

# Introducción al momento angular (rotaciones)

El operador  $\hat{L}$  será el encargado de realizar las rotaciones. Por el álgebra visto en la mecánica clásica sabemos que, dado un vector  $\mathbf{v}$  y una matriz ortogonal  $R$  se tiene

$$\mathbf{v}' = R\mathbf{v} \quad \text{con} \quad |\mathbf{v}'| = |\mathbf{v}|$$

y

$$|\mathbf{v}|^2 = V^t V = (V^t R^t)(RV) \quad \text{pues} \quad R^t R = R R^t = \mathbb{1}$$

puesto que es una matriz ortogonal. Luego se cumplen

$$\text{clausura} \quad (R_1 R_2)(R_1 R_2)^t = R_1 R_2 R_2^t R_1^t = \mathbb{1}$$

el producto de dos matrices ortogonales es otra matriz ortogonal (aquella que cumple  $R^t R = \mathbb{1}$ )

$$\text{asociatividad} \quad R_1(R_2 R_3) = (R_1 R_2)R_3$$

$$\exists \text{ identidad} \quad R\mathbb{1} = \mathbb{1}R = R$$

$$\exists \text{ inversa} \quad R R^{-1} = R^{-1} R = \mathbb{1} \quad \text{con} \quad R^{-1} \equiv R^t$$

Esto define un grupo de matrices ortogonales que realiza rotaciones y se denomina  $SO(3)$ .

### 1.0.1 No conmutatividad de las rotaciones clásicas

Las rotaciones finitas no conmutan. Luego, el grupo de las rotaciones será un grupo abeliano

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R_x(\varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ 0 & \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix}$$

$$R_y(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & 0 & \sin(\varphi) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\varphi) & 0 & \cos(\varphi) \end{pmatrix}$$

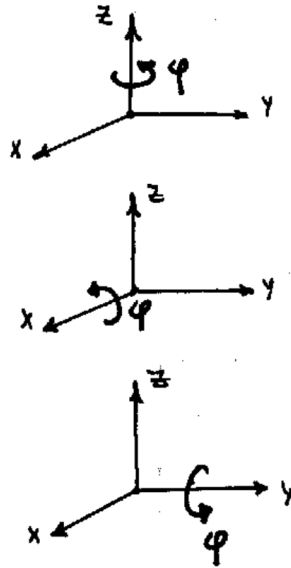


Figura 0.1

Si reemplazamos  $\cos(\epsilon) \approx 1 - \epsilon^2/2$  y  $\sin(\epsilon) \approx \epsilon$  hasta orden dos. Se puede ver que las rotaciones, en torno a ejes diferentes, sólo conmutan a orden uno

( $\epsilon$ ) de manera que una rotación infinitesimal  $d\varphi$  conmuta pero una rotación finita  $\varphi$  no lo hace.

## 1.1 Rotaciones cuánticas

Para las rotaciones cuánticas se pedirá

$$D(\hat{n}, d\phi) = \mathbb{1} - i \frac{\mathbf{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} d\phi,$$

rotación infinitesimal o bien

$$D(\hat{n}, \theta) = e^{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n} / \hbar \theta},$$

para rotación finita. Donde  $\hat{D}$  es el operador de las rotaciones y  $\hat{J}$  es un momento angular general. Se postula de esta forma para que  $\hat{D}$  cumpla las mismas propiedades que  $R$  y la relación de conmutación

$$R_x R_y - R_y R_x = R_z(\epsilon^2) - \mathbb{1}$$

$$D(\hat{x}, \epsilon) D(\hat{y}, \epsilon) - D(\hat{y}, \epsilon) D(\hat{x}, \epsilon) = D(\hat{z}, \epsilon^2) - D(\mathbb{1})$$

de modo que la cuenta lleva a

$$J_x J_y - J_y J_x = i\hbar J_z$$

la cual generalizando se llega a

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

que son las relaciones de conmutación generales para momento angular  $\hat{J}$ .

Para sistemas de espín 1/2 es

$$D(\hat{n}, \phi) \equiv e^{-i/\hbar \mathbf{S} \cdot \hat{n}}$$

Se puede ver que ante rotaciones cuánticas  $D(\hat{n}, \phi)$  los valores de expectación transforman como vectores

$$\begin{pmatrix} \langle S'_x \rangle \\ \langle S'_y \rangle \\ \langle S'_z \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R(\hat{x}, \phi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \\ \langle S_y \rangle \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix}$$

En general  $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$  se transforma como vector y entonces  $\hat{J}$  es un operador vectorial. Para espín 1/2 es

$$|\alpha\rangle = \langle + | \alpha \rangle |+\rangle + \langle - | \alpha \rangle |-\rangle$$

$$D(\hat{z}, \phi) |\alpha\rangle = e^{-iS_z\phi/\hbar} \langle +|\alpha\rangle |+\rangle + e^{-iS_z\phi/\hbar} \langle -|\alpha\rangle |-\rangle$$

$$D(\hat{z}, \phi) |\alpha\rangle = \langle +|\alpha\rangle e^{-i\phi/2} |+\rangle + e^{i\phi/2} \langle -|\alpha\rangle |-\rangle$$

Si  $\phi = 2\pi$  (cosa que debiera dejar al ket incólume) se tiene

$$D(\hat{z}, 2\pi) |\alpha\rangle = -\langle +|\alpha\rangle |+\rangle - \langle -|\alpha\rangle |-\rangle = -|\alpha\rangle$$

Luego, esto es una muestra del carácter no-clásico del spin; una vuelta completa le cambia el signo al ket pero notemos cuidadosamente que el valor de expectación – que es algo físico – no varía. Esto muestra que el ket no puede tener sentido físico.

### 1.1.1 Angulos de Euler

Se define una serie de rotaciones

$$1. R_z(\alpha) \quad 2. R_{y'}(\beta) \quad 3. R_{z'}(\gamma)$$

lo cual equivale a

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{z'}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha)$$

$$e^{-iJ_{z'}\gamma/\hbar} e^{-iJ_{y'}\beta/\hbar} e^{-iJ_z\alpha/\hbar} |\psi\rangle$$

Pero desconozco cómo operar en los ejes móviles  $z', y'$

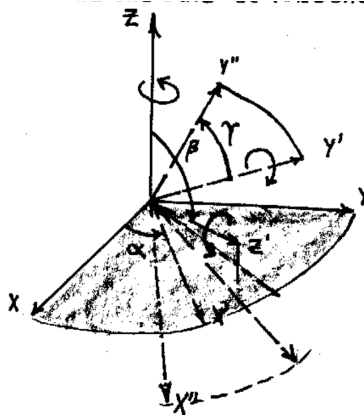


Figura 1.2

$$R_{y'}(\beta) =$$

$$R_{z'}(\gamma) =$$

$$R() =$$

Rotación equivalente a [1] pero para ejes fijos, puesto que en mecánica cuántica sabemos rotar en torno a ejes fijos.

Los ángulos de Euler son la caracterización de una rotación general en 3D. Entonces nuestra rotación en 3D cuántica será:

$$D() =$$

### 1.1.2 Autoestados y autovalores de J

Partimos de

$$[] =$$

y

$$J^2 =, [J^2, J] = 0$$

siendo la última muy importante y probándose por evaluación directa. Lleva a

$$[J^2, J_i^n] = 0 \quad \text{con } i = x, y, z \quad n \in \mathbb{N}$$

Se eligen  $J^2, J_z$  como observables que conmutan

$$J^2$$

Definiremos los operadores de subida y de bajada

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm J_y$$

que verifican

$$[]$$

Entonces se tiene

$$J^2() \longrightarrow$$

$$(J_z) \longrightarrow$$

$$J_{\pm} |a, b\rangle = C_{\pm} |a, b \pm \hbar\rangle$$

$$J_{+}$$

sube el  $J_z$  en una unidad de  $\hbar$  o bien baja el  $J_z$  en una unidad de  $\hbar$ .

$$J_{+}J_{-} =,$$

$$J^2 =,$$

$$\langle a, b | J^2 - J_z^2 | a, b \rangle = (a - b^2) \langle a, b | a, b \rangle =, a \geq b^2$$

hay cota para  $b$ . Como no puede seguir subiendo debe dar el ket nulo

$$= 0$$

$$= 0$$

pero

$$J_- J_+ a = b_m(b_m - \hbar)$$

tiene solución

$$b_M - B_m = -\hbar$$

pero esto es absurdo.

Luego,

$$|a, b_m\rangle \longrightarrow |a, b_M\rangle$$

y como  $J_+$  sube de  $a$  un  $\hbar$  será

$$b_M = b_m + n\hbar$$

y entonces

$$b_M = \frac{n\hbar}{2} = \frac{n}{2}\hbar = j\hbar$$

y se da que  $j$  es entero o semientero.

Definiremos

$$b_M \equiv j\hbar \quad a \equiv j(j+1)\hbar^2 \quad -j\hbar \leq b \leq j\hbar$$

pero como  $b/\hbar = m$

$$b_M \equiv j\hbar \quad a \equiv j(j+1)\hbar^2 \quad -j \leq m \leq j$$

$$m = (-j, -j+1, -j+2, \dots, j-1, j) \quad 2j+1 \text{ valores de } m$$

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

### 1.1.3 La normalización de $J_{\pm}$

$$\begin{aligned} J_+ \\ \langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle &= \\ c_+ &= \\ \langle j, m | J_+ J_- | j, m \rangle &= \\ c_- &= \\ J_+ \end{aligned}$$

### 1.1.4 Elementos de matriz de $J^2, J_z, J_+$

Asumiendo normalización de  $|j, m\rangle$  se tiene

$$\langle \rangle =$$

$$=$$

### 1.1.5 Elementos de matriz de $\mathcal{D}(R)$

Ahora queremos ver cual es la forma de los elementos de matriz de  $\mathcal{D}(R)$

$$\mathcal{D}(R) =$$

siendo que  $\mathcal{D}(R)$  tiene por efecto rotar el sistema físico. Lo primero que hay que notar es que

$$\propto \delta_{jj'}$$

porque  $[J^2, J_i] = 0$  y entonces  $[J^2, J_i^n] = 0$  y

$$D$$

y

$$D$$

es una matriz para cada  $j$  fijo con  $\{(2j+1) \times (2j+1) = \text{dimensión}\}$

$$D$$

pero las rotaciones no cambian el  $j$ ,  $\mathcal{D}(R)$  conecta estados con la misma  $j$  y  $\mathcal{D}(R) \in (2j+1) \times (2j+1)$

$$D$$

La matriz de  $\mathcal{D}(R)$  (no caracterizada por un único  $j$ ) puede ponerse en forma diagonal por bloques:

con cada bloque de  $(2j+1) \times (2j+1)$ , pero siendo cada bloque irreducible. Las matrices de rotación con  $j$  fijo forman un grupo.  $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$  son los elementillos de la matriz.

$$|j, m\rangle \rightarrow$$

### 1.1.6 Forma explícita del operador $\mathcal{D}(R)$

Los ángulos de Euler permitieron caracterizar la rotación más general. Entonces

$$D$$

$$D$$

En los  $d_{m'm}^{(j)}$  está la dificultad de la cuenta.

## 1.2 Formalismo de spinores de Pauli

Apropiado para trabajar con sistemas de spin  $1/2$ . Estos sistemas son casos particulares de momento angular,

$$j = 1/2 \quad m = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

y se definen los spinores  $\chi_{\pm}$  como

$$|+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+ \quad |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_-$$

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \langle + | \alpha \rangle \\ \langle - | \alpha \rangle \end{pmatrix}$$

$$\langle \alpha | = ( \langle + | \alpha \rangle \quad \langle - | \alpha \rangle )$$

Para spin  $1/2$  podemos tomar  $\mathbf{J} = \mathbf{S}$  por la analogía de las relaciones de conmutación. A su vez

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \text{con} \quad \vec{\sigma} \equiv ( \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z )$$

que es una especie de vector

$$\vec{\sigma} = \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right]$$

Luego esta equivalencia provee expresión de los operadores  $S_i$  en términos de matrices de  $2 \times 2$ , así:

$$\frac{i}{2} [J_- - J_+] = J_y = S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

siendo que los  $J_y$  y  $S_y$  actúan sobre kets y el  $\sigma$  sobre spinores.

Las matrices de Pauli cumplen las propiedades básicas siguientes

$$\sigma_i^2 = \mathbb{1} \quad \sigma_i^\dagger = \sigma_i$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = i2\varepsilon_{ijR} \sigma_R \quad \{ \sigma_i, \sigma_j \} = \delta_{ij}$$

$$\sigma_i^n = \begin{cases} \mathbb{1} & n \text{ par} \\ \sigma_i & n \text{ impar} \end{cases}$$

$$|+\rangle \equiv |j = 1/2, m = 1/2\rangle \quad |-\rangle \equiv |j = 1/2, m = -1/2\rangle$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + i\vec{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$



### 1.2.1 Aplicación a las rotaciones

$$\mathcal{D}(\hat{n}, \phi) = e^{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n} \phi / \hbar} = e^{-i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \phi / 2}$$

pero

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^n = \begin{cases} \vec{\sigma} \cdot \hat{n} & n \text{ impar} \\ \mathbb{1} & n \text{ par} \end{cases}$$

$$e^{-i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \phi / 2} = 1 - i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \frac{\phi}{2} - \frac{1}{2!}(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^2 \left(\frac{\phi}{2}\right)^2 + \frac{i}{3!}(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^3 \left(\frac{\phi}{2}\right)^3 - \dots$$

$$\mathcal{D}(\hat{n}, \phi) = e^{-i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \phi / 2} = \mathbb{1} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)$$

es el operador de rotación para sistemas de spin 1/2 (donde  $\mathbb{1} \in 2 \times 2$ ). Con esta expresión podemos evaluar  $d_{m'm}^{j=1/2}(\beta)$

$$d^{1/2}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix}$$

donde hemos usado los resultados

$$\cos(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x)^{2n+1}}{(2n+1)!} (-1)^n \quad \sin(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x)^{2n}}{(2n)!} (-1)^n$$

En el caso general el operador de rotación para sistemas de spin 1/2 lucirá:

$$|+\rangle \quad |-\rangle$$

$$\mathcal{D}^{j=1/2}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ e^{-\frac{i}{2}(\gamma-\alpha)} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & e^{\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |+\rangle \\ |-\rangle \end{pmatrix}$$

### 1.2.2 Ejemplo

$$d^{1/2}(\pi/2) = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$$

de manera que

$$d^{1/2}(\pi/2)\chi_+ = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$d^{1/2}(\pi/2)\chi_+ = \frac{\sqrt{2}}{2}(\chi_+ + \chi_-) = \frac{1}{2}(|+\rangle + |-\rangle)$$

$$d^{1/2}(\pi/2)\chi_+ = |S_x; +\rangle$$

Este resultado es intuitivamente lógico.

### 1.2.3 Rotaciones en sistemas con $j = 1$

Ahora tenemos

$$j = 1 \quad m = -1, 0, 1$$

recordando  $J_y$  en términos de escaleras

$$J_y = \frac{J_+ - J_-}{2i}$$

de modo que

$$J_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |1\ 1\rangle \\ |1\ 0\rangle \\ |1\ -1\rangle \end{matrix}$$

$$e^{-i \frac{J_y}{\hbar} \beta} = 1 + -\frac{J_y}{\hbar} \beta + (-i)^2 \left(\frac{J_y}{\hbar} \beta\right)^2 \frac{1}{2!} + (-i)^3 \left(\frac{J_y}{\hbar} \beta\right)^3 \frac{1}{3!} + \dots$$

$$e^{-i \frac{J_y}{\hbar} \beta} = 1 - \frac{J_y}{\hbar} \beta - \frac{1}{2!} \left(\frac{J_y}{\hbar} \beta\right)^2 - \frac{i}{3!} \left(\frac{J_y}{\hbar} \beta\right)^3 + \dots$$

$$\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^n = \begin{cases} \left(\frac{J_y}{\hbar}\right) & n \text{ impar} \\ \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 & n \text{ par} \end{cases}$$

$$e^{-i \frac{J_y}{\hbar} \beta} = 1 - \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 (1 - \cos(\beta)) - i \left(\frac{J_y}{\hbar}\right) \sin(\beta) = d^{j=1}(\beta)$$

acá lo vemos como operador (es notación),  $d_{m'm}^{j=1}(\beta)$  simboliza la matriz

$$d^{j=1}(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos(\beta)) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\beta) & \frac{1}{2}(1 - \cos(\beta)) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\beta) & \cos(\beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\beta) \\ \frac{1}{2}(1 - \cos(\beta)) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\beta) & \frac{1}{2}(1 + \cos(\beta)) \end{pmatrix} \begin{matrix} |1\ 1\rangle \\ |1\ 0\rangle \\ |1\ -1\rangle \end{matrix}$$

## 1.3 Momento angular orbital

$$\mathbf{L} =$$

verifica el álgebra de  $\mathbf{J}$ ,

$$[]$$

Consideremos ahora una rotación en torno a  $z$ , en un  $\delta\phi$ ,

$$() =$$

$$() =$$

esto es una traslación en  $\hat{x}, \hat{y}$ ,

$$(1 - i \frac{L_z}{\hbar} \delta\phi) |x', y', z'\rangle = | \rangle$$

Esta traslación es debida a una rotación infinitesimal en  $\delta\phi$  torno a  $z$  entonces genera las rotaciones clásicas en torno a  $z$ .

$$\Psi$$

$$\Psi$$

Podemos hallar una expresión para  $L_z$  en esféricas:

$$\langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle$$

identificamos

$$=$$

operador  $L_z$  en esféricas

Usando

$$L^2 =$$

$$\langle L^2 \rangle$$

$$L^2 = -\hbar^2 r^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2$$

donde  $\nabla_{\theta, \varphi}^2$  es la parte angular del laplaciano en coordenadas esféricas. Esto puede obtenerse también partiendo de

$$L^2 = \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}$$

Sea un  $H$  de partícula, sin spín, sujeta a potencial simétricamente esférico. Sabemos que la función de onda  $\Psi_\alpha(\mathbf{r}')$  es separable en coordenadas esféricas, entonces:

$$\langle | \rangle =$$

$$\langle | \rangle =$$

Cuando el  $H$  es esféricamente simétrico (como en un potencial central) se tiene

$$[L_z, H] = [L^2, H] = 0$$

Trabajaremos solamente en la parte angular  $|\theta, \varphi\rangle \equiv |\hat{n}\rangle$

$$\langle \hat{n} | \ell, m \rangle =$$

que es la amplitud de hallar  $|\ell, m\rangle$  en la dirección  $\hat{n}$ .

Podemos vincular ahora los armónicos esféricos con los autoestados de  $L_z, L^2$

$$L_z$$

$$L^2$$

$$=$$

Entonces, con la ortogonalidad

$$\rightarrow$$

y con la completitud

$$\rightarrow$$

de manera que llegamos a

$$\int \int$$

Podemos hallar una expresión para

$$= 0$$

$$\Rightarrow$$

Luego usamos  $L_-$  para hallar sucesivamente los demás  $Y_\ell^m$

$$=$$

y por este camino se llega a

$$Y$$

con

En el caso de momento angular orbital  $\ell$  no puede ser semientero porque entonces  $m$  sería semientero y en una vuelta de  $2\pi$

$$e^{im2\pi} = -1$$

Además,

(no hay signo menos)