle \end{aligned} \quad (21)$$

Andiamo a verificare analoghe proprietà del vettore  $\mathbf{A}$ . Intanto ad  $\mathbf{A}$ , in quanto operatore vettoriale, può essere applicato il teorema di Wigner-Eckart. Le componenti sferiche di  $\mathbf{A}$  sono

$A_0^{(1)} = A_z, A_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} A_{\pm}$ . Abbiamo quindi:

$$\langle n'l'm' | A_q^{(1)} |nlm\rangle = \frac{\langle n'l' || \mathbf{A} || nl \rangle}{\sqrt{2l'+1}} \langle l1mq | l1l'm' \rangle$$

Valutando i coefficienti di Clebsch-Gordan e usando le relative regole di selezione, possiamo scrivere le seguenti equazioni (l'indice  $n$  è stato soppresso per brevità):

$$\begin{aligned}
A_z |lm\rangle &= \alpha(l, m)c_l |l-1, m\rangle - ma_l |lm\rangle + \alpha(l+1, m)c_{l+1} |l+1, m\rangle \\
A_+ |lm\rangle &= \beta(l-1, m)c_l |l-1, m+1\rangle - \omega(l, m)a_l |l, m+1\rangle - \gamma(l+1, m)c_{l+1} |l+1, m+1\rangle \\
A_- |lm\rangle &= -\beta(l-1, -m)c_l |l-1, m-1\rangle - \omega(l, -m)a_l |l, m-1\rangle + \gamma(l+1, -m)c_{l+1} |l+1, m-1\rangle
\end{aligned} \tag{22a}$$

con

$$\begin{aligned}
\alpha(l, m) &= \sqrt{(l-m)(l+m)} & \gamma(l, m) &= \sqrt{(l+m+1)(l+m)} \\
\beta(l, m) &= \sqrt{(l-m+1)(l-m)} & \omega(l, m) &= \sqrt{(l+m+1)(l-m)}
\end{aligned} \tag{22b}$$

I coefficienti  $c_l$  ed  $a_l$  contengono gli elementi ridotti di matrice indipendenti da  $m$ . Andremo ora a calcolarli in maniera ricorsiva. Poiché vale  $[A_z, A_+] = L_+$ , applicando il commutatore al vettore di base  $|lm\rangle$  otteniamo una relazione lineare tra i vettori di base. Essendo questi linearmente indipendenti, poniamo nulli i coefficienti di ciascun vettore. Ne vengono fuori due equazioni alle differenze per  $a_l$  e  $c_l$ :

$$\begin{aligned}
(la_l - (l+2)a_{l+1})c_{l+1} &= 0 \\
a_l^2 - (2l+3)c_{l+1}^2 + (2l-1)c_l^2 &= 1
\end{aligned} \tag{23}$$

Per poterle risolvere, abbandoniamo momentaneamente la rappresentazione idrogenoide classica, e chiamiamo  $l_0$  il limite inferiore per  $l$ , tale che  $l = l_0, l_0+1, \dots$  ( $2l_0 \in \mathbf{N}$ ). Per la terza equazione di (22a) possiamo assumere che  $c_{l_0} = 0$ , perché altrimenti il ket  $|l_0-1, m-1\rangle$  sarebbe incluso nella rappresentazione. Inoltre possiamo in linea di principio avere due possibilità: o esiste un  $k$  tale che  $c_{l_0} = 0, c_{l_0+1} \neq 0, \dots, c_{l_0+k} \neq 0, c_{l_0+k+1} = 0$ , e in tal caso la rappresentazione è finita, o non esiste, ed è quindi infinita. Dimosteremo dopo che, volendo avere una rappresentazione unitaria, questa dovrà essere finita. Per  $l_0 \leq l \leq l_0 + k \leq \infty$  possiamo dunque scrivere:

$$la_l - (l+2)a_{l+1} = 0$$

Da cui, moltiplicando per  $(l+1)$  e ponendo  $\alpha_l = l(l+1)a_l$ , arriviamo alla semplice

$$\alpha_{l+1} = \alpha_l, \text{ da cui } a_l = \frac{l_0(l_0+1)}{l(l+1)} a_{l_0} \equiv \frac{\eta l_0}{l(l+1)}. \text{ Nella seconda equazione, moltiplichiamo per } (2l+1) \text{ e}$$

poniamo  $\tau_l = (2l+1)(2l-1)c_l^2$ . Ora la seconda equazione diventa:

$$\tau_{l+1} - \tau_l = -((l+1)^2 - l^2) - l_0^2 \eta^2 ((l+1)^{-2} - l^{-2})$$

e sommando da  $l_0$  a  $l$ :

$$\tau_l - \tau_{l_0} = (l_0^2 - l^2) + l_0^2 \eta^2 (l_0^{-2} - l^{-2})$$

Siccome, per quanto detto sopra,  $c_{l_0} = 0$ , allora anche  $\tau_{l_0} = 0$  e quindi:

$$c_l^2 = \frac{(l^2 - l_0^2)(\eta^2 - l^2)}{l^2(4l^2 - 1)}$$

L'hermiticità di  $\mathbf{A}$  impone che i coefficienti  $c_l$  siano reali. Bisogna quindi imporre che  $l < \eta$ , e dunque che si abbia  $l = l_0, l_0+1, \dots, \eta-1$ . Calcolando il valore degli operatori di Casimir  $F$  e  $G$  in funzione di  $l_0$  e  $\eta$  abbiamo:

$$\begin{aligned} 2F|nlm\rangle &= (\mathbf{L}^2 + \mathbf{A}^2)|nlm\rangle = (l_0^2 + \eta^2 - 1)|nlm\rangle = (n^2 - 1)|nlm\rangle \\ G|nlm\rangle &= (\mathbf{L} \cdot \mathbf{A})|nlm\rangle = -l_0 \eta |nlm\rangle \equiv 0 \end{aligned} \quad (24)$$

Affinché la rappresentazione di  $SO(4)$  sia coerente con l'atomo di idrogeno, scegliamo  $l_0 = 0$  e  $\eta = n$ . L'azione di  $\mathbf{A}$  sugli autostati dell'idrogeno è dunque:

$$\begin{aligned} A_z|nlm\rangle &= \sqrt{(l-m)(l+m)}c_l^n |n\ l-1\ m\rangle + \sqrt{(l-m+1)(l+m+1)}c_{l+1}^n |n\ l+1\ m\rangle \\ A_+|nlm\rangle &= \sqrt{(l-m)(l-m-1)}c_l^n |n\ l-1\ m+1\rangle - \sqrt{(l+m+1)(l+m+2)}c_{l+1}^n |n\ l+1\ m+1\rangle \\ A_-|nlm\rangle &= -\sqrt{(l+m)(l+m-1)}c_l^n |n\ l-1\ m-1\rangle + \sqrt{(l-m+1)(l-m+2)}c_{l+1}^n |n\ l+1\ m-1\rangle \end{aligned} \quad (25)$$

con  $c_l^n = \sqrt{\frac{n^2 - l^2}{4l^2 - 1}}$ .

Per fare un esempio, notiamo che  $A_z$  applicato al ket  $|n\ n-1\ n-1\rangle$  dà come risultato il ket nullo. Questo è coerente con la diagonalità di  $A_z$  in coordinate paraboliche; il ket di sopra, infatti, nella rappresentazione  $|n_1 n_2 m\rangle$  è  $|00\ n-1\rangle$ , e su di esso  $A_z = n_2 - n_1 = 0$ .

Ciò che volevamo comunque dimostrare è che il vettore di Lenz collega tra loro stati di stesso  $n$  ma di diverso  $l$  ed  $m$ , così come gli operatori a scala  $\mathbf{L}_\pm$  collegano stati di stesso  $m$ . Possiamo anzi scrivere un generico stato  $|nlm\rangle$  a partire da quello a simmetria sferica:

$$|nlm\rangle = \frac{1}{K_{nl} B_{lm}} (L_-)^{l-m} (A_+)^l |n00\rangle$$

$$K_{nl} = (k_{n1} k_{n2} \dots k_{nl}), \quad k_{nl} = -\sqrt{2l(n^2 - l^2)/(2l+1)} \quad B_{lm} = (b_{lm} b_{lm+1} \dots b_{l-1}), \quad b_{lm} = \sqrt{(l-m+1)(l+m)}$$

## 6. Il modello di Schwinger e $SO(4)$

Prima di andare avanti con il gruppo dinamico dell'atomo di idrogeno, introduciamo un importante modello di momento angolare che ci permetterà di ampliare il gruppo di simmetria: il modello di Schwinger.

Consideriamo due oscillatori armonici disaccoppiati. Entrambi ammettono operatori di distruzione  $a_1$  e  $a_2$  e di creazione  $a_1^\dagger$  e  $a_2^\dagger$ . Definiamo analogamente due operatori numero:

$$N_1 = a_1^\dagger a_1 \qquad N_2 = a_2^\dagger a_2$$

Le regole di commutazione sono le usuali:

$$\begin{aligned} [a_i, a_i^\dagger] &= 1 \\ [N_i, a_i^\dagger] &= a_i^\dagger \text{ per } i = 1, 2 \\ [N_i, a_i] &= -a_i \end{aligned} \qquad (26)$$

Il fatto che i due oscillatori siano disaccoppiati implica:

$$[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = [a_i, a_j^\dagger] = 0 \text{ per } i \neq j \qquad (27)$$

Questo implica che commutano anche i due operatori numero. È possibile dunque scegliere una base ortonormale di autoket simultanei di  $N_1$  e  $N_2$ , ottenendo:

$$\begin{aligned} N_1 |n_1, n_2\rangle &= n_1 |n_1, n_2\rangle & N_2 |n_1, n_2\rangle &= n_2 |n_1, n_2\rangle \\ a_1^\dagger |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{n_1 + 1} |n_1 + 1, n_2\rangle & a_2^\dagger |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{n_2 + 1} |n_1, n_2 + 1\rangle \\ a_1 |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{n_1} |n_1 - 1, n_2\rangle & a_2 |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{n_2} |n_1, n_2 - 1\rangle \end{aligned} \qquad (28)$$

Il ket vuoto è ovviamente definito da  $a_i |0, 0\rangle = 0$  per  $i = 1, 2$ , mentre il generico ket può essere costruito da questo con:

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_1!} \sqrt{n_2!}} |0, 0\rangle \qquad (29)$$

Definiamo ora

$$\begin{aligned} J_+ &= a_1^\dagger a_2 \\ J_- &= a_2^\dagger a_1 \\ J_z &= \frac{1}{2} (a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2) = \frac{1}{2} (N_1 - N_2) \end{aligned} \qquad (30)$$

è semplice verificare le ordinarie leggi di commutazione del momento angolare:

$$\begin{aligned} [J_z, J_{\pm}] &= \pm J_{\pm} \\ [J_+, J_-] &= 2J_z \end{aligned}$$

L'interpretazione di tutto questo può essere data associando lo spin "su" ( $m = 1/2$ ) all'eccitazione dell'oscillatore di tipo 1, e lo spin "giù" ( $m = -1/2$ ) all'eccitazione dell'oscillatore di tipo 2. Gli autovalori  $n_1$  e  $n_2$ , in questo caso, sono proprio il numero degli spin su e giù, rispettivamente. Il significato di  $J_+$  è di distruggere una unità di spin giù di momento angolare  $-1/2$ , e di crearne una di spin su di momento angolare  $1/2$ ; la componente  $z$  del momento angolare viene perciò ad aumentare di 1. Analogamente  $J_-$  distrugge  $1/2$  di spin su e crea  $1/2$  di spin giù. Quanto a  $J_z$ , esso conta semplicemente la metà della differenza tra  $n_1$  e  $n_2$  e rappresenta la componente  $z$  del momento angolare totale. Nel linguaggio della seconda quantizzazione, gli operatori di creazione e distruzione creano un campo "bosonico" (simmetrico) di quanti di spin  $1/2$ . Poniamo allora:

$$j = \frac{n_1 + n_2}{2}, \quad m = \frac{n_1 - n_2}{2}$$

L'azione degli operatori  $J_{\pm}$  e  $J_z$  diventa quindi:

$$\begin{aligned} J_+ |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{(n_1 + 1)n_2} |n_1 + 1, n_2 - 1\rangle = \sqrt{(j - m)(j + m + 1)} |n_1 + 1, n_2 - 1\rangle \\ J_- |n_1, n_2\rangle &= \sqrt{n_1(n_2 + 1)} |n_1 - 1, n_2 + 1\rangle = \sqrt{(j + m)(j - m + 1)} |n_1 - 1, n_2 + 1\rangle \\ J_z |n_1, n_2\rangle &= \frac{n_1 - n_2}{2} |n_1, n_2\rangle = m |n_1, n_2\rangle \\ \mathbf{J}^2 |n_1, n_2\rangle &= \left( J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) \right) |n_1, n_2\rangle = \\ &= \frac{n_1 + n_2}{2} \left( \frac{n_1 + n_2}{2} + 1 \right) |n_1, n_2\rangle = j(j + 1) |n_1, n_2\rangle \end{aligned}$$

Riconosciamo gli usuali elementi di matrice degli operatori momento angolare. L'equazione (29) può essere ora espressa come:

$$|jm\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{j+m} (a_2^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!} \sqrt{(j-m)!}} |0\rangle$$

Come ultima notazione, introduciamo i due vettori  $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$  e  $\mathbf{a}^\dagger = (a_1^\dagger, a_2^\dagger)$ , per mezzo dei quali possiamo sinteticamente scrivere:

$$J_i = \frac{1}{2} \mathbf{a}^\dagger \sigma_i \mathbf{a}$$

con  $i = x, y, z$  e  $\sigma_i$  le solite matrici di Pauli.

Torniamo all'atomo di idrogeno. Quello che faremo è ridefinire i momenti angolari  $\mathbf{J}$  e  $\mathbf{J}'$  tramite il modello di Schwinger. Poniamo dunque:

$$J_i = \frac{1}{2} \mathbf{a}^\dagger \sigma_i \mathbf{a} \qquad J'_i = \frac{1}{2} \mathbf{b}^\dagger \sigma_i \mathbf{b}$$

con le componenti di  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{a}^\dagger$  che commutano con quelle di  $\mathbf{b}$  e  $\mathbf{b}^\dagger$ . Il generico ket dell'idrogeno può essere scritto come:

$$|j\mu j'\mu'\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{j+\mu} (a_2^\dagger)^{j-\mu} (b_1^\dagger)^{j'+\mu'} (b_2^\dagger)^{j'-\mu'}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!(j'+\mu')!(j'-\mu')!}} |0\rangle \quad (30)$$

Gli operatori  $\mathbf{L}$  e  $\mathbf{A}$  possono quindi essere realizzati tramite gli operatori bosonici come:

$$\begin{aligned} L_i &= J_i + J'_i = \frac{1}{2} (\mathbf{a}^\dagger \sigma_i \mathbf{a} + \mathbf{b}^\dagger \sigma_i \mathbf{b}) \\ A_i &= J_i - J'_i = \frac{1}{2} (\mathbf{a}^\dagger \sigma_i \mathbf{a} - \mathbf{b}^\dagger \sigma_i \mathbf{b}) \end{aligned} \quad (31a)$$

In seguito, utilizzeremo anche la notazione del tensore antisimmetrico  $L_{ij}$  tale che:

$$\begin{aligned} L_{\alpha\beta} &= -L_{\beta\alpha} \\ L_{ij} &= \varepsilon_{ijk} L_k \quad \text{con } i,j = 1,2,3 \\ L_{4j} &= A_j \end{aligned} \quad (31b)$$

I commutatori non nulli possono ora sinteticamente essere espressi come:

$$[L_{\alpha\beta}, L_{\alpha\gamma}] = iL_{\beta\gamma}$$

## 7. Il gruppo dinamico dell'idrogeno

Prima abbiamo dimostrato che il vettore  $\mathbf{A}$  collega tra loro gli stati con diverso  $l$ . Possiamo ora andare alla ricerca di operatori che collegano invece stati con diverso numero quantico principale  $n$ . Innanzitutto consideriamo l'operatore

$$T_3 = L_{56} = \frac{1}{2} (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \mathbf{b}^\dagger \mathbf{b} + 2) \quad (32)$$

che ovviamente commuta con tutti i generatori di  $SO(4)$ , e ha la forma di un semplice operatore numero. Se ne studiamo l'azione su un generico ket:

$$T_3 |j\mu j'\mu'\rangle = (j + j' + 1) |j\mu j'\mu'\rangle$$

ed essendo  $j = j' = (n - 1)/2$ , abbiamo:

$$T_3 |nlm\rangle = n |nlm\rangle \quad (33)$$

Ora andiamo a cercare operatori che innalzino o abbassino  $n$ . Studiamo questi altri due operatori scalari:

$$T_1 = L_{46} = \frac{i}{2}(\mathbf{a}^\dagger \sigma_2 \mathbf{b}^\dagger + \mathbf{a} \sigma_2 \mathbf{b}) \quad T_2 = L_{45} = \frac{1}{2}(\mathbf{a}^\dagger \sigma_2 \mathbf{b}^\dagger - \mathbf{a} \sigma_2 \mathbf{b}) \quad (34)$$

Ad un rapido controllo, i due operatori risultano hermitiani. Insieme a  $T_3$  formano un'algebra di tipo  $\mathfrak{so}(2,1)$ , dato che le regole di commutazione sono:

$$\begin{aligned} [T_1, T_2] &= -iT_3 \\ [T_2, T_3] &= iT_1 \\ [T_3, T_1] &= iT_2 \end{aligned} \quad (35)$$

o anche:

$$[L_{\alpha\beta}, L_{\alpha\gamma}] = ig_{\alpha\alpha} L_{\beta\gamma} \quad \text{con } \alpha, \beta, \gamma = 4, 5, 6 \text{ e } g_{\alpha\beta} = \begin{cases} 0 & \text{se } \alpha \neq \beta \\ 1 & \text{se } \alpha = \beta = 4 \\ -1 & \text{se } \alpha = \beta = 5, 6 \end{cases}$$

Stiamo trattando dunque un gruppo non compatto. Studiamo rapidamente le proprietà dei suoi generatori. Intanto, abbiamo che  $[T_1, L_i] = [T_2, L_i] = 0$  per  $i = 1, 2, 3$ , ovvero che l'azione di  $T_1$  e  $T_2$  non può modificare i numeri quantici  $l$  e  $m$  (questo implica anche che gli operatori  $T_i$  sono tre operatori scalari distinti e non le componenti di un operatore vettoriale, in quanto per le componenti di un operatore vettoriale si deve avere  $[L_i, V_j] = i\epsilon_{ijk} V_k$ ). La nostra speranza è che possiamo usarli come operatori a scala per  $n$ .

Definendo come al solito  $T_\pm = T_1 \pm iT_2$ , abbiamo le regole:

$$[T_+, T_-] = -2T_3, \quad [T_3, T_\pm] = \pm T_\pm$$

da cui immediatamente  $T_3(T_\pm |nlm\rangle) = ([T_3, T_\pm] + T_\pm T_3)|nlm\rangle = (n \pm 1)T_\pm |nlm\rangle$ , ovvero  $T_\pm |nlm\rangle = c_{nl}^\pm |n \pm 1, lm\rangle$ : abbiamo trovato i nostri operatori a scala. Per calcolare gli elementi di matrice, presentiamo brevemente le proprietà di  $\mathfrak{so}(2,1)$ , ricavandole in analogia a quelle di  $\mathfrak{so}(3)$ .

Intanto, l'operatore di Casimir per  $\mathfrak{so}(2,1)$  è  $\mathbf{T}^2 \equiv T_3^2 - T_1^2 - T_2^2 = T_3^2 - \frac{1}{2}(T_+ T_- + T_- T_+)$ , e commuta con gli altri elementi dell'algebra. È possibile scegliere dunque una base ortonormale di ket simultanei di  $T_3$  e  $\mathbf{T}^2$ , tale che:

$$\mathbf{T}^2 |tn\rangle = t|tn\rangle, \quad T_3 |tn\rangle = n|tn\rangle$$

Ora,

$$\langle tn | \mathbf{T}^2 - T_3 | tn \rangle = -\frac{1}{2} \langle tn | T_-^\dagger T_- + T_+^\dagger T_+ | tn \rangle \leq 0$$

per cui  $t \leq n$ . Questo implica che esiste un ket tale che:

$$T_- |t n_{\min} + 1\rangle = 0 \Rightarrow T_+ T_- |t n_{\min} + 1\rangle = -(\mathbf{T}^2 - T_3^2 + T_3) |t n_{\min} + 1\rangle = 0 \Rightarrow t = n_{\min} (n_{\min} + 1)$$

In questo modo, abbiamo che  $n + 1 \geq t$ . Sembrerebbe che  $t$  abbia a che fare col numero quantico  $l$ . E infatti, calcolandoli esplicitamente, si può dimostrare che  $\mathbf{T}^2 = \mathbf{L}^2$ , per cui  $t \equiv l$ . Andiamo ora a calcolare gli elementi di matrice di  $T_\pm$ :

$$-l(l+1) + n(n \pm 1) = \langle nlm | -(\mathbf{T}^2 - T_3^2 \mp T_3) | nlm \rangle = \langle nlm | T_\mp T_\pm | nlm \rangle = \|T_\pm |nlm\rangle\|^2 = |c_{nl}^\pm|^2$$

Per cui, in sintesi:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^2 |nlm\rangle &= l(l+1) |nlm\rangle \\ T_3 |nlm\rangle &= n |nlm\rangle \\ T_\pm |nlm\rangle &= \sqrt{(n \mp l)(n \pm l \pm 1)} |n \pm 1, lm\rangle \end{aligned} \quad (36)$$

Abbiamo raggiunto il nostro scopo: abbiamo trovato degli operatori a scala per il numero quantico principale. Bisogna ora costruire un gruppo che abbia come sottogruppo sia il gruppo  $SO(4)$  di simmetria, sia il gruppo  $SO(2,1)$  degli operatori  $T_i$ . Per quanto riguarda l'algebra, rendiamola chiusa rispetto alla commutazione. Definiamo dunque altri due operatori vettoriali:

$$M_i \equiv L_{i5} \equiv i[T_2, A_i] = -\frac{1}{2} (\mathbf{a}^\dagger \sigma_i \mathbf{C} \mathbf{b}^\dagger - \mathbf{a} \mathbf{C} \sigma_i \mathbf{b}) \quad (37)$$

con . L'algebra che ne risulta è ora chiusa, e le regole di commutazione non nulle possono essere riassunte in:

$$(38)$$

dove la metrica è diagonale di elementi (1,1,1,1,-1,-1). Siamo giunti dunque a un'algebra di tipo  $\mathfrak{so}(4,2)$ . I 15 generatori possono essere espressi sinteticamente nella matrice antisimmetrica  $L_{\alpha\beta}$ :

$$(39)$$

Dalla (38) si evince subito che il massimo numero di generatori che commutano simultaneamente è 3; il rango di  $SO(4,2)$  è dunque 3 e i 3 operatori di Casimir possono essere presi come:

$$(40)$$

dove

Sugli stati idrogenici (in cui  $j = j'$ ), abbiamo:

$SO(4,2)$  possiede una ricca struttura di sottogruppi. Studiamo ora la struttura del sottogruppo  $SO(2,1) \times SO(2,1)$ , strettamente connesso all'esistenza degli stati parabolici. Definiamo infatti gli operatori:

$$(41)$$

I commutatori possono essere facilmente calcolati, e danno:

$$\text{con} \quad (42)$$

Vi riconosciamo dunque due sottoalgebre disgiunte isomorfe a  $\mathfrak{so}(2,1)$ . Come al solito, definiamo gli operatori a scala . In termini degli operatori bosonici, abbiamo:

Ricordiamo che, in termini dei numeri quantici parabolici, abbiamo:

Gli autoket possono dunque essere generati a partire dal ket "vuoto" (vedi (30)) come:

Utilizzando il risultato precedente, giungiamo a:

(43)

Ora, siccome , recuperiamo il risultato  $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$ .

## 8. Conclusioni

Tramite la teoria dei gruppi, siamo giunti alla risoluzione di un problema simmetrico quale l'atomo di idrogeno; lo studio algebrico restituisce lo spettro dell'idrogeno senza ricorrere a particolari equazioni differenziali, e può in certi casi essere l'unico approccio a problemi le cui equazioni differenziali non sono risolubili; lo studio del gruppo dinamico costituisce un esempio di approccio a gruppi non compatti, che possono essere utilizzati in alcuni modelli di fisica delle particelle. In conclusione, l'atomo di idrogeno è un esempio relativamente semplice di applicazione di una tecnica algebrica potente, utilizzabile in molti campi della fisica.

## 9. Bibliografia

L. Landau & E. Lifchitz, "*Mécanique Quantique*", Mir, Mosca, 1974.

J.J. Sakurai, "*Meccanica Quantistica Moderna*", Zanichelli, Roma, 1996.

L.I. Schiff, "*Quantum mechanics*", 3rd Ed., McGraw-Hill, New York, 1968.

B.G. Wybourne, "*Classical Groups for Physicists*", John Wiley, New York, 1974.

W. Pauli, "*On the hydrogen spectrum from the standpoint of the new quantum mechanics*" Z. Phys. **36**, 336 (1926); Traduzione in: *Sources of Quantum Mechanics*, (North-Holland, 1967), B.L. van der Waerden.

V. Fock, "*On the theory of the hydrogen atom*", Z. Phys. **98**, 145 (1935).

V. Bargmann, "*On the theory of the hydrogen atom. Comments on the paper of the same title by V. Fock*", Z. Phys. **99**, 576 (1936).

M. Bander & C. Itzykson, "*Group Theory and the Hydrogen Atom (I)*", Rev. Mod. Phys. **38**, 330 (1966).

- H. Kleinert, “*Group dynamics of the hydrogen atom*”, Lectures in Theoretical Physics, New York 1968, pp. 427-482.
- B.G. Adams, J. Cizek & J. Paldus, “*Lie Algebraic methods and their applications to simple quantum systems*”, da “*Dynamical groups and spectrum generating algebras*”, A. Bohm, Y. Ne’eman, A.O. Barut & al., World Scientific, 1988.
- S.A. Pol’shin, “*Coherent states for the hydrogen atom: discrete and continuous spectra*” *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** 11083-11094 (2001).
- C.E. Burkhardt & J.J. Leventhal, “*Lenz vector operations on spherical hydrogen atom eigenfunctions*”, *Am. J. Phys.* **72** (8), August 2004.

## 10. Appendice

Alleghiamo di seguito la copia di un notebook di *Mathematica* con il quale sono stati effettuati alcuni dei conti di questa dissertazione.