

Simmetrie della hamiltoniana e degenerazione

1. Simmetrie e gruppi di trasformazioni

In meccanica quantistica hanno grande importanza le *simmetrie* della hamiltoniana, dove per simmetria si intende l'invarianza rispetto a un gruppo di trasformazioni. Si possono avere vari tipi di trasformazioni: discrete e in numero finito (come la parità, le permutazioni di particelle identiche, le trasformazioni spaziali di una molecola simmetrica, ecc.); o anche discrete e in numero infinito (per esempio le traslazioni in un reticolo indefinito); oppure si possono avere trasformazioni continue, come ad esempio le traslazioni spaziali e temporali, le rotazioni, le trasformazioni di Lorentz, le trasformazioni interne.

A una data trasformazione corrisponde un operatore unitario T che trasforma il vettore di stato del sistema: $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = T|\psi\rangle$. Gli operatori di un dato tipo di trasformazioni formano un gruppo, che può essere, a seconda dei casi, finito, infinito o continuo. Qui ci occuperemo soltanto di trasformazioni continue, i cui elementi dipendono cioè da un insieme di parametri continui. Gli operatori di trasformazione saranno quindi degli operatori unitari $T(a_1, \dots, a_n)$, che supporremo siano funzioni continue e derivabili di n parametri reali a_1, \dots, a_n . Questi operatori formano quello che si chiama un *gruppo di Lie*. Per esempio gli operatori di rotazione $R(\alpha, \beta, \gamma)$, funzioni degli angoli di Eulero α, β, γ , formano il gruppo (di Lie) delle rotazioni.

Per convenzione, l'origine dello spazio dei parametri ($a_i = 0$) corrisponde alla trasformazione identica, cioè $T(0, \dots, 0) = \mathbb{1}$. Se i parametri sono infinitesimi, e li indicheremo con ε_i , sviluppando fino al primo ordine negli ε_i si ha la relazione

$$(1.1) \quad T(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) = \mathbb{1} - i \sum_{i=1}^n \varepsilon_i G_i$$

che definisce i *generatori* G_i del gruppo. Dal fatto che T è unitario, cioè $T^\dagger = T^{-1}$, e che gli ε_i sono arbitrari, segue che $G^\dagger = G$. Quindi i generatori G_i sono operatori autoaggiunti e corrispondono generalmente a delle osservabili.

2. Conseguenze dell'invarianza di H

Supponiamo che la hamiltoniana H di un sistema sia invariante rispetto alle trasformazioni $T = T(a_i)$, cioè che si abbia

$$(2.1) \quad T H T^{-1} = H,$$

per qualunque valore dei parametri a_i . Da questa proprietà seguono due risultati importanti:

- (i) *i generatori G_i sono costanti del moto;*
- (ii) *se il gruppo di invarianza è non abeliano, allora gli autovalori dell'energia sono degeneri.*

La prima proprietà si dimostra immediatamente. Infatti la (2.1) si può riscrivere nella forma $[T, H] = 0$ e prendendo i parametri infinitesimi, dalla (1.1) si ottiene la relazione

$$(2.2) \quad [G_i, H] = 0$$

che corrisponde a dire che i G_i sono costanti del moto¹.

Anche il secondo risultato segue dalla relazione $[T, H] = 0$. Infatti se $|\psi_E\rangle$ è un autovettore dell'energia, tale che

$$(2.3) \quad H|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle,$$

applicando l'operatore T e commutando con H si ottiene

$$(2.4) \quad TH|\psi_E\rangle = HT|\psi_E\rangle = ET|\psi_E\rangle.$$

Dunque anche il vettore trasformato $T|\psi_E\rangle$ è autovettore di H con autovalore E . Se allora $|\psi_E\rangle$ e $T|\psi_E\rangle$ sono linearmente indipendenti, si ha degenerazione.

Si dimostra facilmente che questo non accade se il gruppo è abeliano. Infatti in questo caso due operatori qualsiasi $T(a_i)$ e $T(a'_i)$ commutano. Allora, prendendo i parametri infinitesimi e usando la (1.1), si vede che tutti i generatori commutano fra loro, cioè

$$(2.5) \quad [G_i, G_j] = 0.$$

Le (2.2) e (2.5) ci dicono che H e G_i ammettono una base di autovettori comuni, che indicheremo con $|E, g_i, \alpha\rangle$, dove abbiamo indicato con g_i ($i = 1, \dots, n$) gli autovalori dei G_i e con α gli altri eventuali numeri quantici del sistema. Poiché qualunque trasformazione $T(a_i)$ si può esprimere come funzione² dei G_i , ne segue che $T(a_i)$ è diagonale in questa base e si può scrivere

$$(2.6) \quad T(a_i)|E, g_i, \alpha\rangle = t(a_i)|E, g_i, \alpha\rangle,$$

dove l'autovalore $t(a_i)$ è un numero complesso di modulo 1. In conclusione il ket di partenza e quello trasformato sono proporzionali e corrispondono quindi allo stesso stato fisico. Questo non ci permette di dimostrare che ci sia degenerazione.

Se invece il gruppo delle trasformazioni T è non abeliano, i generatori obbediscono alle relazioni di commutazione

$$(2.7) \quad [G_i, G_j] = iC_{ij}^k G_k,$$

¹ Nella rappresentazione di Heisenberg si ha direttamente $\dot{G}_i = \frac{1}{i\hbar}[G_i, H] = 0$. Nella rappresentazione di Schrödinger questo risultato vale per i valori di aspettazione, si ha cioè $\frac{d}{dt}\langle\psi|G_i|\psi\rangle = 0$, per qualunque vettore di stato $|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle$ che obbedisce all'equazione di Schrödinger.

² Scegliendo opportunamente i parametri si può scrivere

$$T(a_i) = \exp\left(-i \sum_{i=1}^n a_i G_i\right).$$

dove è sottintesa la somma sull'indice ripetuto k . Le relazioni (2.7) costituiscono l'algebra di Lie e le costanti C_{ij}^k si chiamano le *costanti di struttura* dell'algebra.

Un'algebra di Lie ammette diverse *rappresentazioni*, in ciascuna delle quali i generatori sono rappresentati da matrici di una data *dimensione*, che obbediscono alla stessa algebra (2.7). Un'algebra è anche caratterizzata dal *rango*, che è il numero massimo di generatori che commutano fra loro.

Indichiamo un generico autostato del sistema con $|E, r, m, \alpha\rangle$, dove r indica la rappresentazione dell'algebra, m indica gli autovalori dei generatori diagonali e α indica tutti gli altri numeri quantici. Applicando a $|E, r, m, \alpha\rangle$ un generatore non diagonale, si ottiene una sovrapposizione³ di stati con gli stessi valori di E, r, α , ma con diversi valori di m . Se ne conclude che il livello E è degenere, con un grado di degenerazione che è almeno uguale al numero dei valori che può assumere m .

Osserviamo che la degenerazione è sempre maggiore di uno, salvo il caso degli stati appartenenti alla rappresentazione unidimensionale. In questo caso gli stati sono invarianti per le trasformazioni T e le matrici \mathcal{G}_i dei generatori sono tutte uguali a zero.

Nei prossimi paragrafi applicheremo questi concetti al caso dell'invarianza per rotazioni, per il quale ritroveremo in modo generale la degenerazione rispetto al numero quantico magnetico; al caso dell'oscillatore armonico tridimensionale, per cui troveremo che la maggiore simmetria della hamiltoniana porta alla degenerazione dei livelli sia rispetto a m che rispetto a l ; e infine al caso dell'atomo d'idrogeno, per cui una diversa simmetria dell'hamiltoniana porta a un risultato analogo.

3. Invarianza per rotazioni

L'invarianza per rotazioni in meccanica (classica o quantistica) si incontra essenzialmente in due casi: nel caso di una particella in un campo centrale e nel caso di un sistema isolato. Dato che il gruppo delle rotazioni è il più semplice fra i gruppi di Lie non abeliani, questo caso servirà come esempio per illustrare i concetti del paragrafo precedente. Il gruppo delle rotazioni viene indicato con i simboli⁴ $SO(3)$ o anche $SU(2)$. I generatori delle rotazioni sono le componenti del momento angolare $j_i = J_i/\hbar$ e obbediscono all'algebra (2.7) con $C_{ij}^k = \varepsilon_{ijk}$. Le rappresentazioni dell'algebra sono identificate dal numero quantico j e hanno dimensione $2j + 1$.

Supponiamo ora che H sia invariante per rotazioni e mostriamo in generale che gli autovalori E sono degeneri. L'invarianza per rotazioni si esprime, come si è detto per le (2.2), mediante le

³ Se indichiamo con $\mathcal{G}_i^{(r)}$ le matrici che rappresentano i generatori G_i nella rappresentazione r , tali che $(\mathcal{G}_i^{(r)})_{m'm} = \langle r, m' | G_i | r, m \rangle$, si ha

$$G_i |E, r, m, \alpha\rangle = \sum_{E' r' m' \alpha'} |E' r' m' \alpha'\rangle \langle E' r' m' \alpha' | G_i |E, r, m, \alpha\rangle = \sum_{m'} (\mathcal{G}_i^{(r)})_{m'm} |E, r, m', \alpha\rangle.$$

⁴ Questi simboli si riferiscono ai gruppi di matrici: S sta per 'speciali', cioè a determinante 1; U sta per 'unitarie'; O sta per (reali e) 'ortogonali'; il numero fra parentesi indica la dimensione delle matrici. Così $SO(3)$ indica il gruppo delle matrici 3×3 reali, ortogonali e con determinante uguale a 1. Questo gruppo è isomorfo al gruppo delle rotazioni, come risulta evidente prendendo come elementi del gruppo le matrici dei coseni direttori delle rotazioni. Tanto le matrici di $SO(3)$ che quelle di $SU(2)$ dipendono da 3 parametri reali e si dimostra che fra i due gruppi esiste un omomorfismo, nel senso che a due matrici di $SU(2)$ che differiscono per il segno corrisponde la stessa matrice di $SO(3)$.

relazioni $[j_i, H] = 0$. In particolare sono importanti quelle con i generatori non diagonali

$$(3.1) \quad [j_{\pm}, H] = 0,$$

dove $j_{\pm} = j_x \pm ij_y$ sono gli operatori di spostamento del momento angolare.

Poiché H commuta con \mathbf{j} , un'osservazione massima del sistema comprende gli operatori H, \mathbf{j}^2, j_z . Indichiamo allora gli autostati dell'energia con $|E, j, m, \alpha\rangle$, dove m è l'autovalore di j_z e α rappresenta gli altri eventuali numeri quantici. Scriviamo l'equazione agli autovalori

$$(3.2) \quad H |E, j, m, \alpha\rangle = E |E, j, m, \alpha\rangle$$

e applichiamo a sinistra gli operatori j_{\pm} . Sfruttando le (3.1) si ottiene

$$(3.3) \quad j_{\pm} H |E, j, m, \alpha\rangle = H (j_{\pm} |E, j, m, \alpha\rangle) = E (j_{\pm} |E, j, m, \alpha\rangle).$$

Ricordando che si ha

$$(3.4) \quad j_{\pm} |E, j, m, \alpha\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |E, j, m \pm 1, \alpha\rangle,$$

la (3.3) diventa

$$(3.5) \quad H |E, j, m \pm 1, \alpha\rangle = E |E, j, m \pm 1, \alpha\rangle$$

e ci mostra che l'energia E è indipendente da m e quindi per un dato j si ha degenerazione $2j + 1$.

4. Simmetria dell'oscillatore tridimensionale

Consideriamo un oscillatore armonico isotropo in tre dimensioni, la cui hamiltoniana è data da

$$(4.1) \quad H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \mathbf{x}^2 = \hbar\omega \left(\sum_{i=1}^3 a_i^{\dagger} a_i + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right),$$

dove si sono introdotti gli operatori a_i e a_i^{\dagger} di spostamento dell'energia. Prendiamo come autovettori dell'energia i ket $|n_1, n_2, n_3\rangle$, dati da

$$(4.2) \quad |n_1, n_2, n_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3!}} a_1^{\dagger n_1} a_2^{\dagger n_2} a_3^{\dagger n_3} |0, 0, 0\rangle, \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbf{N}$$

mentre gli autovalori risultano

$$(4.3) \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), \quad n = n_1 + n_2 + n_3$$

Si capisce facilmente che gli operatori

$$(4.4) \quad M_{ij} = a_i^\dagger a_j$$

commutano con N e quindi lasciano invariata l'energia. Infatti applicando M_{ij} a un autovettore $|n_1, n_2, n_3\rangle$ si ha che n_i aumenta di 1 e n_j diminuisce di 1, per cui n rimane invariato. Si può anche verificare algebricamente che si ha

$$(4.5) \quad [M_{ij}, H] = 0.$$

Gli operatori M_{ij} obbediscono all'algebra di Lie

$$(4.6) \quad [M_{ij}, M_{kl}] = \delta_{jk} M_{il} - \delta_{il} M_{kj}.$$

Tuttavia essi non sono autoaggiunti, ma si ha $M_{ij}^\dagger = M_{ji}$. Inoltre la somma $\sum_i M_{ii}$ è l'operatore numero N che compare nella (4.1) ed è quindi legata linearmente ad H . Essa agisce quindi sugli autostati dell'energia come un multiplo dell'identità.

Gli operatori M_{ij} sono le componenti di un tensore del secondo ordine, che è conveniente separare⁵ nel modo seguente:

$$(4.7) \quad \begin{cases} M_{ij} = S_{ij} + iA_{ij} + R\delta_{ij} \\ S_{ij} = \frac{1}{2}(M_{ij} + M_{ji}) - \frac{1}{3}\delta_{ij} \sum_k M_{kk} \\ A_{ij} = \frac{1}{2i}(M_{ij} - M_{ji}) \\ R = \frac{1}{3} \sum_k M_{kk} = \frac{1}{3}N \end{cases}$$

dove S_{ij} è un tensore simmetrico a traccia nulla, che ha 5 componenti indipendenti; A_{ij} è un tensore antisimmetrico, che ha 3 componenti, e R è un operatore scalare uguale a $\frac{1}{3}$ della traccia.

Si vede che S_{ij} , A_{ij} e R sono autoaggiunti. Osseviamo che gli A_{ij} sono uguali alla metà delle componenti del momento angolare \mathbf{l} (in unità \hbar), nel senso che $A_{12} = \frac{1}{2}l_3$, ecc. Si ha infatti

$$(4.8) \quad \begin{aligned} l_i &= \frac{1}{\hbar} \varepsilon_{ijk} x_j p_k = \frac{1}{\hbar} \varepsilon_{ijk} \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} (a_j + a_j^\dagger) \frac{\hbar\alpha}{i\sqrt{2}} (a_k - a_k^\dagger) \\ &= \frac{1}{2i} \varepsilon_{ijk} (a_j^\dagger a_k - a_j a_k^\dagger) = \varepsilon_{ijk} A_{jk} \end{aligned}$$

Gli M_{ij} (ovvero S_{ij} , A_{ij} e R) formano un set di 9 operatori, che sono i generatori del gruppo $U(3)$ ⁶, così denominato perché è il gruppo delle matrici unitarie di dimensione 3. Dalla

⁵ La scomposizione della (4.6) si chiama 'separazione del tensore nelle sue componenti *irriducibili*', in quanto i tensori S_{ij} , A_{ij} e R si trasformano per rotazioni come tensori irriducibili, rispettivamente con $l = 2$, $l = 1$ (vettore, o più precisamente pseudovettore) e $l = 0$ (scalare).

⁶ Questo risulta evidente stabilendo una corrispondenza fra gli operatori di trasformazione T e le matrici 3×3 unitarie β , mediante le relazioni

$$\begin{cases} T^{-1} a_i T = \sum_{j=1}^3 \beta_{ij} a_j \\ T^{-1} a_i^\dagger T = \sum_{j=1}^3 \beta_{ij}^* a_j^\dagger \end{cases} \quad \text{ovvero} \quad \begin{cases} T^{-1} \mathbf{a} T = \beta \mathbf{a} \\ T^{-1} \mathbf{a}^\dagger T = \mathbf{a}^\dagger \beta^+ \end{cases}$$

dove si è posto $\beta^+ = \beta^{T*}$. Notiamo che al primo membro si è usata la trasformazione inversa rispetto a quella della (2.1), in modo che la corrispondenza fra T e β mantenga le relazioni algebriche. In particolare al prodotto $T = T_1 T_2$ corrisponde $\beta = \beta_1 \beta_2$. Dal fatto che vengono manenute le relazioni algebriche segue che il gruppo degli operatori T è isomorfo al gruppo delle matrici β , che è per definizione $U(3)$. Si vede poi immediatamente che si ha $N = \mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a}^\dagger \beta^+ \beta \mathbf{a} = N$, per cui N , e quindi H , sono invarianti per le trasformazioni β . Si verifica anche che le trasformazioni su a_i e a_i^\dagger sono canoniche.

(4.5) segue che $U(3)$ è il gruppo di invarianza della hamiltoniana. Tuttavia si è già osservato che R , essendo proporzionale a N , agisce come un multiplo dell'identità sugli stati di un dato livello n . Pertanto le trasformazioni finite generate da R , date da $e^{-i\theta R}$, agiscono sugli stati moltiplicandoli per un inessenziale fattore di fase. Poiché R commuta con tutti gli M_{ij} , esso genera il sottogruppo abeliano denominato $U(1)$. Il gruppo $U(3)$ si fattorizza allora nel prodotto diretto di $U(1)$ e di $SU(3)$ e formalmente si scrive $U(3) = SU(3) \otimes U(1)$.

Il gruppo d'invarianza non banale della hamiltoniana è quindi $SU(3)$. Esso ha rango 2 e 8 generatori, per es. S_{ij} e A_{ij} . Le trasformazioni del gruppo dipendono quindi da 8 parametri reali.

Discutiamo ora le conseguenze della simmetria sulla degenerazione dei livelli. Come si è detto l'algebra ha rango 2 e ci sono diverse scelte di generatori diagonali. Una scelta è data da $M_{11} = N_1$ e $M_{22} = N_2$, con autovalori rispettivamente n_1 e n_2 . Gli autostati dell'energia risultano allora $|n, n_1, n_2\rangle$, con $n_1 + n_2 \leq n$. Applicando il ragionamento fatto alla fine del §2, si vede che i generatori M_{ij} non diagonali trasformano questi autostati gli uni negli altri, lasciando l'energia E_n invariata. Contando il numero dei valori che possono assumere n_1 e n_2 si ottiene allora per la degenerazione d_n del livello E_n la formula

$$(4.9) \quad d_n = \binom{n+2}{2} = \frac{1}{2}(n+2)(n+1).$$

Un'altra scelta possibile di generatori diagonali è data da $l_3 = 2A_{12}$ e $M_{33} = N_3$. Gli autostati⁷ dell'oscillatore si possono allora indicare con i ket $|n, m, n_3\rangle$.

La base del momento angolare $|n, l, m\rangle$ corrisponde a prendere come operatori diagonali N , l^2 , l_z . In questo caso l^2 non è un generatore, ma una forma quadratica che viene denominata *operatore di Casimir*. Riguardo alla degenerazione, osserviamo che le combinazioni $A_{23} \pm iA_{31} = \frac{1}{2}l_{\pm}$ sono operatori di sposamento, che cambiano m in $m \pm 1$ lasciando l invariato. I generatori S_{ij} possono cambiare⁸ anche l poiché non commutano con l^2 . In conclusione si è quindi dimostrato che si ha degenerazione sia rispetto a m che rispetto a l .

5. Simmetrie dell'atomo d'idrogeno

Consideriamo un atomo idrogenoide, la cui hamiltoniana per il moto relativo è data da

$$(5.1) \quad H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r},$$

dove μ è la massa ridotta del sistema elettrone-nucleo e Z è il numero atomico. Vogliamo esaminare le simmetrie di H , da cui dipende la grande degenerazione dei livelli. Nel moto

⁷ Questa scelta corrisponde, nello spazio delle configurazioni, a separare l'oscillatore tridimensionale in un oscillatore bidimensionale nel piano (x_1x_2) e un oscillatore unidimensionale lungo l'asse x_3 . L'equazione di Schrödinger per l'oscillatore piano si può risolvere in coordinate polari, introducendo l'operatore l_z con autovalore m (si vedano per es. gli appunti sull'*Oscillatore armonico in più dimensioni*, al §2.1). L'altro numero quantico è quello radiale n_r , che si può esprimere mediante il numero quantico principale $n_1 + n_2$, e quindi in definitiva mediante n .

⁸ Abbiamo visto che S_{ij} è un tensore irriducibile con $l = 2$. Da questo segue che l può variare di $\Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$. Ma $\Delta l = \pm 1$ è proibito dalla parità, poiché S_{ij} ha parità $+1$. Ne segue che i valori di l hanno tutti la stessa parità e si dimostra che questa è la stessa di n .

classico (problema di Keplero della meccanica celeste) ci sono, oltre all'energia, due vettori costanti del moto: il momento angolare $\mathbf{L} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}$ e il vettore di Runge-Lenz

$$(5.2) \quad \mathbf{A} = \frac{1}{\mu Z e^2} \mathbf{p} \wedge \mathbf{L} - \frac{\mathbf{x}}{r}.$$

Mentre \mathbf{L} è costante per qualunque moto centrale, \mathbf{A} è tipico del caso coulombiano (ovvero gravitazionale) ed ha un significato geometrico relativo alla traiettoria: il modulo $|\mathbf{A}|$ è uguale all'eccentricità dell'ellisse e la direzione va dall'origine (fuoco) al perielio. La costanza di \mathbf{A} esprime il fatto che la traiettoria è una linea chiusa e fissa nel tempo.

Passando alla meccanica quantistica, le grandezze \mathbf{x} , \mathbf{p} , \mathbf{L} diventano operatori e il prodotto delle componenti $p_i L_j$ che compare nella (5.2) non è commutativo. Per avere un operatore autoaggiunto definiamo allora

$$(5.3) \quad \mathbf{A} = \frac{1}{2\mu Z e^2} (\mathbf{p} \wedge \mathbf{L} - \mathbf{L} \wedge \mathbf{p}) - \frac{\mathbf{x}}{r}.$$

Si può verificare che valgono le relazioni

$$(5.4) \quad [\mathbf{L}, H] = [\mathbf{A}, H] = 0; \quad \mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = 0.$$

Si verifica inoltre che le componenti di $\mathbf{l} = \mathbf{L}/\hbar$ e di \mathbf{A} obbediscono alle seguenti relazioni di commutazione:

$$(5.5) \quad \begin{cases} [l_i, l_j] = i \varepsilon_{ijk} l_k \\ [l_i, A_j] = i \varepsilon_{ijk} A_k \\ [A_i, A_j] = i K \varepsilon_{ijk} l_k \end{cases}$$

dove

$$(5.6) \quad K = \frac{H}{E_0}, \quad E_0 = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2}$$

Osserviamo che la prima delle (5.5) è la solita algebra del momento angolare, mentre la seconda esprime il fatto che \mathbf{A} è un operatore vettoriale. Inoltre E_0 è l'energia dello stato fondamentale del sistema. Per eliminare l'operatore K dal secondo membro dell'ultima equazione delle (5.5), introduciamo l'operatore

$$(5.7) \quad \tilde{\mathbf{A}} = K^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A}.$$

Dalle (5.5) si ottiene allora che l_i e \tilde{A}_i obbediscono all'algebra di Lie

$$(5.8) \quad \begin{cases} [l_i, l_j] = i \varepsilon_{ijk} l_k \\ [l_i, \tilde{A}_j] = i \varepsilon_{ijk} \tilde{A}_k \\ [\tilde{A}_i, \tilde{A}_j] = i \varepsilon_{ijk} l_k \end{cases}$$

Si dimostra che questa è l'algebra dei generatori di $SO(4)$, che è il gruppo delle rotazioni in uno spazio euclideo a 4 dimensioni.

In conclusione si è mostrato che la hamiltoniana (5.1) è invariante per le trasformazioni di $SO(4)$, generate da l_i e \tilde{A}_i . Questo gruppo è più ampio del gruppo delle rotazioni, che ne è un sottogruppo, e a questo si deve la maggiore degenerazione dei livelli. Infatti, se consideriamo gli autostati $|n, l, m\rangle$, si osserva che l'applicazione degli operatori l_{\pm} cambia m in $m \pm 1$ lasciando l invariato, mentre l'applicazione degli \tilde{A}_i cambia anche l poiché non commutano con l^2 . Notiamo in particolare che \mathbf{A} è un vettore proprio (cioè con parità -1), come si vede dalla (5.3), per cui l'applicazione di A_i al ket $|n, l, m\rangle$, o dà il vettore nullo oppure cambia l in $l \pm 1$. In questo modo si possono raggiungere tutti i valori di l permessi. Questo dimostra che si ha degenerazione dei livelli sia rispetto a m che rispetto ad l , come nel caso dell'oscillatore tridimensionale.

6. Spettro dell'idrogeno per via algebrica

Vogliamo concludere l'argomento delle simmetrie, mostrando che lo spettro di Bohr dei livelli di un atomo idrogenoide si può ottenere per via algebrica, in modo analogo a quello che si fa per l'oscillatore armonico e per il momento angolare.

Definiamo gli operatori

$$(6.1) \quad \mathbf{K}_{\pm} = \frac{1}{2}(\mathbf{l} \pm \tilde{\mathbf{A}}).$$

Dalle (5.8) si ricava immediatamente che valgono le relazioni di commutazione

$$(6.2) \quad \begin{cases} [K_{+i}, K_{+j}] = i\varepsilon_{ijk} K_{+k} \\ [K_{-i}, K_{-j}] = i\varepsilon_{ijk} K_{-k} \\ [K_{+i}, K_{-j}] = 0 \end{cases}$$

Si vede quindi che \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- obbediscono separatamente all'algebra di $SU(2)$ del momento angolare e che commutano fra loro. Questo dimostra che il gruppo $SO(4)$ è isomorfo al prodotto diretto $SU(2) \otimes SU(2)$.

Per i quadrati di \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- , tenendo conto che l_i e \tilde{A}_i commutano, si ha

$$(6.3) \quad \mathbf{K}_{\pm}^2 = \frac{1}{4}(\mathbf{l}^2 + \tilde{\mathbf{A}}^2 \pm 2\mathbf{l} \cdot \tilde{\mathbf{A}}).$$

Ma dall'ultima relazione della (5.4) si ha $\mathbf{l} \cdot \tilde{\mathbf{A}} = 0$, per cui si ottiene

$$(6.4) \quad \mathbf{K}_+^2 = \mathbf{K}_-^2 = \frac{1}{4}(\mathbf{l}^2 + \tilde{\mathbf{A}}^2).$$

Dalle formule (5.7) e (5.3), con un calcolo un po' laborioso si ricava

$$(6.5) \quad \tilde{\mathbf{A}}^2 = E_0 H^{-1} - \mathbf{l}^2 - 1,$$

per cui la (6.4) diventa

$$(6.6) \quad 4\mathbf{K}_{\pm}^2 = E_0 H^{-1} - 1.$$

Prendiamo per gli autostati dell'energia la solita base $|n, l, m\rangle$. In questa base anche \mathbf{K}_{\pm}^2 è diagonale⁹, con autovalori $k(k+1)$, dove k può essere intero o semintero. Allora proiettando la (6.6) sull'autospazio dell'energia E_n si ottiene l'equazione

$$(6.7) \quad E_0/E_n = 4k(k+1) + 1 = (2k+1)^2.$$

Identificando quindi $2k+1$ col numero quantico principale¹⁰ n , si ottiene infine la formula di Bohr

$$(6.8) \quad E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}.$$

⁹ Questo si vede immediatamente dalla (6.4), poiché \tilde{A}^2 commuta, oltre che con H , anche con \mathbf{l}^2 e con l_z , essendo un operatore scalare. Invece K_{+z} e K_{-z} non sono diagonali perché non commutano con \mathbf{l}^2 .

¹⁰ Osserviamo che k prende tutti i valori possibili per un momento angolare, cioè $k = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$, mentre n prende tutti i valori interi a partire da 1.