

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. Una matriz ortogonal tiene tres parámetros independientes. Luego se cumplen

- Clausura

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

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

$$R_1(R_2 R_3) = (R_1 R_2)R_3$$

- Existencia de identidad

$$R \mathbb{1} = \mathbb{1} R = R$$

- Existencia de inversa

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

Esto define un grupo de matrices ortogonales que realiza rotaciones y se denomina $SO(3)$. Las rotaciones son un grupo respecto a la multiplicación.

1.0.1 No conmutatividad de las rotaciones clásicas

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

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

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

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

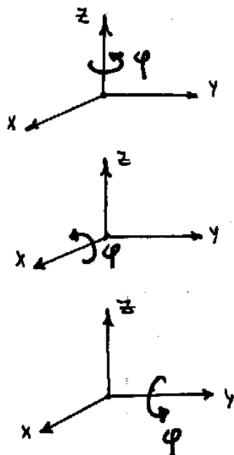


Figura 0.1

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

En efecto, hasta orden 2 se tienen

$$R_z(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \epsilon^2/2 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 - \epsilon^2/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \epsilon^2/2 & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 - \epsilon^2/2 \end{pmatrix}$$

$$R_y(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \epsilon^2/2 & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 - \epsilon^2/2 \end{pmatrix}$$

Entonces, se ve que

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon^2 & 0 \\ \epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

o bien

$$[R_x(\epsilon), R_y(\epsilon)] = R_z(\epsilon) - \mathbb{1}$$

Como el conmutador es diferente de cero el grupo de las rotaciones es un grupo no abeliano. La velocidad angular se define ω/dt de modo que eso justifica que los vectores velocidad angular puedan sumarse en mecánica. Esto es lo que sucedía en el caso clásico. Veamos ahora qué le pasa a los kets ante rotaciones.

1.1 Rotaciones cuánticas

Para las rotaciones cuánticas suponemos la existencia de un operador D_R que las realiza, que convierte $|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle_R$ con $|\alpha\rangle_R = D(R)|\alpha\rangle$ postulándose una forma del tipo

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

para una rotación infinitesimal o bien

$$D(\hat{n}, \theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i \mathbf{J}_z \theta}{\hbar N} \right)^N = e^{-i \mathbf{J} \cdot \hat{n} \theta / \hbar},$$

para rotación finita. \hat{D} es, como se dijo, 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 misma relación de conmutación (lo cual los hace pertenecer al mismo álgebra)

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

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

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

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k \quad (1.1)$$

que son las relaciones de conmutación generales para momento angular \hat{J} . Esto vale para cualquier rotación, lo cual es más amplio que si es solo L , el momento angular.

EJEMPLO 1.1 Operador de rotación para partículas de spin 1/2

Para sistemas de spin 1/2 es

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

El efecto de la rotación se asocia a

$${}_R \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | e^{iS_z \phi / \hbar} S_x e^{-iS_z \phi / \hbar} | \alpha \rangle$$

una cosa que podemos considerar como un operador y los kets fijos en el tiempo. La base de autoestados de S_z es

$$S_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \quad S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle$$

los operadores S_x, S_y, S_z tienen sus expresiones usuales y evaluando resulta

$$D^\dagger S_x D = \frac{\hbar}{2} [(|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|) \cos \phi + i(|+\rangle \langle -| - |-\rangle \langle +|) \sin \phi]$$

que es como si el vector S_x se transformase como lo haría un vector. En efecto, se tiene

$$\begin{aligned} S_x &\rightarrow \text{rotación} \rightarrow S_x \cos \phi - S_y \sin \phi \\ S_y &\rightarrow \text{rotación} \rightarrow S_y \cos \phi + S_x \sin \phi \end{aligned}$$

pero

$$S_z \rightarrow \text{rotación} \rightarrow S_z$$

lo cual se demuestra por conmutación en la expresión del operador.

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. Consideremos un estado de un sistema de espín 1/2,

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

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

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

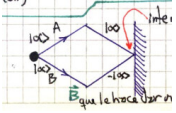
Haciendo una rotación de $\phi = 2\pi$ (cosa que debiera dejar al ket incólume) se tiene

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

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.

Se observó en 1975 que el patrón de interferencia se altera con el $-\langle +|\alpha\rangle$ de manera que tiene importancia ese signo en el ket.

En la picture se esquematiza. Hay neutrones a la izquierda y un campo magnético \mathbf{B} delante de la parted. Se ve en la interferencia que llega con el signo cambiado; le hacen dar una vuelta completa al spin.



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' así que buscaré escribir las rotaciones de manera que se pueda hacer la cuenta, refiriéndolas a ejes fijos.

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha)$$

$$R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) R_{y'}^{-1}(\beta)$$

siendo estas dos expresiones generales (puede probarse)

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) \underbrace{R_{y'}^{-1}(\beta) R_{y'}(\beta)}_{\mathbb{1}} R_z(\alpha)$$

Recordemos que en general no se sabe cómo actúan los operadores sobre un estado general sino sobre autoestados.

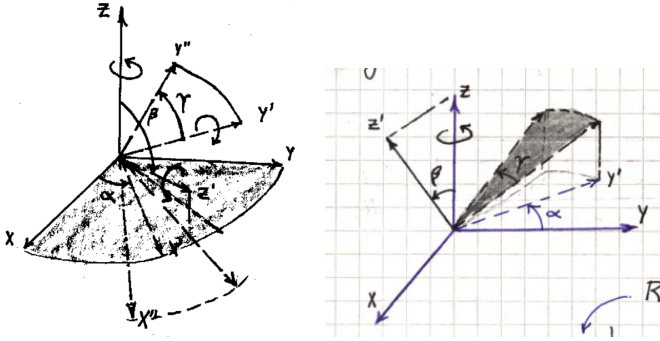


Figura 1.2 Los ángulos de Euler son una caracterización de una rotación general en 3D.

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)R_z(\gamma)R_z(\alpha)$$

donde las que son sobre el mismo eje conmutan y entonces,

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma).$$

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:

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = D_z(\alpha)D_y(\beta)D_z(\gamma) = e^{-iJ_z\alpha/\hbar} e^{-iJ_y\beta/\hbar} e^{-iJ_z\gamma/\hbar}$$

La ley de clausura no era tan obvia (el hecho de pedirla) [cuál es?]. No es una trivialidad como sí podrían serlo las otras tres propiedades.

El hecho de que si $R_1 R_2 = R_3$ se pasaba a los operadores D , de acuerdo con $D(R_1)D(R_2) = D(R_3)$ solamente si los operadores J verificaban la relación de conmutación dada por la Ec. (1.1). La información contenida en dicha relación proporciona todo lo necesario acerca del sistema.

1.1.2 Autoestados y autovalores de J

Partimos de

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijR}J_R$$

y tomamos $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ aprovechando que

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

siendo esto último 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

$$J^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle \quad J_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle$$

siendo a autovalor de J^2 y b de J_z .

Definiremos los operadores de subida y de bajada

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

que verifican

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad [J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm} \quad [J_{\pm}, J^2] = 0$$

Entonces, queremos ver quiénes son a, b . Haciendo operar, se tiene

$$J^2(J_{\pm} |a, b\rangle) = J_{\pm} J^2 |a, b\rangle = a J_{\pm} |a, b\rangle \longrightarrow J_{\pm} |a, b\rangle = \square |a, b\rangle$$

$$(J_z J_{\pm} - J_{\pm} J_z) |a, b\rangle = \pm\hbar J_{\pm} |a, b\rangle$$

$$J_z(J_{\pm} |a, b\rangle) = (b \pm \hbar)(J_{\pm} |a, b\rangle) \longrightarrow J_{\pm} |a, b\rangle = \square |a, b \pm \hbar\rangle$$

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

$$J_+ |a, b\rangle = c_+ |a, b + \hbar\rangle \quad J_- |a, b\rangle = c_- |a, b - \hbar\rangle$$

de manera que J_+ sube el J_z en una unidad de \hbar y J_- baja el J_z en una unidad de \hbar . Entonces,

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

donde C_{\pm} es una constante de normalización. Para averiguarla tenemos que tomar $(J_+)^* = J_-$. Empecemos

$$J_+ J_- = J_x^2 + iJ_y J_x - iJ_x J_y + J_y^2, \quad J_- J_+ = J_x^2 - iJ_y J_x + iJ_x J_y + J_y^2$$

$$J^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+), \quad J^2 - J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_+^{\dagger} + J_+^{\dagger} J_+)$$

$$\langle a, b | J^2 - J_z^2 | a, b \rangle = 1/2 \langle a, b | J_+ J_+^{\dagger} + J_+^{\dagger} J_+ | a, b \rangle$$

$$(a - b^2) \langle a, b | a, b \rangle = 1/2 [\langle a, b | J_+ J_+^{\dagger} | a, b \rangle + \langle a, b | J_+^{\dagger} J_+ | a, b \rangle]$$

$$(a - b^2) \langle a, b | a, b \rangle = |J_+^{\dagger} | a, b \rangle|^2 \geq 0, \quad \Rightarrow a \geq b^2$$

Esto significa que hay cota máxima para b . Como

$$J_+ |a, b_M\rangle = 0,$$

debe dar el ket nulo puesto que no se puede seguir subiendo. No sé qué le hace al ket la siguiente combinación de operadores

$$J_- J_+ |a, b_M\rangle = 0$$

pero se puede evaluar del siguiente modo;

$$J_- J_+ = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y] = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

$$(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |a, b_M\rangle = 0$$

$$(a - b_M^2 - \hbar b_M) |a, b_M\rangle = 0$$

$$a = b_M(b_M - \hbar)$$

$$J_- |a, b_m\rangle = 0$$

y como no puede seguir bajando debe dar el ket nulo

$$J_+ J_- |a, b_m\rangle = 0$$

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$$

$$(J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) |a, b_m\rangle = (a - b_m^2 + \hbar b_m) |a, b_m\rangle = 0$$

$$b_M(b_M + \hbar) = b_m(b_m - \hbar)$$

tiene solución $b_M - b_m = -\hbar$ si $b_M + b_m \neq 0$ pero esto es absurdo de manera que $b_M = b_m$. Entonces

$$-b_m = b_M \quad \Rightarrow \quad -b_M \leq b \leq b_M$$

Luego, para valor a fijo

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

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.

Puede llegar desde uno a otro con J_+ .

Definiremos

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

pero como $b/\hbar = m$

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

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

esta es la degeneración del estado L^2 . En resumen

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

todo lo cual salió de la relación de conmutación.

1.1.3 La normalización de J_{\pm}

Nos falta aún la normalización.

$$J_+ |j, m\rangle = c_+ |j, m+1\rangle \quad J_-^\dagger = J_+$$

Usando la ortonormalidad de los estados se ve que

$$\langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle = \langle j, m | J_+^\dagger J_+ | j, m \rangle = |c_+|^2$$

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

y como puedo fijar la fase en la unidad, se tiene

$$c_+ = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$\langle j, m | J_+ J_- | j, m \rangle = \langle j, m | J_-^\dagger J_- | j, m \rangle = |c_-|^2$$

$$= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2 = |c_-|^2$$

$$c_- = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

Finalmente, se tienen

$$J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle$$

y

$$J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle$$

Se ve que los estados más bajos o más altos se aniquilan

$$J_- |j, -j\rangle = 0 \quad J_+ |j, j\rangle = 0$$

Los elementos de matriz de J^2, J_z, J_+ serán, si se asume normalización de $|j, m\rangle$,

$$\begin{aligned}\langle j', m' | J^2 | j, m \rangle &= j(j+1)\hbar^2 \delta_{jj'} \delta_{m'm} \\ \langle j', m' | J_z | j, m \rangle &= m\hbar \delta_{jj'} \delta_{m'm}\end{aligned}$$

Y además

$$\langle j', m' | J_{\pm} | j, m \rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar \delta_{jj'} \delta_{m', m \pm 1}$$

que no es diagonal, aunque por poco. Los $|j', m'\rangle$ no son autoestados de J_{\pm} .

En el subespacio angular de j, m vale la completitud

$$\sum_j \sum_{m=-j}^j |j, m\rangle \langle j, m| = \mathbb{1},$$

pero para especificar bien el estado necesito de ciertos sistemas un número más, mínimamente, que es el de la energía

$$\sum_k \sum_j \sum_{m=-j}^j |k, j, m\rangle \langle k, j, m| = \mathbb{1}.$$

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

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

$$\mathcal{D}(R) = e^{i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi / \hbar}$$

siendo que $\mathcal{D}(R)$ tiene por efecto rotar el sistema físico. Cuando $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{z}}$ es fácil, pero en caso contrario no sabemos cómo opera. Lo primero que hay que notar es que

$$\langle j', m' | \mathcal{D}(R) | j, m \rangle \propto \delta_{jj'}$$

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

$$\mathcal{D}(R) = f(J_i) \longrightarrow [J^2, \mathcal{D}(R)] = 0$$

y

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)} = \langle j, m' | e^{i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi / \hbar} | j, m \rangle$$

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

$$\mathcal{D}(R) |j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m' | e^{i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi / \hbar} | j, m \rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) |j, m'\rangle$$

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

$$\mathcal{D}(R) |j, m\rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) |j, m'\rangle$$

donde $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ son las funciones de Wigner.

La matriz de $\mathcal{D}(R)$ (no caracterizada por un único j) puede ponerse en forma diagonal por bloques, lo cual surge de considerar la aplicación sobre $\alpha |j, m\rangle + \beta |j, m'\rangle$

$$\mathcal{D}_{(R)} |\gamma\rangle = \alpha |j_1, m_1\rangle + \beta |j_2, m_2\rangle$$

$$\mathcal{D}(R) = \begin{pmatrix} \begin{matrix} j' & j'' & j''' \\ \square & 0 & 0 \\ 0 & \square & 0 \\ 0 & 0 & \square \end{matrix} \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{matrix} j' \\ j'' \\ j''' \end{matrix}$$

con cada bloque de $(2j_q+1) \times (2j_q+1)$ con $q = 1, 2, \dots$, pero siendo cada bloque irreducible. Cada bloque es un grupo; en efecto, las matrices de rotación con j fijo forman un grupo. $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ son los elementillos de la matriz.

$$|j, m\rangle \xrightarrow[\text{Rotación}]{} \mathcal{D}(R) |j, m\rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) |j, m'\rangle$$

donde el $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ es la amplitud de hallar al $|j, m\rangle$ rotado en $|j, m'\rangle$. La matriz lo que hace es hacer que varíen las proyecciones del ket sobre la base, pero conservando el valor de j .

Hay un dibujito pederro en la carpeta P37.

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

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

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)} = \langle j, m' | e^{-iJ_z\alpha/\hbar} e^{-iJ_y\beta/\hbar} e^{-iJ_z\gamma/\hbar} | j, m \rangle$$

donde acá sabemos qué es lo que hacen los que están a los lados, porque ya lo calculamos, y entonces

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)} = e^{-i(-m'\alpha+m\gamma)} \underbrace{\langle j, m' | e^{-iJ_y\beta/\hbar} | j, m \rangle}_{d_{m'm}^{(j)}}$$

siendo el primer factor una fase. En los $d_{m'm}^{(j)}$, que son un subconjunto de las funciones de Wigner, está la dificultad de la cuenta.

1.2 Formalismo de spinores de Pauli

Apropiado para trabajar con sistemas de spín 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 χ_{\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 spín 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 2×2 , 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 σ 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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.3 Momento angular orbital

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$$

verifica el álgebra de \mathbf{J} ,

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijR} L_R \quad L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$$

$$L_z = x p_y - y p_x$$

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

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{iL_z \delta\phi}{\hbar}\right) |x', y', z'\rangle &= 1 - \frac{iP_y}{\hbar}(x\delta\phi) + \frac{iP_x}{\hbar}(y\delta\phi) |x', y', z'\rangle \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} (P_y x \delta\phi - P_x y \delta\phi)\right] |x', y', z'\rangle \end{aligned}$$

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

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

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

$$\Psi_\alpha(\mathbf{x}') = \langle x', y', z' | \alpha \rangle \xrightarrow[\text{Rotamos en } z]{} \left\langle x', y', z' \left| 1 - \frac{iL_z \delta\phi}{\hbar} \right| \alpha \right\rangle = \langle x' + y' \delta\phi, y' - x' \delta\phi, z' | \alpha \rangle$$

y en coordenadas esféricas,

$$\Psi_\alpha(\mathbf{x}') = \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle \xrightarrow[\text{Rotamos en } z]{} \langle r, \theta, \phi - \delta\phi | \alpha \rangle$$

Podemos hallar una expresión para L_z en esféricas:

$$\left\langle r, \theta, \varphi \left| 1 - \frac{L_z \delta\phi}{\hbar} \right| \alpha \right\rangle \approx \langle \phi | \alpha \rangle - \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \phi | \alpha \rangle \delta\phi$$

identificamos

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{r} \left| -\frac{iL_z}{\hbar} \right| \alpha \right\rangle &= -\frac{\partial}{\partial \phi} \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle \\ L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned}$$

operador L_z en esféricas.

Esta construcción usa que

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \langle \phi | \alpha \rangle \approx \frac{\langle \phi + \delta \phi | \alpha \rangle - \langle \phi | \alpha \rangle}{\delta \phi} = \frac{\langle \phi | \alpha \rangle - \langle \phi - \delta \phi | \alpha \rangle}{\delta \phi}$$

y luego se despeja de la última $\langle \phi - \delta \phi | \alpha \rangle$.

Usando

$$L^2 = L_z^2 + \frac{1}{2} (L_+ L_- + L_- L_+)$$

se llega a

$$\langle r, \theta, \phi | L^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} [\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}] \right] \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle$$

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

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:

$$\langle \mathbf{r} | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$\langle \mathbf{r} | n, l, m \rangle = (\langle r | \otimes \langle \theta, \phi |) (|n, l, m \rangle) = \langle r | n, l, m \rangle \langle \theta, \phi | l, m \rangle$$

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

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

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

$$\langle \hat{n} | \ell, m \rangle = Y_\ell^m(\theta, \phi) = Y_\ell^m(\hat{n})$$

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

$$L_z |\ell, m\rangle = m \hbar |\ell, m\rangle$$

de manera que

$$\langle \hat{n} | L_z | \ell, m \rangle = m \hbar \langle \hat{n} | \ell, m \rangle = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \hat{n} | \ell, m \rangle$$

y entonces

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto e^{im\phi}.$$

$$L^2 |\ell, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |\ell, m\rangle$$

y de modo ídem

$$\langle \hat{n} | L^2 | \ell, m \rangle = l(l+1)\hbar^2 \langle \hat{n} | \ell, m \rangle$$

$$(-\hbar^2 r^2 \nabla_{\theta, \phi}^2 + l(l+1)\hbar) \langle \hat{n} | \ell, m \rangle = 0$$

Entonces, con la ortogonalidad

$$\longrightarrow \langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

y con la completitud

$$\longrightarrow \int d\Omega |\hat{n}\rangle \langle \hat{n}| = 1$$

de manera que llegamos a

$$\int d\Omega \langle l', m' | \hat{n} \rangle \langle \hat{n} | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

Podemos hallar una expresión para

$$\langle \hat{n} | L_+ | l, l \rangle = 0$$

$$-i\hbar e^{i\phi} \left(i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \hat{n} | l, l \rangle = 0 \Rightarrow Y_l^m(\theta, \phi) = c_l e^{il\phi} \sin^l \theta$$

Luego usamos L_- para hallar sucesivamente los demás Y_ℓ^m

$$\frac{\langle \hat{n} | L_- | l, m \rangle}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} = \langle \hat{n} | l, m-1 \rangle$$

y por este camino se llega a

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos^{l-m} \theta)} (\sin \theta)^{2l}$$

con

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)(Y_l^m(\theta, \phi))^* \quad Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$$

En el caso de momento angular orbital ℓ no puede ser semientero porque entonces m sería semientero y en una vuelta de 2π

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

entonces ψ no será univaluada

Además,

$$\langle \mathbf{x} | e^{-iL_z 2\pi/\hbar} | \alpha \rangle = \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle \quad (\text{no hay signo menos})$$