E. Fabri *agosto 2020*

Bohr e il vettore di Lenz

Introduzione

Il titolo può trare in inganno: non so se Bohr conoscesse il vettore di Lenz (probabilmente sì) ma non è di questo che voglio occuparmi. La domanda cui tenterò di dare un risposta è:

> *come mai il modello di Bohr arriva al valore esatto dei livelli dell'atomo d'idrogeno?*

Va intanto precisato che cosa intendo con valore "esatto." Intendo che dà le stesse energie dei livelli che si ottengono dall'eq. di Schrödinger per un atomo in cui si assume il protone puntiforme e privo di momento magnetico, e l'elettrone pure puntiforme, privo di spin e momento magnetico; inoltre si fa il calcolo non-relativistico.

Partiamo da un risultato ben noto nella mecc. classica del problema dei due corpi. Questo si riferisce al potenziale gravitazionale, ma è lo stesso problema perché i due potenziali vanno entrambi come $1/r$. In termini elementari, il risultato importante è che nel problema dei due corpi ci sono 5 integrali primi indipendenti e non 4 come per il generale sistema a simmetria sferica.

Nel caso generale questi 4 integrali primi sono l'energia E e le tre componenti del momento angolare $\mathbf{J}$. Nel caso newtoniano/coulombiano a questi si aggiungono le componenti del vettore di Lenz $\mathbf{L}$:

$$\mathbf{L} = \frac{1}{\mu}\,\mathbf{p}\times\mathbf{J} - GMm\,\frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|} \tag{1}$$

($\mu = Mm/(M+m)$ è la massa ridotta, con M massa del protone, m massa dell'elettrone).

Però le componenti di $\mathbf{L}$ non sono tutte indipendenti: in primo luogo

$$\mathbf{J}\cdot\mathbf{L} = 0 \tag{2}$$

il che significa che $\mathbf{L}$ giace sempre nel piano dell'orbita. Ma poi esiste un'identità:

$$|\mathbf{L}|^2 = (GMm)^2 + \frac{2}{\mu}\,E\,|\mathbf{J}|^2. \tag{3}$$

Quindi solo la direzione di $\mathbf{L}$ è una nuova costante del moto. Si dimostra che $\mathbf{L}$ punta sempre verso il perielio, quindi la sua costanza significa che la traiettoria è periodica: il pianeta ripassa sempre per gli stessi punti. In altri termini, il periodo radiale e quello angolare *sono uguali.* (Quando a causa di una perturbazione non sono più uguali, si ha una *precessione* dell'orbita.)

È ovvio che la definizione (1) del vettore di Lenz, la relazione (2), la (3), e tutto quello che segue, si applica anche al caso dell'atomo d'idrogeno: basta solo scrivere e^2 al posto di GMm.

Notate che 5 è il numero massimo possibile di integrali primi indipendenti. Tralascio di spiegare perché, dato che non è essenziale per il seguito. L'esistenza del vettore di Lenz permette una risoluzione completa del problema dei due corpi. Il tutto lo trovate ad es. in [1].

Costanti del moto e invarianze

Già nella mecc. classica si sa che un integrale primo è connesso a una trasf. canonica che lascia invariante la hamiltoniana. Nel caso del momento angolare, le trasf. in questione sono le rotazioni (simmetria sferica). E il vettore di Lenz con quale invarianza è connesso? Non è facile capirlo...

Non so dire esattamente quando si è trovata la risposta, ma sull'argomento sono apparsi articoli anche in tempi relativamente recenti. La ragione è che mentre il momento angolare è connesso all'invarianza per rotazioni, che si può descrivere come una trasf. delle coordinate spaziali, il vettore di Lenz genera un'invarianza (più esattamente, un gruppo) rispetto a trasf. che coinvolgono insieme le coordinate e i momenti coniugati. Evito quindi di scrivere il poco che so sull'argomento, ma ritengo importante soffermarmi su un altro punto.

In mecc. hamiltoniana una costante del moto è caratterizzata dal fatto che si annulla la sua parentesi di Poisson con la hamiltoniana. Quindi questo accade per le componenti di $\mathbf{J}$:

$$\{J_i, H\} = 0$$

e anche per le componenti di $\mathbf{L}$:

$$\{L_i, H\} = 0.$$

Sono anche importanti le parentesi di Poisson tra le componenti di $\mathbf{J}$:

$$\{J_i, J_j\} = \varepsilon_{ijk} J_k. \tag{4}$$

Queste dimostrano che le J_i generano le rotazioni (più esattamente, generano l'algebra di Lie del gruppo SO(3)). E che cosa sappiamo su $\mathbf{L}$? Il fatto che sia un vettore assicura che si trasformi per rotazioni come tutti i vettori:

$$\{J_i, L_j\} = \varepsilon_{ijk} L_k. \tag{5}$$

Viene naturale chiedersi che cosa sia $\{L_i, L_j\}$, ma è meglio cambiare scala, in modo da lavorare con un vettore dimensionalmente omogeneo con $\mathbf{J}$. Se guardate la (3) vedete che il cambiamento di scala occorrente è

$$K_i = \sqrt{-\frac{\mu}{2E}}\, L_i$$

(il segno $-$ è necessario perché per uno stato legato $E < 0$). Allora la (3) diventa

$$|\mathbf{J}|^2 + |\mathbf{K}|^2 = -\frac{\mu}{2E}\,(GMm)^2 \tag{6}$$

e le parentesi di Poisson (5) diventano

$$\{J_i, K_j\} = \varepsilon_{ijk} K_k. \tag{7}$$

Calcolando $\{K_i, K_j\}$ si ha

$$\{K_i, K_j\} = \varepsilon_{ijk} J_k. \tag{8}$$

Messe tutte insieme, le (4), (7), (8) definiscono l'algebra di Lie di SO(4), quindi questo è il gruppo d'invarianza del problema dei due corpi (e dell'atomo d'idrogeno) relativamente agli stati legati.

Può essere utile elaborare la (6). Si sa che esiste una relazione tra energia e semiasse maggiore:

$$a = -\frac{GMm}{2E}.$$

Quindi possiamo scrivere

$$|\mathbf{J}|^2 + |\mathbf{K}|^2 = \frac{GM^2m^2}{M+m}\,a$$

mentre separatamente

$$|\mathbf{J}|^2 = \frac{GM^2m^2}{M+m}\,a\,(1-e^2) \qquad |\mathbf{K}|^2 = \frac{GM^2m^2}{M+m}\,a\,e^2.$$

È utile sottolineare che a parità di semiasse maggiore (quindi di energia) $|\mathbf{K}| \propto e$; ne segue $\mathbf{K} = 0$ per le orbite circolari.

Ciò significa che la condizione di Bohr: "il momento angolare delle orbite circolari può solo assumere i valori $n\hbar$" potrebbe essere riformulata, senza limitarsi alle orbite circolari, come segue:

$$|\mathbf{J}|^2 + |\mathbf{K}|^2 = n^2\hbar^2 \tag{9}$$

da cui inserendo nella (6) con e^2 al posto di GMm:

$$E_n = -\frac{\mu\,e^4}{2\,n^2\hbar^2} \tag{10}$$

ossia il risultato di Bohr.

Naturalmente questo modo di arrivarci non è migliore di quello di Bohr: fa uso di molti passaggi al posto del calcolo elementare che si trova su tutti i testi. Tuttavia questo approccio "complicato" non è inutile, perché prepara il terreno al calcolo genuinamente quantistico e quindi a rispondere alla domanda iniziale.

Proprietà di SO(4)

La definizione di SO(4) è: il gruppo delle matrici 4×4 reali, ortogonali, a determinante 1. In simboli:

$$R \in \mathrm{SO}(4) \quad \Longleftrightarrow \quad R\,R^{\mathrm{t}} = I,\ \det R = 1.$$

Si dimostra che ogni matrice di $\mathrm{SO}(n)$ può essere messa in forma esponenziale:

$$\forall R \in \mathrm{SO}(n) \quad \exists A : A^{\mathrm{t}} = -A,\ e^{A} = R.$$

(L'esponenziale di una matrice si definisce come per un numero:

$$e^{A} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\,A^{k}$$

e la serie converge sempre.) Vale anche il viceversa: se A è antisimmetrica, $R = e^{A}$ è ortogonale e $\det R = 1$.

Le matrici reali antisimmetriche 4×4 formano uno spazio vettoriale di dimensione 6 su $\mathbb{R}$, al quale si può dare la struttura di algebra di Lie $\mathcal{A}$ per mezzo del *commutatore*. Infatti se A, B sono antisimmetriche si ha

$$[A,B]^{\mathrm{t}} = (AB - BA)^{\mathrm{t}} = B^{\mathrm{t}}A^{\mathrm{t}} - A^{\mathrm{t}}B^{\mathrm{t}} = BA - AB = -[A,B].$$

Quindi $[A,B] \in \mathcal{A}$. Inoltre il commutatore soddisfa alle proprietà richieste per la legge di composizione di un'algebra di Lie, che non sto a ricordare.

È tradizione indicare l'algebra di Lie di un gruppo col simbolo del gruppo scritto minuscolo. Quindi $\mathcal{A} = \mathrm{so}(4)$.

Si potrebbe pensare che SO(4) sia l'esponenziale della sua algebra di Lie, ma questo può non essere esatto, per due ragioni:

1) Se il gruppo non è connesso, la parte non connessa con l'identità non può essere messa in forma esponenziale. Questo non è un problema per tutti gli $\mathrm{SO}(n)$, che sono connessi.
2) Può darsi che la corrispondenza $\mathrm{SO}(4) \leftrightarrow \mathrm{so}(4)$ non sia un omeomorfismo (con linguaggio antico: biunivoca e bicontinua). Questo è il caso per tutti gli $\mathrm{SO}(n)$, che sono compatti mentre un'algebra di Lie sui reali o sui complessi non lo è mai.

Esiste sempre però un intorno U di 0 in so(4) la cui immagine esponenziale è un intorno V di I in SO(4), e il fatto è vero in generale. Si dice che so(4) e SO(4) sono *localmente omeomorfi.*

Rappresentazioni di so(4)

Ripartiamo dalle (4), (7), (8). Conviene definire

$$\mathbf{M}^+ = \tfrac{1}{2}\,(\mathbf{J} + \mathbf{K}) \qquad \mathbf{M}^- = \tfrac{1}{2}\,(\mathbf{J} - \mathbf{K}). \tag{11}$$

Abbiamo

$$\begin{aligned}
[M_i^+, M_j^+] &= i\,\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,M_k^+ \\
[M_i^-, M_j^-] &= i\,\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,M_k^- \\
[M_i^+, M_j^-] &= 0.
\end{aligned}$$

Si vede che le componenti di $\mathbf{M}^+$ e quelle di $\mathbf{M}^-$ generano due algebre di Lie di SO(3), $\mathcal{A}^+$, $\mathcal{A}^-$, che commutano tra loro. Quindi le rappresentazioni irriducibili dell'algebra $\mathcal{A}$ di SO(4) sono prodotti diretti di rappr. irriducibili di queste:

$$\mathcal{D}^{(j^+j^-)} = \mathcal{D}^{(j^+)} \otimes \mathcal{D}^{(j^-)}$$

dove j^+, j^- possono essere $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$. Ricordo che $\mathcal{D}^j$ ha dimensione $2j+1$, quindi $\mathcal{D}^{(j^+)} \otimes \mathcal{D}^{(j^-)}$ ha dimensione $(2j^+ + 1)(2j^- + 1)$.

È utile scrivere gli *invarianti di Casimir* di so(4), ossia le espressioni polinomiali nei generatori ($\mathbf{J}$, $\mathbf{K}$ oppure $\mathbf{M}^+$, $\mathbf{M}^-$) che commutano con tutti gli elementi dell'algebra. Si sa che so(3) ha un solo invariante di Casimir; nel nostro caso abbiamo *due* algebre che commutano tra loro,, quindi *due* invarianti:

$$|\mathbf{M}^+|^2 \quad \text{e} \quad |\mathbf{M}^-|^2.$$

Le (11) dicono che

$$\begin{aligned}
|\mathbf{M}^+|^2 &= \tfrac{1}{4}\left(|\mathbf{J}|^2 + \mathbf{K}|^2\right) + \tfrac{1}{2}\,\mathbf{J}\cdot\mathbf{K} \\
|\mathbf{M}^-|^2 &= \tfrac{1}{4}\left(|\mathbf{J}|^2 + \mathbf{K}|^2\right) - \tfrac{1}{2}\,\mathbf{J}\cdot\mathbf{K}.
\end{aligned} \tag{12}$$

Possiamo quindi scegliere come invarianti di Casimir per so(4)

$$|\mathbf{J}|^2 + |\mathbf{K}|^2 \quad \text{e} \quad \mathbf{J}\cdot\mathbf{K}.$$

L'utilità degli invarianti di Casimir è che *in una rappr. irriducibile un invariante di Casimir si riduce a un numero.* Possono quindi essere usati per classificare le rappr. irriducibili di un'algebra di Lie (o di un gruppo). Sappiamo che gli autovalori di $|\mathbf{M}^+|^2$ sono $j^+(j^+ + 1)\,\hbar^2$ e quelli di $|\mathbf{M}^-|^2$ sono $j^-(j^- + 1)\,\hbar^2$. Dalle (12) si vede che sarà

$$|\mathbf{J}|^2 + |\mathbf{K}|^2 = 2\,({j^+}^2 + {j^-}^2 + j^+ + j^-)\,\hbar^2 \tag{13}$$

$$\mathbf{J}\cdot\mathbf{K} = (j^+ - j^-)\,(j^+ + j^- + 1)\,\hbar^2. \tag{14}$$

Questo è ciò che si può dire finché si resta in ambito astratto: SO(4) e la sua algebra di Lie. Dobbiamo ora vedere che cosa accade nell'applicazione all'atomo d'idrogeno.

L'atomo di H quantistico

Nella teoria quantistica dell'atomo d'idrogeno si ha a che fare con osservabili rappresentate da operatori (autoaggiunti). L'algebra di questi operatori è generata da pochi elementi:

$$q_x,\ q_y,\ q_z,\ p_x,\ p_y,\ p_z \tag{15}$$

che per di più non sono indipendenti in quanto debbono soddisfare le ben note relazioni di commutazione.

Tutte le altre osservabili si ottengono dalle (15) mediante operazioni algebriche (o magari limiti di queste). Per es. il momento angolare conserva la stessa espressione classica:

$$\mathbf{J} = \mathbf{q}\times\mathbf{p}. \tag{16}$$

Non così il vettore di Lenz: se usassimo la (1) otterremmo un operatore non hermitiano, perché $\mathbf{p}$ e $\mathbf{J}$ *non commutano*. Bisogna quindi simmetrizzare:

$$\mathbf{L} = \frac{1}{2\,m}\,(\mathbf{p}\times\mathbf{J} - \mathbf{J}\times\mathbf{p}) - e^2\,\frac{\mathbf{q}}{q} \tag{17}$$

(il segno $-$ dentro la parentesi non è un errore di stampa!) Invece per H possiamo conservare l'espressione classica

$$H = \frac{1}{2m}\,|\mathbf{p}|^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{q}|} \tag{18}$$

(naturalmente ho sostituito GMm con e^2).

Indicherò con $\mathcal{O}$ l'algebra delle osservabili, come definita da quanto precede.

Fissate le definizioni degli operatori rilevanti, ha senso chiedersi che ne è delle identità (2), (3): valgono ancora come identità tra operatori? La risposta, che do senza dimostrazione, è la seguente: (2) vale senza modifiche, mentre (3) o meglio la forma (6) viene leggermente modificata:

$$|\mathbf{J}|^2 + |\mathbf{K}|^2 = -\frac{\mu\,e^4}{2\,H} - \hbar^2. \tag{19}$$

Si vede subito che al limite classico ($\hbar \to 0$) si ritrova la vecchia espressione.

La (19) collega H a $|\mathbf{J}|^2 + |\mathbf{K}|^2$, quindi fornisce l'autovalore di H per tutta una rappr. irriducibile di SO(4). È questa la degenerazione addizionale. L'identità (2), ossia

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{K} = 0$$

confrontata con la (14) impone $j^+ = j^-$. Il significato è che sebbene nella visione astratta di SO(4) si possano considerare rappr. con tutte le possibili coppie di valori (j^+, j^-), nell'algebra $\mathcal{O}$ possono esistere solo rappr. con $j^+ = j^- = j$. Tenendo conto di ciò, la (13) si scrive

$$|\mathbf{J}|^2 + |\mathbf{K}|^2 = 4\, j\, (j+1)\, \hbar^2 \tag{20}$$

da intendersi non come identità valida in so(4), ma nelle sue rappr. contenute in $\mathcal{O}$.

Inserendo nella (19) si ottiene

$$H = -\frac{\mu\, e^4}{2\,(2\,j+1)^2\,\hbar^2}. \tag{21}$$

Dati i possibili valori di j, $n = 2\,j + 1$ può assumere solo valori interi da 1 in poi e la (21) diventa

$$H = -\frac{\mu\, e^4}{2\, n^2 \hbar^2}.$$

che è esattamente la formula di Bohr (10).

Ecco spiegata la coincidenza: la condizione di Bohr se scritta nella forma (9) è proprio quella che si ottiene per via quantistica dall'invarianza SO(4) per le rappr. irriducibili contenute nell'algebra delle osservabili.

Aggiungo qualche complemento. In primo luogo, la dimensione della rappr. $\mathcal{D}^{(j)} \otimes \mathcal{D}^{(j)}$ di SO(4) è $(2\,j+1)^2 = n^2$. Quindi questa è la degenerazione degli autovalori di H.

Secondo: dalle (13) segue

$$\mathbf{J} = \mathbf{M}^+ + \mathbf{M}^-.$$

Quindi la rappr. $\mathcal{D}^{(j)} \otimes \mathcal{D}^{(j)}$ se vista come rappr. del gruppo SO(3) delle rotazioni (la cui algebra di Lie è generata da $\mathbf{J}$) si decompone secondo la regola di addizione dei momenti angolari: sommando due momenti uguali si ottengono tutti i valori da 0 a $2j = n - 1$. Troviamo così la nota regola: al n. quantico principale n, con degenerazione n^2, corrispondono valori del n. quantico azimutale $l = 0, 1, \ldots, n-1$ con degenerazioni $1, 3, \ldots, (2\,n-1)$.

Il tutto senza bisogno di risolvere l'equazione di Schrödinger.

Commento finale

Scrivere quanto precede è stato più difficile del previsto. L'argomento non è affatto semplice, i prerequisiti non sono elementari; quindi ho dovuto cercare un compromesso tra l'esattezza e la comprensibilità, spesso ho dovuto sorvolare su questioni importanti o usare concetti che non ero certo fossero familiari ai miei prevedibili lettori. Ma anche così temo di essere risultato piuttosto pesante...

Un cenno ad alcune questioni matematiche che ho dovuto tralasciare anche se essenziali. Ho spesso parlato di gruppi senza chiarire che in realtà ciò che dicevo vale per una classe particolare quanto importante di gruppi: i *gruppi di Lie*. Solo per questi ha senso parlare di "algebra di Lie" del gruppo.

Ho anche usato senza spiegazioni il concetto di *rappresentazione* (di un gruppo o di un'algebra); in particolare di rappr. *irriducibile*. Non sono così sicuro che questi concetti siano familiari a tutti i laureati in fisica, attuali o passati; ma non potevo fare diversamente.

A un certo punto ho citato (in fondo a pag. 5) un risultato della teoria delle rappresentazioni: una matrice che commuti con tutti gli elementi di un sistema irriducibile è multipla dell'identità. Si tratta del cosiddetto "secondo lemma di Schur" ed è importante ricordare che vale solo per le rappr. *complesse*, non per quelle reali. Non è un problema, visto che in m.q. si lavora sempre in spazi vettoriali definiti sul campo complesso.

Però la difficoltà può nascere se uno sa che per es. SO(3) è un gruppo definito con matrici *reali*, e più in generale l'algebra di Lie di un gruppo è definita sui reali. Ma qui appunto gioca il concetto di rappresentazione: la rappr. non è il gruppo o l'algebra. Anche un gruppo reale può avere rappr. complesse. Per es. le rappr. irriducibili di SO(3) (autostati del momento angolare con modulo definito) *sono complesse*: basta guardare le armoniche sferiche Y_{lm}.

E non vado oltre: sarà chiaro che se avessi voluto spiegare per bene tutte queste cose, avrei dovuto scrivere un piccolo libro... Una parziale guida a tutta questa problematica (non alle algebre di Lie, che sono trattate troppo alla buona) la trovate in [2].

[1] `http://www.sagredo.eu/lezioni/astronomia/p3c1rf.pdf`

[2] `http://www.sagredo.eu/lezioni/gruppi`