Capitolo 7

Rotazioni e momento angolare

7.1 Rotazioni

In meccanica classica le rotazioni nello spazio costituiscono una classe di trasformazioni canoniche il cui generatore è il momento angolare orbitale. Una rotazione si può sempre decomporre in tre rotazioni indipendenti, una attorno all'asse x, una attorno all'asse y ed una attorno all'asse z così come una traslazione si può sempre decomporre in tre traslazioni indipendenti. La differenza sta nel fatto che per le traslazioni l'ordine in cui si effettuano le tre traslazioni indipendenti è arbitrario e questo implica il fatto che i generatori $\mathbf{p_x}$,$\mathbf{p_y}$ e $\mathbf{p_z}$ commutano, mentre nel caso delle rotazioni l'ordine è essenziale come è illustrato nell'esempio della figura. Un corpo posto lungo l'asse y positivo viene sottoposto a tre rotazioni antiorarie di $\pi/2$ nell'ordine $R_x(\pi/2)$,$R_y(\pi/2)$,$R_z(\pi/2)$: il corpo ritorna nella posizione di partenza. Se effettuiamo le rotazioni in ordine inverso il corpo si colloca lungo l'asse y negativo. La conseguenza di ciò è, come vedremo sotto, che i generatori $\mathbf{l_x}$,$\mathbf{l_y}$ ed $\mathbf{l_z}$ non commutano il chè ha profonde implicazioni sulle proprietà del momento angolare. Le rotazioni vengono descritte da matrici 3×3 nello spazio reale.

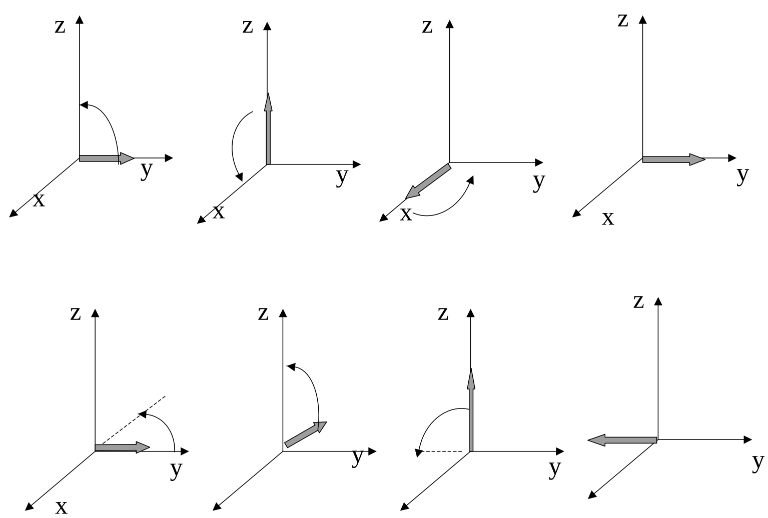

Figura 7.1: Tre rotazioni indipendenti ciascuna di 90 gradi attorno ai tre assi. Sopra l'ordine è R_x, R_y, R_z; sotto l'ordine è R_z, R_y, R_x. Il risultato finale dipende dall'ordine!

Indichiamo con $R_z(\delta\phi)$ una rotazione infinitesima di $\delta\phi$ attorno all'asse z. L'effetto della rotazione sul vettore $\vec{r}$ in coordinate polari è

$$\begin{aligned} x' &= rcos\theta\ cos(\phi + \delta\phi) \\ &= r\ cos\theta\ (cos\phi - sin\phi\ \delta\phi - 1/2cos\phi\ \delta\phi^2) \\ &= x - y\ \delta\phi - 1/2\ x\ \delta\phi^2 \\ y' &= rcos\theta\ sin(\phi + \delta\phi) \\ &= y + x\ \delta\phi - 1/2\ y\ \delta\phi^2 \\ z' &= z \end{aligned}$$

Analogamente possiamo ricavare le rotazioni $R_x(\delta\phi)$ e $R_y(\delta\phi)$ attorno all'asse x e y rispettivamente. Adoperando la notazione matriciale possiamo scrivere

$$\mathbf{R_z}(\delta\phi) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2}\delta\phi^2 & -\delta\phi & 0 \\ \delta\phi & 1 - \frac{1}{2}\delta\phi^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

La rotazione $R_y(\delta\phi)$ si ottiene da $R_z(\delta\phi)$ scambiando y con -z (il segno meno per avere sempre una terna sinistrorsa), quindi

$$\mathbf{R_y}(\delta\phi) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2}\delta\phi^2 & 0 & \delta\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\delta\phi & 0 & 1 - \frac{1}{2}\delta\phi^2 \end{pmatrix}$$

La rotazione $R_x(\delta\phi)$ si ottiene invece scambiando semplicemente x con z e pertanto

$$\mathbf{R_x}(\delta\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{1}{2}\delta\phi^2 & -\delta\phi \\ 0 & \delta\phi & 1 - \frac{1}{2}\delta\phi^2 \end{pmatrix}.$$

Il fatto che la rotazione dipende dall'ordine in cui le tre rotazioni indipendenti vengono effettuate comporta che le matrici di rotazione corrispondenti non commutano. Calcolando i commutatori si trova facilmente al secondo ordine in $\delta\phi$

$$R_x(\delta\phi)R_y(\delta\phi) - R_y(\delta\phi)R_x(\delta\phi) = R_z(\delta\phi^2) - I \tag{7.1}$$

Le altre relazioni di commutazione si ottengono permutando circolarmente xyz.

Andiamo ora alla MQ, dove le rotazioni spaziali verranno descritte, come le altre trasformazioni di simmetria, da operatori unitari. Per una rotazione infinitesima $\delta\phi$ attorno all'asse $\hat{v}$ scriviamo

$$\mathbf{U}_{\hat{v}}(\delta\phi) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\vec{\delta\phi} \cdot \tilde{\mathbf{j}} \tag{7.2}$$

dove $\vec{\delta\phi}$ ha la direzione e il verso di $\hat{v}$. Identifichiamo il generatore di una rotazione attorno all'asse $\hat{v}$ con la proiezione del momento angolare attorno a quell'asse, in analogia al ruolo del momento angolare in meccanica classica.

Così come esistono delle ben definite regole di commutazione delle matrici di rotazione devono anche esistere altrettanto precise regole di commutazione tra gli operatori di rotazione e quindi tra i rispettivi generatori. Per ottenerle facciamo l'assunzione fondamentale che esista un isomorfismo tra il gruppo degli operatori di rotazione ed il gruppo delle matrici di rotazione, cioè le regole di commutazione che valgono per le matrici di rotazione valgono anche per gli operatori di rotazione.

Facciamo una breve digressione. Uno può immaginare di estendere la nozione di rotazione a spazi diversi dallo spazio reale per cui valgono le stesse regole di commutazione e quindi definire i generatori chiamandoli ancora momento angolare con analoghe proprietà di quelle che andremo a derivare subito. Questo è il caso delle rotazioni nello spazio intrinseco di un sistema quantico, chiamato anche spazio dello spin (o momento angolare intrinseco). Quest'ultimo fu introdotto per spiegare nell'esperimento di Stern e Gerlach lo splitting di molti atomi in un numero pari di componenti (ma anche altri fenomeni). Secondo l'ipotesi dello spin infatti il momento angolare totale di un elettrone per esempio si compone del suo momento angolare orbitale (intero) e dello spin (semintero)

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \tag{7.3}$$

che da luogo ad un numero pari di componenti secondo la regola $2j + 1$ che dimostreremo nel seguito.

Assumiamo allora che le regole di commutazione (Eq.(7.1)) siano soddisfatte dagli operatori di rotazione in meccanica in MQ, cioè

$$\mathbf{U}_x(\delta\phi)\mathbf{U}_y(\delta\phi) - \mathbf{U}_y(\delta\phi)\mathbf{U}_x(\delta\phi) = \mathbf{U}_z(\delta\phi^2) - \mathbf{1} \tag{7.4}$$

e circolando si scrivono le altre. Scrivendo esplicitamente gli operatori $\mathbf{U}$ in termini dei rispettivi generatori $\mathbf{j_x}$,$\mathbf{j_y}$,$\mathbf{j_z}$, troviamo le regole di commutazione tra le componenti del momento angolare (nel seguito riserveremo il simbolo $\mathbf{l}$ al momento angolare orbitale e $\mathbf{j}$ al momento angolare totale):

$$[\mathbf{j}_x, \mathbf{j}_y] = i\hbar\, \mathbf{j}_z \quad , [\mathbf{j}_y, \mathbf{j}_z] = i\hbar\, \mathbf{j}_x \quad , [\mathbf{j}_z, \mathbf{j}_x] = i\hbar\, \mathbf{j}_y \quad . \tag{7.5}$$

Poichè i generatori delle rotazioni non commutano tra di loro, le rotazioni stesse formano un gruppo non abeliano.

Generelizzando l'espressione classica potremmo definire il momento angolare orbitale in MQ come $\mathbf{l} = \tilde{\mathbf{r}} \times \tilde{\mathbf{p}}$ da cui potremmo ricavare le regole di commutazione di $\mathbf{l}$ dalle regole di commutazione tra posizione ed impulso. Si trova facilmente che questa procedura porta allo stesso risultato. Ma la procedura seguita è piu generale perchè interessa non solo $\mathbf{l}$ ma $\mathbf{j}$, e quindi altre forme di momento angolare come discusso prima.

7.2 Proprietà del momento angolare

Dalle regole di commutazione Eq. (7.5) si vede che le componenti del momento angolare formano un'algebra chiusa. Questa è la ragione di fondo per cui le proprietà del momento angolare in MQ si possono dedurre con metodi puramente algebrici, senza dover ricorrere alla risoluzione di equazioni differenziali.

Partiamo dal fatto che le componenti di $\mathbf{j}$ non commutano tra di loro , quindi non si possono determinare autostati simultanei delle tre componenti. In altri termini ad un sistema quantico non si possono assegnare le tre componenti del momento angolare e nemmeno due. Tuttavia osserviamo che il modulo quadro del momento angolare $\mathbf{j^2} = \mathbf{j_x^2} + \mathbf{j_y^2} + \mathbf{j_z^2}$ è invariante per rotazioni e quindi commuta con ciascuna delle componenti. Allora si possono determinare autostati simultanei di $\mathbf{j^2}$ e di una delle componenti. Convenzionalmente si sceglie $\mathbf{j_z}$. Possiamo quindi risolvere le equazioni agli autovalori

$$\mathbf{j^2}|jm> \quad = \quad |jm> \hbar^2 j(j+1) \tag{7.6}$$

$$\mathbf{j_z}|jm> \quad = \quad |jm> \hbar m \tag{7.7}$$

Gli autovalori sono espressi in unità di $\hbar$ che, come il momento angolare, ha le dimensioni di una azione; tuttavia negli sviluppi algebrici che seguono porremo $\hbar = 1$ per semplicità di scrittura. Gli autovalori di $\mathbf{j^2}$ si sono scritti nella forma $j(j+1)$ (con $j > 0$) per convenienza ma ciò non porta a restrizioni poiché devono comunque essere positivi o nulli. Gli stati $|lm>$, in quanto autostati di osservabili fisiche, devono soddisfare alle relazioni di completezza ed ortonormalità

$$\sum_{l,m} |lm >< lm| = \mathbf{1} \tag{7.8}$$

$$< lm|l'm' > = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{7.9}$$

Definiamo due operatori ausiliari $\mathbf{j}_\pm = \mathbf{j_x} \pm i\mathbf{j_y}$, che sono l'uno aggiunto dell'altro. Si dimostrano facilmente a partire dalle Eq.(7.5) le seguenti regole di commutazione

$$[\mathbf{j_z}, \mathbf{j}_\pm] = \pm\mathbf{j}_\pm \tag{7.10}$$

$$[\mathbf{j}_+, \mathbf{j}_-] = 2\mathbf{j_z} \tag{7.11}$$

$$[\mathbf{j^2}, \mathbf{j}_+] = [\mathbf{j^2}, \mathbf{j}_-] = 0 \tag{7.12}$$

da cui si deducono le identità

$$\mathbf{j}_\mp\mathbf{j}_\pm = \mathbf{j^2} - \mathbf{j_z}(\mathbf{j_z} \pm \mathbf{1}) \tag{7.13}$$

Dall'Eq.(7.12) segue che $\mathbf{j}_\pm|jm>$ è autostato di $\mathbf{j^2}$:

$$\mathbf{j^2}\mathbf{j}_\pm|jm >= \mathbf{j}_\pm\mathbf{j^2}|jm >= j(j+1)\mathbf{j}_\pm|jm > \tag{7.14}$$

Dall.Eq. (7.10) segue che $\mathbf{j}_\pm|jm>$ è anche autostato di $\mathbf{j_z}$:

$$\mathbf{j_z}\mathbf{j}_\pm|jm >= [\mathbf{j_z}, \mathbf{j}_\pm]|jm > +\mathbf{j}_\pm\mathbf{j_z}|jm >= \pm\mathbf{j}_\pm|jm > +m\mathbf{j}_\pm|jm >= (m \pm 1)\mathbf{j}_\pm|jm > \tag{7.15}$$

Dalle Eq.(7.13) segue poi che il modulo quadro dei vettori $\mathbf{j}_\pm|jm>$

$$< jm|\mathbf{j}_\mp\mathbf{j}_\pm|jm >= j(j+1) - m(m \pm 1) \geq 0 \tag{7.16}$$

Il segno di uguagianza vale se e solo se $j = \pm m$. L'equazione precedente equivale ad un sistema di due disequazioni la cui soluzione da

$$-j \leq m \leq +j \tag{7.17}$$

Si ha $\mathbf{j}_+|jm >= 0$ se e solo se $m = j$ e $\mathbf{j}_-|jm >= 0$ se e solo se $m = -j$. Applicando p volte l'operatore $\mathbf{j}_+$ ad un autostato $|jm>$ si ottiene un autostato con autovalore m+p. Ci sarà un p_{max} per cui

$$\mathbf{j}_+|j, m + p_{max} >= 0$$

allora $m + p_{max} = j$, essendo j l'estremo superiore degli autovalori di $\mathbf{j_z}$. Analogamente, applicando q volte l'operatore $\mathbf{j}_-$ ad un autostato $|jm>$ si ottiene un autostato con autovalore m-q. Ci sarà un q_{max} per cui

$$\mathbf{j}_-|j, m - q_{max} >= 0$$

allora $m - q_{max} = -j$, essendo -j l'estremo inferiore degli autovalori di $\mathbf{j_z}$. Sottraendo membro a membro le due relazioni segue che $2j = p_{max} + q_{max}$, quindi **i possibili valori di l sono o numeri interi o**

numeri seminteri. Gli m sono anch'essi interi o semionteri e variano di unità intere da -j a +j. Il loro numero è 2j+1.Per esempio per j=2, i possibili valori di m sono:-2,-1,0,1,2. Lo spettro degli autovalori di $\mathbf{j_z}$ si osserva sperimentalmente nell'esperimento di Stern e Gerlach: il numero delle componenti in cui si decompone il fascio di atomi dopo aver attraversato il campo magnetico disomogeneo è uguale al numero degli autovalori di $\mathbf{j_z}$ e quindi, in virtù della regola 2j+1, questo numero ci dice quanto vale j, in particolare se il numero delle componenti è dispari, j è intero, se è pari j è semintero. L'osservazione di un numero pari di componenti, cioè j semintero, è una evidenza dell'esistenza dello spin $s = \frac{1}{2}\hbar$ dell'elettrone. Vedremo dopo che se il momemto angolare è puramente orbitale (no spin) i suoi autovalori sono numeri interi e così anche gli autovalori della sua proiezione $\mathbf{j_z}$.

In conclusione abbiamo determinato lo spettro degli autovalori simultanei di $\mathbf{j^2}$ e $\mathbf{j_z}$. Gli autovettori si generano applicando ripetutamente l'operatore $\mathbf{j}_+$ (operatore di innalzamento) o $\mathbf{j}_-$ (operatore di abbassamento) allo stato $|jm>$. Il problema è che dobbiamo conoscere almeno uno degli autostati per generare gli altri; vedremo nel prossimo paragrafo come determinare in particolare l'autostato $|jj>$ con m=j.

7.3 Momento angolare orbitale in coordinate polari

Nel precedente paragrafo si aveva in mente rotazioni che includono anche lo spin come generatore. In questa sezione restringiamo la nostra analisi al caso delle rotazioni nello spazio il cui generatore è il momento angolare orbitale $\mathbf{l}$. Vediamo come le funzioni d'onda $\psi(\vec{r})$ si trasformano per rotazioni nello spazio. Ricordiamo che il vettore di posizione $\vec{r}$ per rotazioni infinitesime dell'angolo $\delta\phi$ attorno alla direzione $\hat{u}$ si trasforma secondo la legge

$$\vec{r} + \delta\vec{r} = \vec{r} + \vec{\delta\phi} \times \vec{r} \tag{7.18}$$

dove il vettore $\vec{\delta\phi}$ ha la direzione di $\hat{u}$ il modulo $\delta\phi$ ed il verso è quello da cui si vede la rotazione avvenire in senso antiorario. Consideriamo l'effetto della trasformazione infinitesima sulla funzione d'onda

$$\begin{aligned}
<\vec{r}|\psi_R> = <\vec{r}|\mathbf{U}_{\hat{u}}(\delta\phi)|\psi> &= \psi(\vec{r} - \vec{\delta r}) && (7.19)\\
&= \psi(\vec{r}) - \vec{\delta\phi} \times \vec{r} \cdot \nabla\psi && (7.20)\\
&= \psi(\vec{r}) - \vec{\delta\phi} \cdot \vec{r} \times \nabla\psi. && (7.21)
\end{aligned}$$

Nella prima linea abbiamo applicato l'operatore di rotazione sul vettore di sinistra $<\vec{r}|$ (che ruota di -$\delta\vec{r}$) e quindi nella seconda linea abbiamo sviluppato in serie di Taylor al primo ordine in $\delta\phi$. Nell'ultima linea abbiamo scambiato il prodotto scalare col prodotto vettoriale. Dalla espressione dell'operatore di rotazione, Eq. (7.2), segue

$$\frac{i}{\hbar} <\vec{r}|\vec{\delta\phi} \cdot \mathbf{l}|\psi> = \vec{\delta\phi} \cdot \vec{r} \times \nabla\psi \tag{7.22}$$

Ricordando che $\tilde{\mathbf{p}} \to (\hbar/i)\nabla$, possiamo esprimere il momento angolare orbitale in termini dell'impulso, cioè $\vec{\mathbf{l}} = \tilde{\mathbf{r}} \times \tilde{\mathbf{p}}$. Questa espressione è equivalente all'espressione classica del momento angolare orbitale.

Consideriamo una rotazione infinitesima attorno all'asse z. In questo caso, poichè $\vec{\phi}$ è nella direzione di z, abbiamo $l_z = \frac{\hbar}{i}(x\partial_y - y\partial_x)$. Ora una rotazione infinitesima attorno all'asse z corrisponde ad una variazione dell'angolo azimutale ϕ di $\delta\phi$ senza variazione dell'angolo radiale θ. Si verifica facilmente (vedi Appendice)

$$\frac{\hbar}{i}(x\partial_y - y\partial_x)\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial\phi} \tag{7.23}$$

L'espressione di una rotazione attorno all'asse x o all'asse y in coordinate polari è meno semplice poichè in questi casi varia non solo ϕ ma anche θ. Riportiamo semplicemente le espressioni di $\mathbf{l_+}$ ed $\mathbf{l_-}$ che saranno utili nel seguito

$$< \vec{r}|\mathbf{l_\pm}|\psi >= e^{\pm i\phi}[\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + icot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}]\psi \tag{7.24}$$

Per la dimostrazione vedi l'Appendice. Dalle Eq. (7.23) e (7.24) si deduce l'espressione di $\mathbf{l^2}$ in coordinate polari

$$\mathbf{l^2} = \mathbf{l_+l_-} + \mathbf{l_z}(\mathbf{l_z} + \mathbf{1}) = -[\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}] \tag{7.25}$$

Abbiamo ora quanto serve per determinare gli autostati del momento angolare orbitale $|lm>$ nella rappresentazione delle coordinate polari. Chiamiamo $Y_{lm}(\theta,\phi)$ la funzione d'onda del sistema che è autofunzione simultanea di $\mathbf{l^2}$ ed $\mathbf{l_z}$ (notiamo che le autofunzioni del momento angolare non dipendono dalla coordinata radiale r, poiché le rotazioni non modificano il modulo di un vettore). L'equazione agli autovalori per $\mathbf{l_z}$ nella rappresentazione delle coordinate polari si scrive in virtù dell'Eq. ()

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(r,\theta,\phi)}{\partial\phi} = \hbar m\psi(r,\theta\phi) \tag{7.26}$$

L'integrale di questa equazione è

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = f_{lm}(\theta)e^{im\phi} \tag{7.27}$$

A questo punto possiamo trarre una importante conclusione. Per poterle interpretare come ampiezze di probabilità queste autofunzioni devono essere ad un sol valore, in altri termini l'esponenziale dev'essere tale che

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi+2\pi)} \tag{7.28}$$

per cui m dev'essere intero e quindi anche l dev'essere intero. **Gli autovalori del momento angolare orbitale sono quindi numeri interi**. Vedremo invece che la dipendenza dallo spin può generale autovalori del momento angolare totale che sono numeri seminteri.

Consideriamo infine lo stato $|ll>$ che gode della proprietà $\mathbf{l_+}|ll>= 0$ poichè si deve avere $m \leq l$. Quest'ultima in coordiante polari si scrive

$$\begin{aligned} < \vec{r}|\mathbf{l_+}|ll > &= e^{i\phi}[\frac{\partial}{\partial\theta} + icot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}]|Y_{ll}(\theta,\phi) = & (7.29)\\ &= e^{i(1+l)\phi}[\frac{\partial f_{lm}(\theta)}{\partial\theta} - lcot\theta f_{lm}(\theta)] = 0. & (7.30)\end{aligned}$$

L'equazione differenziale che ne segue ammette come soluzione $sin^l\theta$. Quindi l'autofunzione simultanea di $\mathbf{l^2}$ ed $\mathbf{l_z}$ è

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = cost \cdot sin^l(\theta)e^{im\phi} \tag{7.31}$$

La costante si può fissare imponendo la normalizzazione ad 1. Una volta determinata l'autofunzione appartenente agli autovalori l ed m=l, si possono determinare le altre autofunzioni appartenenti agli autovalori l ed $m < l$ applicando ripetutamente l'operatore $\mathbf{l_-}$, nella forma data dall'Eq. (7.24), all'autofunzione Y_{ll}. Le funzioni d'onda Y_{lm} si chiamano armoniche sferiche e formano un insieme completo ortonormale, come imposto dal fatto che $\mathbf{l^2}$ ed $\mathbf{l_z}$ sono osservabili fisiche. Quindi

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\Omega)Y_{lm}(\Omega') &= \delta(\Omega,\Omega') & (7.32)\\ \int d\Omega\ \ Y^*_{lm}(\Omega)Y_{l'm'}(\Omega) &= \delta_{ll'}\delta_{mm'} & (7.33)\end{aligned}$$

dove $\Omega \equiv (\theta,\phi)$ e $d\Omega \equiv dsin\theta\ d\phi$ Queste equazioni corrispondono alle proprietà di completezza ed ortonormalità degli stati $|lm>$ date dalle Eq.(7.8) e (7.9).

7.4 Spin

La presenza dello spin si manifesta tutte le volte che atomi (dotati di spin) entrano in interazione con campi magnetici come nel caso dell'esperimento di Stern e Gerlach o nel caso dell'effetto Zeeman. In entrambi i casi si deve supporre che ciascun elettrone, oltre a possedere un momento angolare orbitale $\vec{l}$ possegga un momento angolare di spin $\vec{s}$ dovuto al moto intrinseco. Quest'ultimo ha per l'elettrone un modulo pari ad $\frac{1}{2}\hbar$. I due momenti angolari si accoppiano nel momento angolare totale

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \tag{7.34}$$

La presenza dello spin (semintero) genera momenti angolari totali seminteri e quindi la separazione di fasci atomici nell'espeimento di Stern e Gerlach in un numero intero di componenti corrispondenti alle 2j+1 proiezioni di $\vec{j}$ nella direzione del campo magnetico. Analogamente genera nell'effetto Zeeman lo splitting di un livello elettronico in un numero 2j+1 pari di livelli in presenza di un campo magnetico. Lo spin dell'elettrone ha tutte le proprietà algebriche del momento angolare. Avendo lo spin valore $\frac{1}{2}\hbar$ ci sono due soli valori della proiezione lungo un asse arbitrario (che assumeremo come asse z), e cioè $\pm\frac{1}{2}\hbar$. Dal punto di vista geometrico si può assumere che lo spin genera rotazioni nello spazio dello spin, che, come detto, ha due dimensioni. I due stati di spin sono autostati simultanei di $\mathbf{s^2}$ ed $\mathbf{s_z}$:

$$\mathbf{s^2}|s, s_z> \quad = \quad \hbar^2 s(s+1)|s, s_z> \tag{7.35}$$

$$\mathbf{s_z}|s, s_z> \quad = \quad \hbar s_z|s, s_z>, \tag{7.36}$$

dove $s = \frac{1}{2}$ ed $s_z = \pm\frac{1}{2}$. Nel seguito poniamo $|s, s_z> \equiv |s_z>$. I due autostati dello spin formano un insieme completo ortonormale nello spazio di Hilbert a due dimensioni.

Essendo l'autovalore di $\mathbf{s^2}$ uguale a $\frac{3}{4}\hbar^2$, si ha anche

$$\mathbf{s_x^2} = \mathbf{s_y^2} = \mathbf{s_z^2} = \frac{1}{4}\hbar^2. \tag{7.37}$$

Si introducono poi $\mathbf{s_\pm}$ che trasformano uno stato nell'altro. Il loro quadrato, non potendo variare s_z di due unità è identicamente nullo:

$$\mathbf{s_+^2} = \mathbf{s_-^2} = \mathbf{0} \tag{7.38}$$

Da qui seguono le regole di anticommutazione

$$\mathbf{s_x s_y} + \mathbf{s_y s_x} = \mathbf{s_y s_z} + \mathbf{s_z s_y} = \mathbf{s_z s_x} + \mathbf{s_x s_z} = \mathbf{0} \tag{7.39}$$

Si suole introdurre $\vec{s} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$. Le matrici 2x2 che rappresentano $\tilde{\sigma}$ nello spazio dello spin prendono il nome di matrici di Pauli e rivestono grande importanza nello studio dello spin. Avendo σ_z autovalori ± 1 la matrice corrispondente si scrive

$$\sigma_\mathbf{z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Per gli elementi di matrice di $\sigma_\mathbf{x,y}$ osserviamo che gli elementi diagonali sono nulli di cui ci si convince scrivendoli in termini di $\sigma_\pm$ e osservando che $< \pm|\sigma_+|\pm > = < \pm|\sigma_-|\pm > = 0$. Gli elementi non diagonali si ottengono facilmente dalle Eq.i (37)-(39). In definitiva si ottiene

$$\sigma_\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_\mathbf{y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_\mathbf{z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

7.5 Rotatore rigido

Rotazioni nello spazio sono comuni ad atomi e molecole e danno luogo alle cosiddette bande rotazionali, cioè spettri di energia dovuti all'accoppiamento delle transizioni elettroniche con stati di rotazione dell'intero sistema. Per un moto rotatorio in tre dimensioni nello spazio reale la Hamiltoniana si scrive

$$\mathbf{H} = \frac{\hbar^2 \mathbf{l_x^2}}{2\mathcal{I}}_x + \frac{\hbar^2 \mathbf{l_y^2}}{2\mathcal{I}}_y + \frac{\hbar^2 \mathbf{l_z^2}}{2\mathcal{I}}_z, \tag{7.40}$$

dove $\vec{l}$ è il momento angolare orbitale e $\mathcal{I}_i$ il momento d'inerzia lungo l'asse i. Se $\mathcal{I}_x = \mathcal{I}_y = \mathcal{I}_z$ il rotatore è isotropo. Se il momento d'inerzia è costante si parla di rotazione rigida. Se la rotazione avviene attorno ad un asse, diciamo l'asse z, allora interviene $\mathbf{l_z^2}$ nella Hamiltoniana. L'equazione agli autovalori della Hamiltoniana di un rotatore isotropo rigido è la stessa di quella di $\mathbf{l^2}$ ed quindi

$$\mathbf{H}|lm> = \frac{\hbar^2 \mathbf{l^2}}{2\mathcal{I}}|lm> = |lm> \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mathcal{I}}. \tag{7.41}$$

Autostati con lo stesso autovalore l ma con diverso di m hanno la stessa energia. Si dice allora che l'autovalore di energia $E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mathcal{I}}$ è 2l+1 volte degenere, giacchè vi sono 2m+1 autostati distinti appartenenti allo stesso l.

Considerazioni analoghe si fanno per rotazioni associate allo spin o al momento angolare totale.