

TEMA 1: MOMENTO ANGULAR EN MC

OUTLINE:

1.1. MOTIVACIÓN

Importancia Momento Angular. Conservación y Simetría.
Generador de Rotaciones.

1.2. DEFINICIÓN MOMENTO ANGULAR EN MC

Def. momento angular orbital. Commutadores (álgebra)
Def. general. Notación J, L, S .

1.3. TEORÍA GENERAL MOMENTO ANGULAR

Obj: Busqueda base común $H, J^2, J_z: |K, l, m\rangle$

Def operadores J^\pm

Cuantización y Números Cuánticos

Base ortonormal $|K, l, m\rangle$ y cierre

Representación matricial

1.4 ARMÓNICOS ESFERÍCOS

Obj. Soluciones $|l, m\rangle$ en espacio de posición

Solución autoestados L^2, L_z en esferas

Propiedades

1.5 GENERADORES DE ROTACIONES

Rotaciones geométricas y su representación R en espacio de estados.

\vec{L} como generador de R . Operadores escalares y vectoriales. Simétricos

1.1 MOTIVACIÓN

En MC1 han visto las ideas y postulados básicos de la MC y resuelto sus ecuaciones (la ecuación de Schrödinger no relativista) para casos simples en 1D.

Igual que en mecánica clásica, al pasar a problemas 3D se abre un nuevo aspecto fundamental: las rotaciones y el momento angular. Y sabemos que:

- \vec{L} son los generadores de las rotaciones, igual que \vec{p} lo son de las translaciones y H de la evolución temporal.
- Teorema Noether: invariancia/simetría rotacional \Rightarrow conservación \vec{L} .
 - ↳ Se conserva en sist. aislados o con potenciales centrales.
 - ↳ Codifica la dependencia angular en estos casos.

En MC pasa lo mismo, aunque con algunas características más:

- Estará cuantizado (exp. Stern-Gerlach)
- Aparecerá un momento angular intrínseco (exp. Stern-Gerlach)
 - ↳ SPIN
- Sumar momentos será peculiar, ya que tendrán que mantener todas estas propiedades.

Por todo ello, vamos a dedicar una gran parte del curso a estudiar el momento angular en full glory, básicamente la mitad del curso.

Algunas partes serán más teóricas y abstractas, otras más aplicadas a problemas reales. Vamos a intentar intercalarlas para amenizar la cosa:

Tema 1. Propiedades Generales del Momento Angular (teórico)

Tema 2. Pot. Centrales y Atomo de Hidrógeno (práctico)

Tema 3. El spin (del electrón)

Tema 4. Suma de momentos angulares.

1.2. DEFINICIÓN MOMENTO ANGULAR EN MC

Como en otras variables conocidas, partimos de lo clásico y cuantizamos:

dásico: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k \Rightarrow L_x = y p_z - z p_y$

Cuantizamos $\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \vec{r} \rightarrow \hat{\vec{r}} \\ \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \end{array} \right\} L_x \rightarrow \hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y$

- Notas: - $[L] = [\hbar]$ de acción ($M \cdot L^2 T^{-1}$) - son hermíticos
 - Siempre serán operadores, quitarnos los gorritos

Parecen iguales, pero ahora son operadores, que sabemos que no siempre comutan:

$$[x_i, p_j] = x_i p_j - p_j x_i = i\hbar \delta_{ij} \rightarrow \text{Principio Incertidumbre de Heisenberg}$$

Usando este comutador y la definición de \vec{L} , tenemos:

$$[L_i, x_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} x_k$$

$$[L_i, p_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} p_k$$

Y sobre todo $\Rightarrow [L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$

Demonstraciones [dejarlo como ejercicio]:

$$\begin{aligned} \textcircled{+} \quad [L_i, x_j] &= \epsilon_{ijk} [x_k p_e, x_j] = \epsilon_{ijk} \left\{ x_k \underbrace{[p_e, x_j]}_{-i\hbar \delta_{ej}} + [x_k, x_j] p_e \right\} \\ &= -i\hbar \epsilon_{ijk} x_k = i\hbar \epsilon_{ijk} x_k // \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \textcircled{+} \quad [L_i, p_j] &= \epsilon_{ijk} [x_k p_e, p_j] = \epsilon_{ijk} [x_k, p_j] p_e = i\hbar \epsilon_{ijk} p_e // \end{aligned}$$

La demostración general de $[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$ es liosa por los índices y poco iluminadora (la dejo aquí hecha just in case). En clase mejor hacer un ejemplo concreto como en la siguiente página.

$$\begin{aligned} \textcircled{+} \quad [L_i, L_j] &= [L_i, \epsilon_{jkl} x_k p_e] \\ &= \epsilon_{jkl} \left\{ x_k [L_i, p_e] + [L_i, x_k] p_e \right\} \\ &= i\hbar \epsilon_{jkl} \left\{ \epsilon_{iem} x_k p_m + \epsilon_{ikm} x_m p_e \right\} \\ &= i\hbar \left\{ (\delta_{jm} \delta_{ki} - \delta_{ji} \delta_{km}) x_k p_m + (\delta_{ij} \delta_{em} - \delta_{ie} \delta_{jm}) x_m p_e \right\} \\ &= i\hbar \left\{ x_i p_j - x_j p_i \right\} \end{aligned}$$

Que es lo mismo que

$$i\hbar \epsilon_{ijk} L_k = i\hbar \epsilon_{ijk} \epsilon_{kmn} x_m p_n = i\hbar (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) x_m p_n = i\hbar (x_i p_j - x_j p_i)$$

Demostramos un caso concreto:

$$[L_x, L_y] = [yP_z - zP_y, zP_x - xP_z]$$

$$\text{Linearidad} = [yP_z, zP_x] - [yP_z, xP_z] - [zP_y, zP_x] + [zP_y, xP_z]$$

usamos $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ para ir separando, sin embargo la única combinación que no es cero será $[z, P_z] = i\hbar$, que solo lo pescamos en el primero y último:

$$= y[P_z, z]P_x + x[z, P_z]P_y$$

$$= i\hbar(-yP_x + xP_y) = i\hbar L_z //$$

Y de la misma forma:

$$\left. \begin{array}{l} [L_x, L_y] = i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] = i\hbar L_y \end{array} \right\} \quad [L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$$

Álgebra del Momento Angular

Estas relaciones son tan importantes que las usaremos como definición general de momento angular en MC (siguiente página)

DEFINICIÓN GENERAL MOMENTO ANGULAR EN MC:

Un operador \vec{J} tal que sus componentes cumplen

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

Notas:

- Veremos que simplemente de esta definición podemos sacar una batería de implicaciones físicas, entre ellas la cuantización del momento angular.
- Notación:
 - \vec{J} momento angular genérico
 - \vec{L} momento angular orbital (análogo clásico)
 - \vec{S} spin (sin análogo clásico, puramente cuántico)
- En general \vec{J} puede ser $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ o $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 + \dots$ pero siempre cumplirá el álgebra (de hecho cada \vec{J}_i cumplirá el álgebra, como veremos)
- \vec{J} es un operador vectorial (ya lo veremos, pero NO es invariante bajo rotaciones. Transforma como un vector, de ahí la flechita y sus 3 componentes)
- Además sus componentes J_i NO commutan:

$$[J_i, J_j] \neq 0 \Rightarrow \text{NO podemos medir simultáneamente las 3 componentes de } \vec{J}$$

- Definimos un escalar: el momento angular total:

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

Que cumple $[\vec{J}^2, \vec{J}_i] = 0$.

Demostración e.g:

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, \vec{J}_x] &= [J_y^2, J_x] + [J_z^2, J_x] \\ &= J_y [J_y, J_x] + [J_y, J_x] J_y + J_z [J_z, J_x] + [J_z, J_x] J_z \\ &= i\hbar (-J_y J_z - J_z J_y + J_z J_y + J_y J_z) = 0 // \end{aligned}$$

Notas:

- \vec{J}^2 es escalar \rightarrow invariante bajo rotaciones

- $[\vec{J}^2, \vec{J}_i] = 0 \Rightarrow$ podemos medir simultáneamente \vec{J}^2 y uno de los componentes de \vec{J}_i
 \hookrightarrow se suele elegir J_z , aunque da igual.

- Nuestro objetivo será calcular los autoestados comunes de \vec{J}^2 y J_z que
 \hookrightarrow Describirán el momento angular total y su proyección (ojo que estamos en cuántico y la proyección será en un eje concreto, en los otros dos tendremos gato encerrado)

{- Simetría rotacional $\Rightarrow [H, \vec{J}] = 0 \Rightarrow$ autoestados comunes $\{H, \vec{J}^2, J_z\}$ }

{- La parte $\{\vec{J}^2, J_z\}$ describirán TODA la dependencia angular en problemas con simetría esférica/rotacional
 \hookrightarrow e.g. potenciales centrales como el átomo H.

Avance, lo veremos explícitamente más adelante.

1.3. TEORÍA GENERAL DEL MOMENTO ANGULAR

El problema que tenemos en mente es un sistema físico con simetría rotacional, que como hemos dicho (y veremos explícitamente más adelante) tendrá una dependencia angular descrita completamente por L^2 y L_z . Así que buscamos los autoestados de L^2 y L_z .

1.3.1. Notación: autoestados y autovectores (números cuánticos)

Buscamos los autoestados simultáneos de J^2 y J_z :

$$J^2 |\psi\rangle = \lambda \hbar^2 |\psi\rangle, \quad \lambda \geq 0$$
$$J_z |\psi\rangle = m \hbar |\psi\rangle$$

Como J^2 es la suma de 3 operadores hermíticos al cuadrado, sus autovectores serán positivos o cero:

$$\langle \psi | J^2 | \psi \rangle = \langle \psi | J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 | \psi \rangle = \| J_x | \psi \rangle \|^2 + \| J_y | \psi \rangle \|^2 + \| J_z | \psi \rangle \|^2 \geq 0$$
$$\hookrightarrow (\text{por otro lado}) = \lambda \hbar^2 \Rightarrow \lambda \geq 0$$

Por motivos que quedarán claros en un momento, los autovectores $\lambda \geq 0$ se suelen escribir como

$$\lambda = j(j+1) \quad \text{con} \quad j \geq 0$$

Nota: para cada $\lambda \geq 0$, sólo existe una solución $j \geq 0$.

De esta forma, los números cuánticos j y m definen la base estándar o canónica del momento angular:

$$|\Psi\rangle \rightarrow |j, m\rangle \text{ tal que} \quad \begin{cases} J^2 |j, m\rangle = j(j+1) \hbar^2 |j, m\rangle \\ J_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle \end{cases}$$

En general, J^2 y J_z NO formarán un CCO [conjunto completo de observables, a veces también CCOC, con la última C de compatibles, i.e. que comutan], por lo que necesitaremos otros observables A, B, \dots (e.g. el Hamiltoniano). Pero la simetría rotacional implicará que $[A, \vec{J}] = [B, \vec{J}] = \dots = 0$, así que j y m seguirán siendo buenos números cuánticos.

Para este tema usamos el número cuántico K para indicar todos los demás números cuánticos independientes de \vec{J} que son necesarios para formar una CCO. De forma que buscamos:

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

$$J_z |K, j, m\rangle = m \hbar |K, j, m\rangle$$

Que formarán una base:

$$\langle K', j', m' | K, j, m \rangle = \delta_{KK'} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad [\text{ortogonalización}]$$

$$\sum_{K, j, m} |K, j, m\rangle \langle K, j, m| = \mathbb{I} \quad [\text{cierra}]$$

1.3.2. Operadores escalares J_+ y J_-

Antes de seguir, definimos dos operadores:

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad ; \quad J_- = J_x - iJ_y$$

- Nota:** - No son hermíticos, si no el adjunto del otro: $J_+^\dagger = J_-$
- Análogos a los operadores a y a^\dagger del osc. armónico.

Comutadores: [dejar como ejercicio]

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$$

$$[J^2, J_\pm] = 0$$

Los usaremos en vez de J_x y J_y . Para ello calculamos los productos $J_\pm J_\mp$:

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

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

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

Operadores "escalera". Dado el estado $|K, j, m\rangle$, J_z mantiene K y j , pero cambian m en ± 1 .

Para demostrarlo aplicamos J^2 y J_z sobre el nuevo estado $J_z |K, j, m\rangle$:

$$\rightarrow [J^2, J_z] = 0$$

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

$$J_z [J_z |K, j, m\rangle] = (J_z J_z \pm \hbar J_z) |K, j, m\rangle = (m \pm 1) \hbar [J_z |K, j, m\rangle]$$

$$\hookrightarrow [J_z, J_z] = \pm \hbar J_z$$

Vemos que K y j no cambian, pero $m \rightarrow m \pm 1$, o sea

$$J_z |K, j, m\rangle \rightarrow |K, j, m \pm 1\rangle$$

Para sacar la relación exacta pedimos que el nuevo estado $|K, j, m \pm 1\rangle$ también esté normalizado:

$$|K, j, m \pm 1\rangle = \alpha J_z |K, j, m\rangle$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle K, j, m \pm 1 | K, j, m \pm 1 \rangle &= |\alpha|^2 \langle K, j, m | J_z J_z | K, j, m \rangle \\ &= |\alpha|^2 \langle K, j, m | J^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z | K, j, m \rangle \\ &= |\alpha|^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)] \underbrace{\hbar^2}_{\text{normalized}} \langle K, j, m | K, j, m \rangle = 1 \end{aligned}$$

Elegimos K fijo de α para que sea real

$$|K, j, m \pm 1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}} J_z |K, j, m\rangle$$

Resumen: la base $|K, j, m\rangle$ cumple:

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

$$J_z |K, j, m\rangle = m \hbar |K, j, m\rangle$$

$$J_{\pm} |K, j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m\pm1)} |K, j, m\pm1\rangle$$

1.3.3. Cuantización del momento angular

a) m tiene valores $-j \leq m \leq j$

Como $J_{\pm} |K, j, m\rangle$ tiene que tener norma positiva, veremos que

$$\begin{aligned} j(j+1) - m(m+1) &= (j-m)(j+m+1) \geq 0 \\ j(j+1) - m(m-1) &= (j+m)(j-m+1) \geq 0 \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{c} \\ \end{array} \right\} \xrightarrow{\text{para } j \geq 0} -j \leq m \leq j$$

También nos dice que:

$$J_+ |K, j, j\rangle = 0 \quad \text{y} \quad J_- |K, j, -j\rangle = 0$$

Y de hecho se puede ver que

$$J_{\pm} |K, j, m\rangle = 0 \iff m = \pm j$$

b) j es entero o semientero $j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

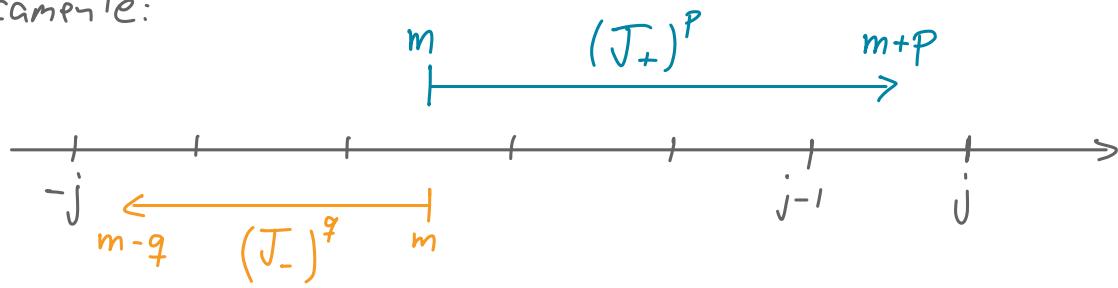
Intento versionar un poco la del Cohen para hacerla más gráfica, a ver si se entiende:

Suponemos que existe un estado $|k, j, m\rangle$ que cumple $-j \leq m \leq j$, y los operadores J_{\pm} que cambian $m \pm 1$.

Aplicando J_+ un número p de veces (con $p \geq 0$ entero), podemos "mover" el estado hasta que cumpla:

$$j-1 < m+p \leq j$$

Graficamente:



Si resultase que pudiésemos caer en el centro del último intervalo, es decir que $m+p < j$, podríamos aplicar J_+ una vez más y obtener algo no nulo, pero el resultado final tendría un valor de J_z $m+p+1 > j$, que es imposible. Así que por narices necesitamos que si p nos lleva a este último intervalo, sea al extremo:

$$m+p=j$$

Repetiendo lo mismo con J_z , existirá un número entero (\neq cero) de veces que podemos aplicarlo hasta llegar al mínimo:

$$m - q = -j$$

Combinando las dos condiciones:

$$p + q = 2j \Rightarrow j = \frac{\# \text{entero}}{2} = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

El momento angular está cuantizado a valores de j enteros o semienteros:

$$J^2 |K, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |K, j, m\rangle \quad \text{con } j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

y su tercera componente:

$$J_z |K, j, m\rangle = m\hbar |K, j, m\rangle \quad \text{con } m = \underbrace{-j, -j+1, \dots, j-1, j}_{2j+1 \text{ valores}}$$

Notas:

- Según el problema, todos o sólo algunos de los valores de j existirán. Ejs:
 - \vec{L} tendrá valores enteros
 - \vec{s} tendrá un valor concreto en cada partícula, definiendo si son fermiones o bosones
- Para cada j , en principio m cogerá los $2j+1$ valores posibles.
↳ antiejemplo: el fotón.

1.3.4. Representaciones Matriciales [opcional, sólo si de tiempo]

Para empezar a ver la utilidad de todo lo que hemos aprendido (lo veremos más explícitamente con el atomo de H), volvamos a nuestro problema genérico con simetría esférica y un operador A adicional a \vec{J}^2 y J_z en nuestro CCO (podría ser más, pero para la discusión nos vale).

$$\text{sym rot} \Rightarrow [A, \vec{J}] = 0$$

En genérico, tendremos que $A|K, j, m\rangle = a_{kjm}|K, j, m\rangle$, pero la simetría quitará la dependencia en m :

$$A|K, j, m\rangle = a_{kj}|K, j, m\rangle$$

Demo: Como $[A, \vec{J}] = 0 \Rightarrow [A, J_{\pm}] = 0$, por lo que $|K, j, m \pm 1\rangle$ tendrán los mismos autovalores que $|K, j, m\rangle$:

$$A|K, j, m \pm 1\rangle \xrightarrow{\text{norm}} AJ_{\pm}|K, j, m\rangle = a_{kjm} J_{\pm}|K, j, m\rangle \xrightarrow{\text{norm}} a_{kjm}|K, j, m \pm 1\rangle$$

Como tiene que ser verdad para todo m : $a_{kjm} \equiv a_{kj}$ indep de m .

Interpretación:

- La simetría rotacional (i.e. \vec{J}) no cambia k ni j , pero si m , que controla la proyección (~orientación)
- Dos estados con k o j distintos serán ortogonales y no se podrán mezclar incluso rotando (aplicando \vec{J}).

- Esto nos permite dividir todo el espacio de estados en subespacios con K y j definidos, todos ellos ortogonales entre sí.
- Podemos estudiar estos espacios una vez y nos servirá para describir la parte angular de cualquier problema con simetría rotacional.
- Cada uno de estos subespacios tendrá una dimensión de $(2j+1) \times (2j+1)$, los valores que podrá coger m . Se representan con matrices. [representar = cumplen el álgebra del grupo]

Ej. Representación $j=1/2$ [La más pequeña no trivial ($j>0$)]

- La dimensión será $2j+1 = 2 \Rightarrow m = \pm 1/2$
- Usamos la base $\{|+\rangle, |-\rangle\} \equiv \{|m=1/2\rangle, |m=-1/2\rangle\}$.
- En esta base:

$$\left. \begin{array}{l} \langle \pm | J_z | \pm \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \\ \langle \mp | J_z | \pm \rangle = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow J_z^{(1/2)} = \langle m | J_z | m' \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{matrix} |+\rangle \\ |-\rangle \end{matrix}$$

$$\langle + | J_+ | - \rangle = \hbar \Rightarrow J_+^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\langle - | J_- | + \rangle = \hbar \Rightarrow J_-^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

De aquí también tenemos:

$$J_x^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ i & 0 \end{pmatrix} ; \quad J_y^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$J^2^{(1/2)} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Notas: - Las matrices $J_i^{(1/2)}$ cumplen el álgebra de momento angular:

$$[J_i^{(1/2)}, J_j^{(1/2)}] = i \epsilon_{ijk} J_k^{(1/2)}$$

- $J^2^{(1/2)}$ tiene autovalores $\frac{3}{4}\hbar^2 \Rightarrow j = 1/2$

↳ son una representación de $j=1/2$.

- $J_i^{(1/2)}$ son (proporcionales a) las matrices de Pauli:

$$J_i^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$$

que forman una base de $SU(2)$.

- Aunque $J_x^{(1/2)}$ y $J_y^{(1/2)}$ no son diagonales en esta base, tienen autovalores $\pm \hbar/2$.

1.4. Armónicos Esféricos

Todo lo que hemos aprendido hasta ahora ha sido a partir del álgebra (las relaciones de commutación) del momento angular.

Ahora vamos a ver qué forma explícita tienen en el espacio de configuración o posición $\psi_{l,m}$

Como hablamos de posición, tenemos en mente simetrías bajo rotaciones espaciales, por lo que:

- Nos centramos en el momento angular orbital $|l, m\rangle \rightarrow |l, m\rangle$ con $l \geq 0$ entero.
- Simetría rotacional \Rightarrow coordenadas esféricas
- Buscaremos las soluciones explícitas a los autoestados de L^2 y L_z : los armónicos esféricos Y_e^m

$$L^2 Y_e^m = l(l+1)\hbar Y_e^m$$

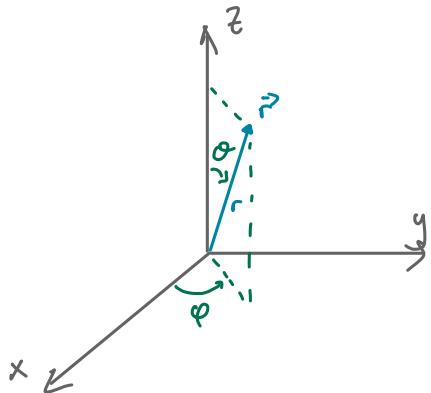
$$L_z Y_e^m = m\hbar Y_e^m$$

1.4.1. Ecuación de autoestados en coordenadas esféricas

Queremos resolver explícitamente los autoestados de L^2 y L_z , que en espacio de configuración lucen:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow \begin{cases} L_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y) & \partial_i \equiv \nabla_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i} \\ L_y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z) \\ L_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) \end{cases}$$

Como nos interesarán problemas con simetría esférica, mejor trabajar en polares.



$$\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\varphi & r > 0 \\ y &= r \sin\theta \sin\varphi & \theta \in [0, \pi] \\ z &= r \cos\theta & \varphi \in [0, 2\pi) \end{aligned}$$

$$d^3r = dx dy dz = r^2 dr \underbrace{\sin\theta d\theta d\varphi}_{ds^2}$$

Pasamos \vec{L} a esféricos [no merece hacerlo]

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\partial_\theta^2 + \frac{1}{\tan\theta} \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta} \partial_\varphi^2 \right)$$

$$L_y = -i\hbar \partial_\varphi$$

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} (\pm \partial_\theta + i \cot\theta \partial_\varphi)$$

Nuestro objetivo es encontrar la solución a:

$$\begin{cases} \mathcal{L}^2 \psi(r, \theta, \varphi) = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi(r, \theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 \psi(r, \theta, \varphi) \\ \mathcal{L}_z \psi(r, \theta, \varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \theta, \varphi) = m\hbar \psi(r, \theta, \varphi) \end{cases}$$

Notas:

- Son independientes de r , sólo dependen de los ángulos.
Como dijimos, $\vec{\mathcal{L}}$ nos dice cómo será la parte angular, que podremos separar:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = f(r) Y_e^m(\theta, \varphi)$$

- $Y_e^m(\theta, \varphi)$ son los armónicos esféricos, solución a

$$\begin{cases} \mathcal{L}^2 Y_e^m(\theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 Y_e^m(\theta, \varphi) \\ \mathcal{L}_z Y_e^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_e^m(\theta, \varphi) \end{cases}$$

- Se caracterizan sólo con (l, m) , como hemos visto para $\vec{\mathcal{L}}$.

1.4.2. Autoestados de L_2 .

Empezamos con la parte fácil:

$$L_2 Y_e^m(\theta, \varphi) = -i\hbar \partial_\varphi Y_e^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_e^m(\theta, \varphi)$$

La solución general será

$$Y_e^m(\theta, \varphi) = F_e^m(\theta) e^{im\varphi}$$

Notas:

- La dependencia en φ está factorizada como $e^{im\varphi}$.

- Como φ es periódica, necesitamos:

$$Y_e^m(\theta, \varphi=0) = Y_e^m(\theta, \varphi=2\pi) \Rightarrow e^{i2\pi m} = 1 \Rightarrow m \text{ entero}$$

- Como es un autoestado de L^2 y L_z : m entero $\Leftrightarrow j$ entero

Los autoestados de L^2 tienen j y m entero

$$j \geq 0 \quad y \quad -j \leq m \leq j$$

↳ Si m fuese semientero, que era la otra opción, tendríamos $e^{i2\pi m} = -1$. Dar una vuelta metería un signo. Esto pasaría con spins tipo el del electrón.

1.4.x. Aplicando L_+ [NO CONTARCO]

Antes de buscar la solución completa de L^2 , es útil mirar la información que podemos sacar de L_+ , ya que sabemos que debe anularse para $m = l$:

$$L_+ Y_e^l(\theta, \varphi) = 0$$

Usando $L_+ = \hbar e^{i\varphi} (\partial_\theta + \frac{i}{\tan\theta} \partial_\varphi)$ y $Y_e^l(\theta, \varphi) = F_e(\theta) e^{il\varphi}$,

$$\left[\partial_\theta - \frac{l}{\tan\theta} \right] F_e(\theta) = 0 \Rightarrow F_e(\theta) = C_e (\sin\theta)^l$$

Por tanto,

$$Y_e^l(\theta, \varphi) = C_e (\sin\theta)^l e^{il\varphi}$$

Normalizando sacamos C_e : [Cohen App. Av1]

$$\int d\Omega |Y_e^l|^2 = 1 \Rightarrow C_e = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

y aplicando L_- podemos sacar el resto Y_e^m .

Esta parte me gusta porque es simple de resolver y entender, aunque sólo le solución bonita para Y_e^l . Aplicar L_- en general es más infierno (lo hace el Cohen en el App Av1). Mejor resolver directamente L^2 con los polinomios de Legendre, como hace Ibañez y el Cohen en el App. Av1.2e.

Esto de $L_+ Y_e^l = 0$ se puede poner como ejercicio.

1.4.3. Autovectores de L^2

Sabiendo ya la dependencia en φ :

$$Y_e^m(\theta, \varphi) = F_e^m(\theta) e^{im\varphi}$$

la dependencia en θ la sacamos resolviendo L^2 :

$$L^2 Y_e^m(\theta, \varphi) = -\hbar^2 \left(\partial_\theta^2 + \frac{1}{\tan \theta} \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 \right) Y_e^m(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_e^m(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow - \left(\partial_\theta^2 + \frac{1}{\tan \theta} \partial_\theta - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) F_e^m(\theta) e^{im\varphi} = l(l+1) F_e^m(\theta) e^{im\varphi}$$

usando $\partial_\theta^2 + \frac{1}{\tan \theta} \partial_\theta = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta})$:

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) F_e^m(\theta) = [m^2 - l(l+1)] F_e^m(\theta)$$

La solución a este bicho son los Polinomios asociados de Legendre:

$$P_e^m(x) = (-1)^m (1-x)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_e(x) \quad \text{con } x = \cos \theta$$

con $P_e(x)$ los Polinomios de Legendre:

$$P_e(x) = \frac{1}{2^e e!} \frac{d^e}{dx^e} (x^2 - 1)^e$$

$$\Rightarrow F_e^m(\theta) = \frac{(-1)^{m+l}}{2^e e!} (\sin \theta)^m \frac{d^{m+l}}{d(\cos \theta)^{m+l}} (\sin \theta)^{2e}$$

Notas: Tienen solución para

- El rango $-L \leq x \leq L$, que está OK porque $x = \cos\theta$
- Si $|m| \leq l$, también OK porque es un momento angular.

1.4.4. Solución completa

En problemas con simetría rotacional, L^2 y L_z serán buenas observables. Las soluciones tendrán las variables angulares separadas y dadas por los Y_e^m :

$$\Psi_{k,e,m}(\vec{r}) = R_{k,e}(r) Y_e^m(\theta, \varphi)$$

con los armónicos esféricos:

$$Y_e^m(\theta, \varphi) = C_{e,m} e^{im\varphi} P_e^m(\cos\theta)$$

siendo $P_e^m(x)$ los polinomios asociados de Legendre y la normalización:

$$C_{e,m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2e+1}{2} \frac{(e-m)!}{(e+m)!} \right)^{1/2}$$

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

1.4.5 Propiedades básicas de los armónicos esféricos

Ortonormalización:

La condición $\langle \ell', m' | \ell, m \rangle = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \text{ se traduce:}$

$$\underbrace{\int d\Omega [Y_{\ell'}^m(\theta, \varphi)]^* Y_\ell^m(\theta, \varphi)}_{d(\cos\theta) d\varphi} = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

Cierre:

La condición $\sum_{e,m} |\ell, m\rangle \langle \ell, m| = I \text{ se traduce:}$

$$\sum_e \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_e^m(\theta, \varphi) [Y_e^m(\theta', \varphi')]^* = \delta(\cos\theta - \cos\theta') \delta(\varphi - \varphi')$$

↳ Tenemos $\delta(\cos\theta - \cos\theta')$ en vez de $\delta(\theta - \theta')$ porque la integral es $\cos\theta$:
 $d\Omega = d(\cos\theta) d\varphi$

Paridad y conjugación [Demostración en clase problemas]

En polares, $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ implica $\theta \rightarrow \pi - \theta; \varphi \rightarrow \pi + \varphi$:

Paridad: $Y_e^m(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^\ell Y_e^m(\theta, \varphi)$

Conjugación: $[Y_e^m(\theta, \varphi)]^* = (-1)^m Y_e^m(\theta, \varphi)$

Ejemplos explícitos [de los Y_e^m más bajos]:

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad [\text{isotropo, } L=0]$$

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

1.4.6. Cálculo de Probabilidades de J^2 y J_z

Una vez que tenemos nuestra base de autovectores comunes de J^2 y J_z (los Y_e^m), lo único que tenemos que hacer para calcular las probabilidades de medir L^2 o L_z es proyectar.

Siendo explícitos, dado un estado arbitrario $\Psi(r, \theta, \varphi)$, lo podemos proyectar/expandir en armónicos esféricos:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{e>0} \sum_{m=-e}^e a_{e,m}(r) Y_e^m(\theta, \varphi)$$

donde

$$a_{e,m}(r) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta [Y_e^m(\theta, \varphi)]^* \psi(r, \theta, \varphi)$$

Note: estos coef. salen simplemente de usar las relaciones de cierre

$$\sum_{l,m} Y_e^m(\theta, \varphi) [Y_e^m(\theta', \varphi')]^* = \delta(\cos\theta - \cos\theta') \delta(\varphi - \varphi')$$

Los coeficientes $a_{e,m}(r)$ esconden la probabilidad de medir $l(l+1)\hbar^2$ y $m\hbar$ al medir J^2 y J_z . Más explícitamente:

$$P(l, m) = \int_0^\infty r^2 dr |a_{e,m}(r)|^2$$

Hay que integrar a todo r para quitarnos su dependencia.

Y si lo que nos interese fuese la probabilidad de medir un l o m concretos:

$$P(l) = \sum_{m=-l}^l \int_0^\infty r^2 dr |a_{e,m}(r)|^2$$

$$P(m) = \sum_{l \geq |m|} \int_0^\infty r^2 dr |a_{e,m}(r)|^2$$

Note: esto es equivalente a lo que vimos antes en la teoría general usando $|K, j, m\rangle$. Al igual que entonces, esto también se simplificaría en casos concretos con separación de variables...

En problemas verán este tipo de proyecciones en casos más concretos.

1.5 MOMENTO ANGULAR COMO GENERADOR DE ROTACIONES

Hasta ahora hemos hablado mucho sobre la importancia del momento angular, sobre su conservación en sistemas aislados o con invariancia rotacional. Ahora vamos a ver la relación entre las rotaciones y el momento angular, que serán sus generadores. Esto nos llevará a la interpretación del álgebra del momento angular, a la definición de observables escalares y vectoriales, y a cerrar el círculo de que H tiene que ser escalar, con simetría rotacional y conservación del momento angular.

1.5.1. Rotaciones del espacio y de los estados

Una rotación R del espacio es una transformación del espacio tridimensional, en la que todos se transforman en uno nuevo (transf. uno-a-uno), menos un punto que queda invariante.

Una rotación se define por completo por un eje de rotación \vec{u} y un ángulo de rotación α . Lo llamamos $R_u(\alpha)$.

Las rotaciones R forman un grupo:

- Ley del grupo $R_1 \cdot R_2 = R_3$ (el producto tb es una rotación)
- Identidad
- Inverso

Pero sus elementos no comutan:

$$R_u(\alpha) \cdot R_{u'}(\alpha') \neq R_{u'}(\alpha') R_u(\alpha)$$

Salvo que sean sobre el mismo eje

$$R_u(\alpha) \cdot R_u(\alpha') = R_u(\alpha') \cdot R_u(\alpha) = R_u(\alpha + \alpha')$$

Objetivo. Queremos saber cómo cambia (transforma) un estado $|\psi\rangle$ al rotar el espacio por R . En otras palabras, buscamos un operador R tal que:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = R \vec{r} \quad \stackrel{?}{\Rightarrow} \quad |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = R |\psi\rangle$$

Se puede demostrar que este "operador de rotación" será:

- Lineal $R(\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle) = \alpha R|\psi_1\rangle + \beta R|\psi_2\rangle$

- Unitario $R R^+ = R^+ R = \mathbb{1}$

↳ Conserva el producto escalar \Rightarrow conserve probabilidades

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= R|\psi\rangle \\ |\varphi'\rangle &= R|\varphi\rangle \end{aligned} \quad \left\{ \Rightarrow \langle \varphi' | \psi' \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle \right.$$

- Es una representación de R :

$$R_1 \cdot R_2 = R_3 \quad \Rightarrow \quad R_1 \cdot R_2 = R_3$$

1.5.2. Forma explícita del operador de rotación

Dada una rotación espacial $\vec{r}' = R \vec{r}$ y un estado inicial $|\psi\rangle$ con función de onda $\psi(r) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$, queremos saber cómo transformar $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle$. Tiene sentido pensar que la función de onda cambiará a la vez que las coordenadas, de forma que siga describiendo la misma física. Es decir,

$$\psi'(\vec{r}') = \psi(r)$$

o:

$$\psi'(\vec{r}') = \psi(R^{-1}\vec{r}')$$

y quitando las primas:

$$\psi(\vec{r}') = \psi(R^{-1}\vec{r})$$

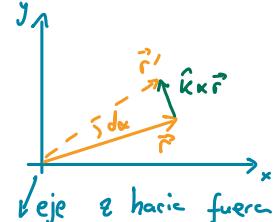
O sea que en el punto \vec{r}' , ψ' nos dará el valor que nos da ψ en el punto $R^{-1}\vec{r}$, que es justo el que caerá en \vec{r} tras rotar.

Esto lo queremos reflejar en el operador de rotación R que se encargue de transformar (rotar) el estado ψ :

$$|\psi'\rangle = R |\psi\rangle$$

Para sacar la forma explícita del operador R , tomamos una rotación infinitesimal $d\alpha$ sobre el eje z , que se puede poner como:

$$R_z(d\alpha) \vec{r} = \vec{r} + d\alpha \hat{k} \times \vec{r}$$



Para aplicar $\Psi'(\vec{r}) = \Psi(R^{-1}\vec{r})$ necesitamos $R_z^{-1}(d\alpha)$, pero esto es simplemente cambiar $d\alpha \rightarrow -d\alpha$:

$$R_z^{-1}(d\alpha) = \vec{r} - d\alpha \hat{k} \times \vec{r} = (x + y d\alpha, y - x d\alpha, z)$$

Así que buscamos la solución a

$$\Psi'(x, y, z) = \Psi(x + y d\alpha, y - x d\alpha, z)$$

expandiendo a $d\alpha$ pequeño:

$$\begin{aligned} \Psi'(x, y, z) &\approx \Psi(x, y, z) + y \frac{\partial \Psi}{\partial x} d\alpha - x \frac{\partial \Psi}{\partial y} d\alpha + \dots \\ &= \Psi(x, y, z) - d\alpha [x \partial_y - y \partial_x] \Psi(x, y, z) \\ &= \Psi(x, y, z) - \frac{i}{\hbar} d\alpha \mathcal{L}_z \Psi(x, y, z) \end{aligned}$$

Que si lo ponemos en forma de kets:

$$\Psi'(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi' \rangle = \langle \vec{r} | (1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha \mathcal{L}_z) | \Psi \rangle \equiv \langle \vec{r} | R_z | \Psi \rangle$$

Por lo que identificamos $R_z(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha \mathcal{L}_z$. Generalizando:

$$R_u(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha \vec{\mathcal{L}} \cdot \vec{u}$$

El momento angular es el generador de las rotaciones!!!

⊕ Esto nos ayuda a interpretar sus relaciones de commutación. Para ello, usamos una propiedad de las rotaciones espaciales:

$$R_y(-d\alpha') R_x(d\alpha) R_y(d\alpha') R_x(-d\alpha) = R_z(d\alpha d\alpha')$$

Que traducido a R -s [es una representación, así que \vec{L} lo cumple]

$$\left[I + \frac{i}{\hbar} d\alpha' L_y \right] \left[I - \frac{i}{\hbar} d\alpha L_x \right] \left[I - \frac{i}{\hbar} d\alpha' L_y \right] \left[I + \frac{i}{\hbar} d\alpha L_x \right] = I - \frac{i}{\hbar} d\alpha d\alpha' L_z$$

$$I + \frac{1}{\hbar^2} d\alpha d\alpha' \{ -L_x L_y + L_y L_x \} + \dots = I - \frac{i}{\hbar} d\alpha d\alpha' L_z$$

$$\Rightarrow [L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

Las relaciones de commutación de \vec{L} (su álgebra), se pueden ver como consecuencia de que las rotaciones geométricas no comuten!

⊕ También nos permite obtener las rotaciones finitas. Usando

$$R(\alpha + d\alpha) = R(\alpha) R(d\alpha) \quad [\text{otra vez por ser representación}]$$

tenemos (e.g. $\vec{u} = \vec{k}$):

$$R_z(\alpha + d\alpha) = R_z(\alpha) \left[I - \frac{i}{\hbar} d\alpha L_z \right] \quad [\text{xq } R_z L_z = L_z R_z]$$

$$\frac{R_z(\alpha + d\alpha) - R_z(\alpha)}{d\alpha} = \frac{dR_z(\alpha)}{d\alpha} = -\frac{i}{\hbar} L_z R_z(\alpha)$$

Resolviendo [como todo commuta, es igual que con funciones normales]

$$R_z(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_z} \longrightarrow R_u(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{L} \cdot \vec{u}}$$

Notas:

- Todo esto se puede generalizar a cualquier momento angular \vec{J} , sea $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ o $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$, pero es crucial que sea el momento angular TOTAL (hay que rotar todo el sistema)
- Qué pasa con la rotación $\alpha = 2\pi$, trivial geométricamente?

$$R_z(\alpha=2\pi) = e^{-im2\pi} = \begin{cases} 1 & \text{si } m \text{ es entero} \\ -1 & \text{si } m \text{ es semientero} \end{cases} \quad ?$$

↳ El momento angular orbital se comporta como una rotación también a nivel global, pero el spin semientero no, sólo a nivel local. Veremos más de esto, pero no es ningún problema, porque ya hemos dicho que el spin no tiene analogía clásica.

1.5.3. Rotación de observables

La física no puede cambiar porque cambiamos (rotamos) de coordenadas. En cuántica esto quiere decir que los valores posibles de un observable y sus probabilidades no pueden cambiar:

$$A|\psi\rangle = a_n |\psi\rangle \xrightarrow{R} A'|\psi'\rangle = a_n |\psi'\rangle$$

Como $|\psi'\rangle = R|\psi\rangle$ cambia, A también deberá transformar:

$$A' = R A R^+$$

$$\hookrightarrow A'|\psi'\rangle = (R A R^+) R|\psi\rangle = R A |\psi\rangle = a_n R|\psi\rangle = a_n |\psi'\rangle \quad \checkmark$$

Que si lo aplicamos a rotaciones infinitesimales:

$$A' = \left(I - \frac{i}{\hbar} d\alpha \vec{J} \cdot \vec{u} \right) A \left(I + \frac{i}{\hbar} d\alpha \vec{J} \cdot \vec{u} \right)$$

$$= A - \frac{i}{\hbar} d\alpha [\vec{J} \cdot \vec{u}, A] + \dots$$

Esto nos permite clasificar los observables:

→
NEXT

Obs. Escalares

No transforman bajo rotaciones:

$$S' \stackrel{R}{=} S \Leftrightarrow [\vec{J}, S] = 0$$

Ejemplos: $R^2, P^2, J^2, R.P \dots$ y H (ver luego)

Obs. Vectoriales

Un vector es algo tipo $\vec{V} = (V_x, V_y, V_z)$ que al rotar se transformará a $\vec{V}' = (V'_x, V'_y, V'_z)$. El vector en sí no cambia, pero sus componentes sí porque hemos cambiado los ejes.

Se puede demostrar que cambian como:

$$[V_i, \vec{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} V_k$$

Ejemplos: $\vec{R}, \vec{P}, \vec{L}, \vec{J}, \dots$

Nota: esto viene de que \vec{V} en sí no cambia y sus cambios en las componentes vienen solo del cambio en los ejes.
Por ejemplo, bajo una rotación sobre el eje y:

$$\begin{aligned} e_x' &= e_x + d\alpha e_y \times e_x = e_x - d\alpha e_z \\ \Rightarrow V_{x'} &= \vec{V} \cdot e_x' = \vec{V} \cdot e_x - d\alpha \vec{V} \cdot e_z = V_x - d\alpha V_z \Rightarrow [V_x, J_y] = i\hbar V_z. \end{aligned}$$

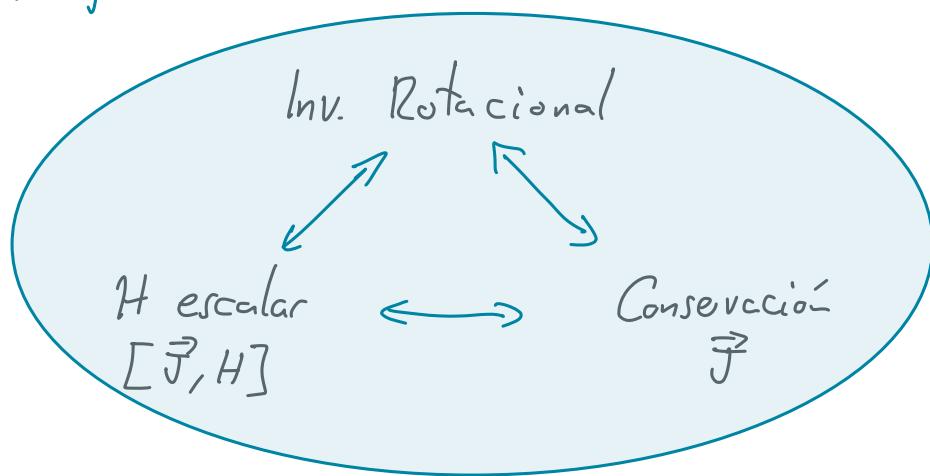
1.5.4 Simetría Rotacional

Las leyes físicas deben ser invariantes bajo rotación de las coordenadas.

- ↳ Las ecuaciones (en particular el H que controla la evolución de todo el sistema) deben ser invariantes.
- ↳ Noether: La magnitud asociada a los generadores de la transf. se conservan: CONSERVACIÓN MOMENTO ANGULAR TOTAL

Nota: La inv. rotacional no es tan obvia y hay que comprobarlo experimentalmente para no llevarse sorpresas, como con la paridad.

Mensaje final:



↳ En sistemas aislados, con \vec{J} su momento angular total.

TEMA 2: POTENCIAS CENTRALES. ÁTOMO H

OUTLINE:

2.1. MOTIVACIÓN

Importancia de los potenciales centrales y átomo H.

2.2. SISTEMAS DE 2 PARTÍCULAS QUE INTERACTÚAN

Planteamiento. Reducción del problema a CM + movimiento relativo. Versión Clásica y Cuántica.

2.3. POTENCIAS CENTRALES

Separación de variables versión Clásica y Cuántica.
Ecuación radial con V_{eff}

2.4. ÁTOMO DE HIDRÓGENO

Motivación. Historia y modelos de Bohr. Planteamiento MC.
Ecuación radial, solución y cuantización En.
Discusión de los resultados y de las f.d.o.

2.5. APLICACIONES Y MEJORAS AL MODELO DEL ÁTOMO H

Sistemas hidrogenoides y átomos multielectrónicos.
Correcciones relativistas y magnéticas (spin)

2.1. MOTIVACIÓN

En el Tema 1 hemos visto la definición, propiedades e importancia del momento angular en MC. En este tema vamos a insistir un poco más en su importancia aplicándolo a problemas de potenciales centrales, cuyo ejemplo estrella será el átomo de Hidrógeno.

Veremos que todo lo aprendido sobre los autoestados de L^2 y L_z simplificarán muchísimo nuestra vida. La clave será que los autoestados de L^2 y L_z , o sea los Y_e^m , describirán por completo la dependencia angular, lo que reducirá nuestro problema 3D a un problema 1D en la variable r .

Pero, por qué insistir tanto en potenciales centrales, es decir, potenciales que cumplan $V(\vec{r}) = V(r)$? Por un lado, porque hay un montón de problemas en física que son de este tipo, como los pot. de Newton o Coulomb. Pero es más, vamos a ver que la parte interesante, con chicha física, de cualquier sistema de dos cuerpos con una interacción que dependa de la posición relativa $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, que son muchos, al final se reduce a un potencial central.

Por otro lado, porque un pot. central $V(r)$ tiene simetría rotacional, y como hemos visto esto implica la conservación de \vec{L} . Por tanto, es el contexto perfecto para poner en práctica todo lo aprendido en el Tema 1.

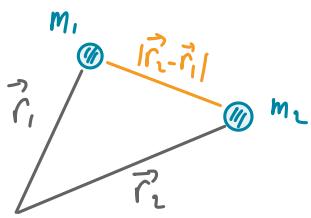
Con esto en mente, éste será nuestra ruta:

2.2. Sistemas de 2 partículas que interactúan.

2.3. Potenciales Centrales

2.4. Atomo de Hidrógeno.

2.2. SISTEMA DE 2 PARTÍCULAS QUE INTERACTUAN



Consideremos un sistema compuesto de dos partículas con masas m_1 y m_2 , y cuya interacción depende sólo de sus posiciones relativas:

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Esto tiene sentido que sea así en un sistema aislado, en la que no hay fuerzas externas. Vamos a ver que la parte interesante de un problema así se reduce al de una partícula en un potencial central $V(r)$. Lo veremos primero clásicamente y luego en MC.

2.2.1. Versión Clásica

El Lagrangiano de nuestro problema será:

$$L = T - V = \frac{1}{2}m_1\dot{|\vec{r}_1|}^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{|\vec{r}_2|}^2 - V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

El truco está en separar el problema en el movimiento del CM más el movimiento relativo de las dos partículas. Para ello definimos:

$$\vec{r}_{CM} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad [\text{posición de CM}]$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad [\text{posición relativa}]$$

Y además:

$$M = m_1 + m_2 \quad [\text{Masa total}]$$

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad [\text{Masa reducida} \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}]$$

Con estas nuevas variables, el Lagrangiano nos queda [dejar como ejercicio]

$$L = \frac{1}{2} M |\dot{\vec{r}}_{CM}|^2 + \frac{1}{2} \mu |\dot{\vec{r}}|^2 - V(\vec{r})$$

Hemos separado el problema en dos, como queríamos.

Para interpretarlo mejor, y para conectar luego con MC, calculamos su Hamiltoniano. Los momentos conjugados:

$$\vec{P}_{CM} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_{CM}} = M \dot{\vec{r}}_{CM} = m_1 \dot{\vec{r}}_1 + m_2 \dot{\vec{r}}_2 = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad [\text{Memento total}]$$

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = \mu \dot{\vec{r}} = \frac{m_2 \vec{p}_2 - m_1 \vec{p}_1}{m_1 + m_2} \quad [\text{Memento relativo}]$$

$$H = T + V = \frac{|\vec{P}_{CM}|^2}{2M} + \frac{|\vec{p}|^2}{2\mu} + V(\vec{r})$$

Y sus ecuaciones de movimiento:

$$\ddot{\vec{P}}_{CM} = - \frac{\partial L}{\partial \vec{r}_{CM}} = 0 \quad [\text{Ec. Partícula Libre}]$$

$$\ddot{\vec{p}} = - \frac{\partial L}{\partial \vec{r}} = - \vec{\nabla} V(r) \quad [\text{Ec. Partícula en potencial } V(r)]$$

Vemos que hemos separado el problema en dos.

- El CM se comporta como una partícula libre (al ser un sist. aislado), así que su dinámica será aburrida y nos olvidamos de ella.

$$H_{CM} = \frac{|\vec{p}_{CM}|^2}{2M}$$

- La chicha estará en la otra parte, que describe una partícula (ficticia de masa μ) en un potencial $V(\vec{r})$.

$$H_{rel} = \frac{|\vec{p}|^2}{2\mu} + V(\vec{r})$$

Nota: Hemos asumido que $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ depende de la posición relativa, pero no tiene por qué ser central para que todo esto aplique. Obviamente el caso de potencial central $V(\vec{r}) = V(r)$, que será el que nos interese, es un caso particular.

2.2.1. Versión Cuántica

En MC tenemos que tener cuidado porque ahora tenemos operadores que no siempre commutan, así que en general las cosas se complican. Por suerte, en este caso todo sale igual que en la versión clásica:

Partimos del Hamiltoniano:

$$H = \frac{\vec{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{P}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

[Igual que antes pero ahora r, p son operadores, $[r_{ai}, p_{bj}] = i\hbar \delta_{ij} \delta_{ab}$]

Definimos las variables CM y relativa:

$$\vec{r}_{CM} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} ; \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

$$\vec{p}_{CM} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 ; \quad \vec{p} = \frac{m_1 \vec{p}_1 - m_2 \vec{p}_2}{m_1 + m_2}$$

Y obtenemos la misma separación que antes:

$$H = H_{CM} + H_{rel} , \quad H_{CM} = \frac{\vec{p}_{CM}^2}{2M} ; \quad H_{rel} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$$

Y lo que es más importante, las nuevas variables CM y rel
commutan y cumplen los commutadores canónicos:

$$[r_{CMi}, p_{CMj}] = i\hbar \delta_{ij} ; \quad [r_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

↳ Podemos interpretar estas nuevas variables como observables de CM y posición/momento relativo.

Por tanto, las dos partes de H commutaran

$$[H_{CM}, H_{rel}] = 0$$

y podremos buscar soluciones formadas por productos vectoriales de cada espacio:

$$|\Psi\rangle = |\Psi_{CM}\rangle \otimes |\Psi_{rel}\rangle \quad \text{con} \quad \begin{cases} H_{CM} |\Psi_{CM}\rangle = E_{CM} |\Psi_{CM}\rangle \\ H_{rel} |\Psi_{rel}\rangle = E_{rel} |\Psi_{rel}\rangle \end{cases}$$

Que serán soluciones al H total:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad \text{con} \quad E = E_{CM} + E_{rel}.$$

Mensaje Final. Igual que en la versión clásica, hemos separado el problema en el CM con una vida aburrida, y una parte relativa más interesante, con una partícula de masas m moviéndose en un potencial $V(\vec{r})$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

Que es lo que trataremos de resolver a partir de ahora.

Nota: Se puede demostrar que esta separación CM+rel también aplica al momento angular, de forma que lo que nos interesa es de nuevo el relativo $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.

2.3. POTENCIALES CENTRALES

Ahora que hemos visto que cualquier problema de dos cuerpos (con interacción dependiente de la posición relativa) se puede reducir al caso de una partícula en un potencial $V(\vec{r})$, vamos a ver qué ocurre cuando este potencial es central, es decir, depende sólo de la distancia relativa entre las dos partículas.

$$V(\vec{r}) = V(r)$$

que es lo que ocurre en muchos casos reales.

La consecuencia más importante es que tendremos invariancia rotacional y por tanto, como veímos en el Tema L, el momento angular \vec{L} se conservará.

Veamos las implicaciones primero en mecánica clásica y luego en cuántica.

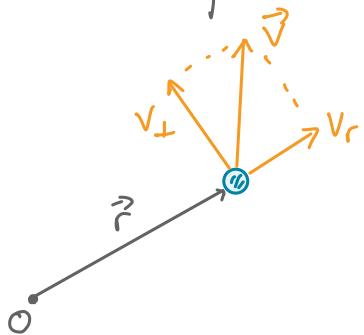
2.3.1. Versión Clásica

Como siempre, nuestro objetivo será estudiar el Lagrangiano: para distinguirlo de L .

$$L = T - V = \frac{1}{2} \mu |\vec{v}|^2 - V(r)$$

Como sabemos que \vec{L} se conserva en este caso, estaremos bien reescribir el Lagrangiano en su función.

Esto lo podemos hacer separando la velocidad en su componente radial y tangencial:



$$v^2 = v_r^2 + v_{\perp}^2$$

$$|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = \mu r v_{\perp} \Rightarrow v_{\perp}^2 = \frac{\ell^2}{\mu^2 r^2}$$

$$\Rightarrow \ell = \frac{1}{2} \mu v_r^2 + \frac{\ell^2}{2 \mu r^2} - V(r)$$

Y de aquí obtenemos el Hamiltoniano:

$$H = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\ell^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

Notas:

- El primer término es simplemente la energía cinética correspondiente al momento radial $p_r = \mu v_r$.
- Las variables angulares están escondidas en

$$\ell^2 = p_{\phi}^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} p_{\theta}^2$$

pero como ℓ^2 es una magnitud conservada, el Hamiltoniano de arriba sólo depende de r . De hecho, podemos escribir

$$H = \frac{p_r^2}{2\mu} + V_{\text{eff}}(r)$$

donde

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\ell^2}{2\mu r^2}$$

- La parte nueva es siempre positiva, por lo que la fuerza asociada es siempre hacia fuera

$$\vec{F}_\ell = -\vec{\nabla} \left(\frac{\ell^2}{2\mu r^2} \right) = \frac{\ell^2}{\mu r^3} \hat{r} \quad [\text{hacia fuera}]$$

Por eso se le llama potencial o barrera centrífuga. Una forma de verlo es que, cuanto mayor ℓ^2 , más rápido gira y más fuerte centrífuga siente.

2.3.2 Versión Cuántica

En cuántica ocurrirá exactamente lo mismo. Primero, al tener un pot. central $V(\vec{r}) = V(r)$, el Hamiltoniano será escalar

$$[H, \vec{L}] = 0$$

y por tanto \vec{L} será un constante del movimiento. Además, podremos encontrar una base común para H , \vec{L}^2 y L_z .

Segundo, el Hamiltoniano también se podrá escribir igual que en la versión clásica. Para ello simplemente escribimos el Laplaciano que aparece en H :

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2\mu} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r)$$

en coordenadas esféricas:

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

También se puede escribir como $\frac{1}{r^2} \partial_r(r^2 \partial_r)$ ↳ reconocemos L^2 del Tema 1

Como vimos, toda la parte angular viene dada por L^2 , de forma que

$$H = -\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)$$

Separación de Variables

Igual que en el caso clásico, tenemos una ecuación puramente radial. Toda la dependencia angular está en el operador L^2 , pero ya conocemos sus autoestados: los armónicos esféricos $Y_l^m(\theta, \phi)$. De forma que podemos escribir los autoestados del Hamiltoniano como:

$$\varphi(\vec{r}) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

De esta forma, obtenemos automáticamente autoestados de L^2 y L_z ,

$$L^2 \varphi(\vec{r}) = l(l+1)\hbar^2 \varphi(\vec{r})$$

$$L_z \varphi(\vec{r}) = m\hbar \varphi(\vec{r})$$

Que, como $[H, \vec{L}] = 0$, también serán autoestados de H si

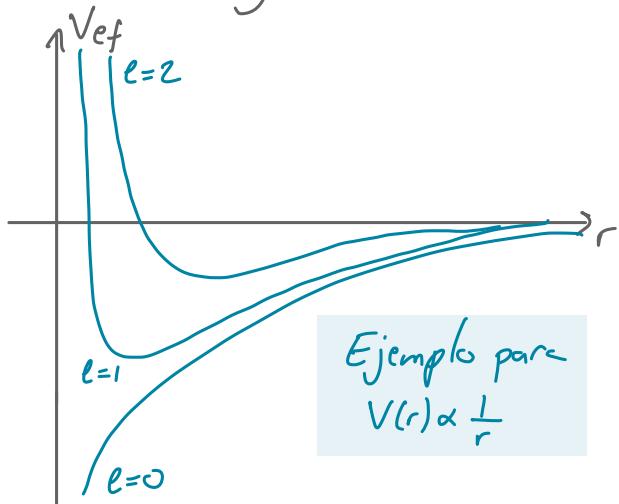
$$H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$$

Que se traduce a la siguiente ecuación radial:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{e(e+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r)$$

Notas:

- Usando lo que sabíamos de \vec{L} , hemos reducido de un plumazo la ecuación de Schrödinger de 3D a una puramente radial en 1D.
- La ecuación depende de l pero no de m . Para cada l tenemos una ecuación distinta con un potencial efectivo y una barrera centrífuga distinta:



Para cada l , tendremos varios autoestados que marcaremos con el número cuántico K , que será discreto o continuo según el problema (según $V(r)$).

De esta forma, los números cuánticos de la ecuación radial serán:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{\ell\mu}(r) = E_{\ell\mu} R_{\ell\mu}(r)$$

→ Mencionarlo de pasada, más en problemas.

- [Opcional] Para una partícula libre, $V(r)=0$, obtenemos la ecuación diferencial de Bessel, cuya solución nos da las ondas esféricas

$$\Psi(\vec{r}) = C_e j_\ell(kr) Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

↳ Funciones esféricas de Bessel.

- La parte de la derivada es horrible. Podemos simplificarla definiendo:

$$R_{\ell\mu}(r) = \frac{1}{r} u_{\ell\mu}(r)$$

y nos queda:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{\ell\mu}(r) = E_{\ell\mu} u_{\ell\mu}(r)$$

- Esta $u_{\ell\mu}(r)$ nos da la probabilidad de encontrar la partícula en el intervalo $(r, r+dr)$:

$$P_r(r) = r^2 |R_{\ell\mu}(r)|^2 = |u_{\ell\mu}(r)|^2 \rightarrow \text{densidad de prob. radial}$$

↳ esto viene del $r^2 dr |R|^2 = dr |u|^2 = 1$.

- Vemos que todas estas ecuaciones pueden ser problemáticas en el origen $r=0$. Para evitarlo, necesitamos que se anule cuando $r \rightarrow 0$.

$$u_{ke}(0) = 0$$

Es decir, que para $r \rightarrow 0$ tendremos que u irá con algune potencia de r :

$$u_{ke}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} c r^\alpha$$

El valor de α lo podemos sacar pidiendo que la ecuación radial se comporte bien:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\alpha(\alpha-1)}{r^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] r^\alpha = E r^\alpha$$

[asumiendo que $V(r)$ no es más singular que $1/r^2$, $r^2 V \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$]:

$$\alpha(\alpha-1) = l(l+1) \Rightarrow \begin{cases} \alpha = l+1 \Rightarrow u_{ke} \sim r^{l+1} \Rightarrow R_{ke} \sim r^l \\ \alpha = -l \Rightarrow u_{ke} \sim 1/r^l \text{ [No renormalizable]} \end{cases}$$

Para cualquier potencial central (no demasiado singular), los autoestados en el origen se comportarán como

$$R_{ke}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^l$$

↳ Lo veremos luego para buscar las soluciones del átomo de hidrógeno.

2.3.3. Resumen de lo aprendido.

Para una partícula de masa μ en un potencial central $V(r)$:

- Podemos encontrar una base común de autoestados de H , L^2 y L_z . Además estos forman un CCO con números cuánticos radial K , acimutal ℓ y magnético m . [mencionar los nombres muy de pasada]

$$\begin{aligned} H\psi_{K\ell m}(\vec{r}) &= E_{K\ell m}\psi_{K\ell m}(\vec{r}) \\ L^2\psi_{K\ell m}(\vec{r}) &= \ell(\ell+1)\hbar^2\psi_{K\ell m}(\vec{r}) \\ L_z\psi_{K\ell m}(\vec{r}) &= m\hbar\psi_{K\ell m}(\vec{r}) \end{aligned}$$

$\leftarrow E \neq E(m)$, todos los m degenerados

- Podemos separar las variables radial y angulares:

$$\psi_{K\ell m}(\vec{r}) = R_{K\ell}(r) Y_\ell^m(\theta, \phi) = \frac{1}{r} u_{K\ell}(r) Y_\ell^m(\theta, \phi)$$

$$\text{Normalización: } \int d^3r |\psi_{K\ell m}|^2 = \int r^2 dr |R_{K\ell}|^2 \int d\Omega |Y_\ell^m|^2 = 1$$

- La función radial $u_{K\ell}(r)$ dependerá del problema concreto, de cuál es $V(r)$, y la obtendremos de resolver:

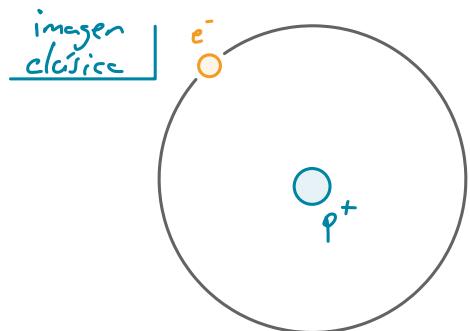
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{K\ell}(r) = E_{K\ell} u_{K\ell}(r)$$

$$u_{K\ell}(0) = 0 \Rightarrow u_{K\ell} \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{\ell+1}$$

\hookrightarrow o las equivalentes para $R_{K\ell}(r)$.

2.3. El Átomo de Hidrógeno

El átomo de hidrógeno es uno de los ejemplos más simples que podemos estudiar de una partícula en un potencial central, pero también es de los más importantes. Estamos hablando de estudiar el elemento más simple de la tabla periódica, pero también el más abundante en el Universo ($\sim 75\%$ de la materia visible). Es fundamental en nuestra propia composición ($\sim 10\%$) y el combustible de las estrellas como el sol.



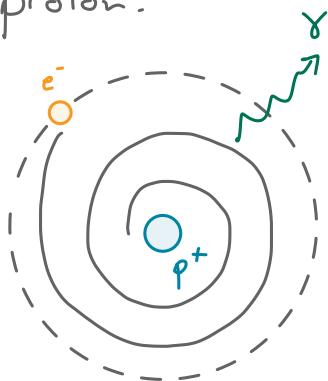
$$\left. \begin{array}{l} m_p \approx 1.7 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \approx 938 \text{ MeV}/c^2 \\ m_e \approx 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \approx 0.51 \text{ MeV}/c^2 \end{array} \right\} \frac{m_e}{m_p} \approx 1840$$
$$q_p = -q_e = q \approx 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Comments:

- Tenemos un electrón unas 2000 veces más ligero que el protón moviéndose alrededor de este.
- Las cargas son exactamente iguales [why? no tendrían porque, aunque en QFT lo entendemos por cancelación de anomalías, i.e. consistencia de una teoría cuántica] de manera que el átomo es neutro.

Intro Histórico

Clásicamente, estamos tentados a copiar el modelo planetario, con el electrón dibujando órbitas alrededor del protón.



Tiene el pequeño problema de ser inestable, ya que una carga acelerada emite energía. El átomo se iría desintegrando emitiendo un espectro continuo (todas las frecuencias) de luz.

Pero el átomo no sólo no desaparece, sino que encima, al excitarlo, emite sólo en ciertas frecuencias. Tiene un espectro continuo.

Bohr dio una solución postulando que el momento angular estaba cuantizado. En concreto, sólo estarían permitidas aquellas órbitas circulares cuyo momento angular fuese un múltiplo de \hbar :

$$L = mvr \equiv n\hbar \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Esta condición nos lleva a la cuantización de los niveles de energía (explicando el espectro discreto) y del radio de las órbitas (dando un modelo tipo de capas)

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}$$

$$r_n = n^2 r_B$$

↳ Negativo por ser un estado ligado.

Donde hemos definido:

$$E_I = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \sim 13.6 \text{ eV} \quad [\text{energía de ionización, la necesaria para extraer un electrón desde su estado fundamental}]$$

$$r_B = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \sim 0.5 \text{ Å} \quad [\text{radio de Bohr, escala atómica característica}]$$

Este modelo funciona muy bien experimentalmente (por ejemplo, el espectro discreto sigue el patrón $1/n^2$, la fórmula de Rydberg). Sin embargo, es un modelo donde el electrón sigue trayectorias deterministas, y sabemos que a la cuántica no le gusta esto... Además, la cuantización la pone a huevo, no es como la cuantización de \vec{p} que nos ha salido en el Tema 1 como consecuencia de otros postulados más simples.

Nuestro objetivo de este tema va a ser resolver el átomo de hidrógeno siguiendo la MC y, con suerte, recuperaremos el modelo de Bohr en algún sentido. ↓ porque funciona

2.3.1. La Ecación Radial del Átomo H

Antes hemos visto que el movimiento de un sistema de dos partículas se podía reducir al del CM y el relativo. En este caso, como $m_p \gg m_e$, el CM es básicamente el protón y el relativo el electrón:

$$M = m_p + m_e \approx m_p \quad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$$

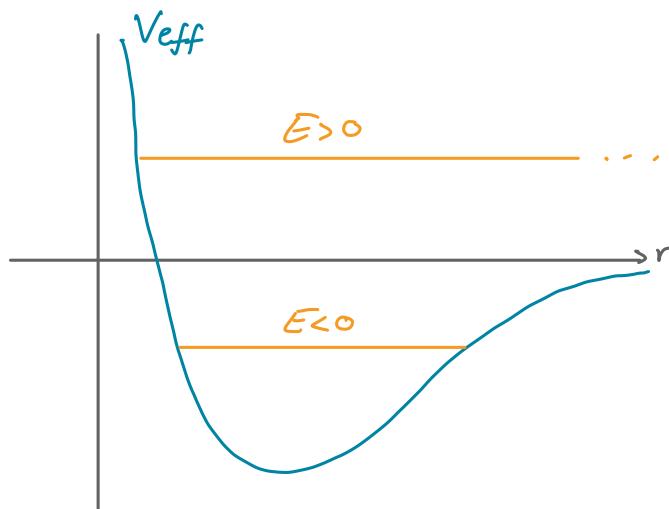
También hemos visto que las soluciones se podían escribir como

$$\Psi_{Kem}(\vec{r}) = R_{Ke}(r) Y_e^m(\theta, \phi) = \frac{1}{r} u_{Ke}(r) Y_e^m(\theta, \phi)$$

Y que lo único que nos quede por hacer es resolver la ecuación radial en cada problema. Esta depende de la forma exacta del potencial, que en el caso del átomo de hidrógeno será el de Coulomb:

$$V(r) = \frac{-\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}}{\frac{1}{2}mu^2} = -\frac{e^2}{r}$$

$$\Rightarrow \left[\frac{-\frac{t^2}{2u}}{\frac{d^2}{dr^2}} + \frac{e(l+1)t^2}{2ur^2} - \frac{e^2}{r} \right] u_{Ke}(r) = E_{Ke} u_{Ke}(r)$$



Tenemos un V_{eff} que para $E > 0$ tendrá partículas libres, con un espectro continuo de energía. Para $E < 0$, tendremos estados ligados, configurados, que es lo que nos interesa. Y veremos que estos $E < 0$ están cuantizadas.

2.3.2. Resolución de la Ecuación Radial

En esta parte vienen muchas mates y es un poco denso. Vamos a intentar quitarnos todo del tirón hasta las soluciones y luego dedicaremos tiempo a discutirlas.

Cambio de variables

Empezamos poniendo la ecuación radial en variables adimensionales utilizando las cantidades del modelo de Bohr, que ya hemos dicho que serán las características del átomo:

$$\rho \equiv r/r_B \quad , \quad \lambda_{\text{ue}}^2 = - \frac{E_{\text{ue}}}{E_I}$$

$$(\dots) \Rightarrow \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{\text{ue}}^2 \right] u_{\text{ue}}(\rho) = 0$$

Hemos simplificado la ecuación quitando todos los factores, señal de que trabajamos en las unidades adecuadas.

Comportamientos asintóticos

La ecuación luce complicada, así que sus soluciones también lo serán, pero podemos sacar algo de información mirando los límites a ρ muy pequeño y muy grande.

Por un lado, ya hemos visto en la sección anterior que las soluciones a un potencial central siempre tienen el mismo comportamiento cerca del origen

$$u_{ke} \xrightarrow{r \rightarrow 0} \rho^{l+1}$$

Por otro lado, en el límite $\rho \rightarrow \infty$, la ecuación radial se puede aproximar por:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda_{ke}^2 \right] u_{ke} \approx 0 \Rightarrow u_{ke} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A e^{-\rho \lambda_{ke}} + B e^{+\rho \lambda_{ke}}$$

Aquí la solución $e^{+\rho \lambda}$ es problemática porque no es normalizable, así que nos quedamos con $e^{-\rho \lambda}$.

Juntando los dos límites, podemos probar el siguiente ansatz:

$$u_{ke}(\rho) = e^{-\rho \lambda_{ke}} \rho^{l+1} y_{ke}(\rho)$$

Substituyendo en la ecuación radial, obtenemos una nueva ecuación para $y_{ke}(r)$:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + 2 \left(\frac{l+1}{\rho} - \lambda_{ke} \right) \frac{d}{d\rho} - 2 \frac{\lambda(l+1) - L}{\rho} \right] y_{ke}(\rho) = 0$$

Demostración siguiente página, aunque no la haré en clase.

Sale más fácil si lo hacemos en trozos. Primero

$$u(\rho) = e^{-\lambda\rho} h(\rho)$$

$$\frac{du}{d\rho} = -\lambda u + e^{-\lambda\rho} \frac{dh}{d\rho}$$

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = -\lambda \left[-\lambda u + e^{-\lambda\rho} \frac{dh}{d\rho} \right] - \lambda e^{-\lambda\rho} \frac{dh}{d\rho} + e^{-\lambda\rho} \frac{d^2 h}{d\rho^2} = \lambda^2 u - 2\lambda e^{-\lambda\rho} \frac{dh}{d\rho} + e^{-\lambda\rho} \frac{d^2 h}{d\rho^2}$$

Lo metemos en $\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda^2 \right] u = 0$

$$\Rightarrow \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda \frac{1}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} \right] h = 0$$

Segundo paso: $h(\rho) = \rho^{\ell+1} y(\rho)$

$$\frac{dh}{d\rho} = (\ell+1)\rho^\ell y + \rho^{\ell+1} \frac{dy}{d\rho} = \rho^{\ell+1} \left[\frac{dy}{d\rho} + \frac{(\ell+1)}{\rho} y \right]$$

$$\frac{d^2 h}{d\rho^2} = \ell(\ell+1)\rho^{\ell-1}y + 2(\ell+1)\rho^\ell \frac{dy}{d\rho} + \rho^{\ell+1} \frac{d^2 y}{d\rho^2} = \rho^{\ell+1} \left[\frac{d^2 y}{d\rho^2} + \frac{2(\ell+1)}{\rho} \frac{dy}{d\rho} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} y \right]$$

$$\Rightarrow \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + 2 \left(\frac{\ell+1}{\rho} - \lambda \right) - 2 \frac{\lambda(\ell+1)-\ell}{\rho} \right] y = 0$$

Y como no tenemos ni idea de como será la función intermedia $y_{KE}(r)$, la parametrizamos como una serie (tipo Taylor, por ejemplo, en ese caso los coef. serían las derivadas).

$$y_{KE}(r) = \sum_{q=0}^{\infty} c_q r^q$$

[Aquí realmente los c_q dependerán de KE , pero no lo ponemos por no liar más la notación]

Todo lo que nos queda por hacer ahora es substituir esta forma en la ecuación radial y pedir que la cumpla.

$$\frac{dy}{dr} = \sum_{q=0}^{\infty} q c_q r^{q-1} \quad ; \quad \frac{d^2y}{dr^2} = \sum_{q=0}^{\infty} q(q-1) c_q r^{q-2}$$

$$\Rightarrow \sum_{q=0}^{\infty} c_q \left\{ \left[q(q-1) + 2q(\ell+1) \right] r^{q-2} - 2[\lambda q + \lambda(\ell+1) - L] r^{q-1} \right\} = 0$$

Tenemos la suma de dos series, una con r^{q-2} y otra con r^{q-1} . Manipulamos la primera para escribirla también como r^{q-1} . El truco está en que el orden $q=0$ se anula:

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_{q=1}^{\infty} c_q [q(q+2\ell+1)] r^{q-2} \quad [\text{hemos quitado } q=0 \text{ y reorganizado}] \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} c_{p+1} [(p+1)(p+2\ell+2)] r^{p-1} \quad [\text{cambiado } q \rightarrow p+1] \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} c_{q+1} [(q+1)(q+2\ell+2)] r^{q-1} \quad [\text{cambiado } p \rightarrow q] \end{aligned}$$

Volvemos a la suma $S_1 + S_2 = 0$

$$\sum_{q=0}^{\infty} \rho^{q-1} \left\{ \left[(q+1)(q+2\ell+2) \right] C_{q+1} - 2 \left[\lambda(q+\ell+1) - 1 \right] C_q \right\} = 0$$

Para anularlo deben anularse todos los órdenes de ρ^{q-1} , o sea el parentesis. Esto nos da una regla de recurrencia:

$$C_{q+1} = \frac{2[\lambda(q+\ell+1)-1]}{(q+1)(q+2\ell+2)} C_q$$

Tenemos una solución a la ecuación radial, dada como una serie:

$$u_{ke}(\rho) = e^{-\lambda \rho} \rho^{\ell+1} \sum_{q=0}^{\infty} C_q \rho^q$$

donde cada C_q se saca de manera recursiva de los anteriores (y C_0 lo fijamos normalizando).

Pero...

Mirándolo mejor, podemos ver que esta solución tiene un problema, en concreto cuando $\rho \rightarrow \infty$. Para valores grandes, la suma estará dominada por los q altos, pero si nos fijamos en su relación de recurrencia:

$$\frac{C_{q+1}}{C_q} \xrightarrow{q \rightarrow \infty} \frac{2\lambda}{q} \Rightarrow u_{ke}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum_q \frac{(2\lambda)^q}{q!} \approx e^{2\lambda\rho}$$

Esta serie infinita se comporta como una exponencial positiva para $\rho \rightarrow \infty$, jodiéndonos nuestra solución para nuestros estados ligados.

Solución: truncar la serie, cuantización

Hemos visto que el problema viene de que a $\rho \rightarrow \infty$ los términos de q grande dominan, así que tenemos que matarlos. Para que la solución sea física, válida para describir un estado ligado, necesitamos que a cierto valor $q=k$ el coeficiente c_{k+l} asociado se anule. A partir de aquí, la relación de recurrencia se encargará de matar el resto de términos superiores, de forma que $y_{k+l}(\rho)$ será simplemente un polinomio, y se comportará bien gracias al exponente negativo que tiene delante.

Entonces, mirando la relación de recurrencia, vemos que es posible anular el orden c_{k+l} si:

$$\lambda_{ke}(k+l+1) - 1 = 0 \Rightarrow \frac{1}{\lambda_{ke}} = k+l+1 \quad \# \text{ Entero!!!}$$

Obtenemos que λ_{ke} no puede obtener cualquier valor, sino que está cuantizado. Y recordando que $\lambda_{ke} = -E_{ke}/E_I$,

$$E_{ke} = -\frac{E_I}{(k+l+1)^2} = -\frac{E_I}{n^2}$$

Los niveles de energía están cuantizados!!! Además siguen la fórmula de Rydberg ($\sim 1/n^2$), donde hemos definido el número cuántico principal como

$$n = k+l \quad , \quad k=1,2,3\dots$$

↳ Absorvemos el $k+1 \rightarrow k$ haciendo que k empiece en 1.

2.3.3. Solución Completa de los Autoestados

Juntando todo, tenemos que la solución completa a los autoestados del átomo de hidrógeno serán:

$$\Psi_{nem} = R_{ne}(r) Y_e^m(\theta, \varphi)$$

con la función radial hemos visto que viene dada por un polinomio (multiplicado por una exp y un r^ℓ). Este polinomio lo podemos sacar a partir de la fórmula de recurrencia, pero resulta que es un polinomio conocido: los polinomios asociados de Laguerre:

$$L_N^{(e)}(x) \equiv x^{-e} \frac{e^x}{N!} \frac{d^N}{dx^N} (e^{-x} x^{N+e})$$

Con esto, al final obtenemos,

$$R_{ne}(r) = A_{ne} e^{-\frac{r}{nr_B}} \left(\frac{r}{r_B}\right)^e L_{n-e-2}^{2e+1} \left(\frac{2r}{nr_B}\right)$$

con las constantes de normalización:

$$A_{ne} = \frac{2^{e+1}}{n^{e+2} (r_B)^{3/2}} \sqrt{\frac{(n-e-1)!}{(n+e)!}}$$

Ejemplos:

$$R_{10}(r) = \frac{2}{r_B^{3/2}} e^{-r/r_B}$$

$$R_{20}(r) = \frac{2}{(2r_B)^{3/2}} e^{-r/2r_B} \left(1 - \frac{r}{2r_B}\right)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}(2r_B)^{3/2}} e^{-r/2r_B} \frac{r}{r_B}$$

[No sé si merece
dorlos ahora y/o
más tarde al contar
cómo son las distribuciones]

2.3.4. Interpretación de los Resultados

Después de toda esta traza matemática para obtener las soluciones, vamos a ver qué náices hemos obtenido.

2.3.4.1. Números Cuánticos del Atómico de Hidrógeno

Hemos empezado hablando de los números cuánticos k, l, m , sabiendo que en un potencial central genérico los niveles de energía dependen sólo de k y l . Pero al resolver el potencial de Coulomb, hemos obtenido que los niveles de energía dependen sólo de la suma, así que hemos definido un nuevo número cuántico n :

$$E_{ke} = -\frac{E_I}{(k+l)^2}, \quad k=1, 2, 3, \dots \Rightarrow E_n = -\frac{E_I}{n^2} \quad n=1, 2, 3, \dots$$

Para cada l , hay una correspondencia $k \leftrightarrow n$ siempre que $l=0, 1, \dots, n-1$

Así que a partir de ahora hablaremos de los números cuánticos $\{nlm\}$ para describir los autoestados del atómico de Hidrógeno, que serán autoestados de H , L^2 y L_z :

$$H \Psi_{nlm} = E_n \Psi_{nlm}$$

$$L^2 \Psi_{nlm} = l(l+1) \hbar^2 \Psi_{nlm}$$

$$L_z \Psi_{nlm} = m \hbar \Psi_{nlm}$$

Estos números cuánticos reciben nombres especiales:
[ya lo hemos mencionado, pero lo repito]

Número cuántico principal: $n = 1, 2, 3, \dots$

Número cuántico acimutal: $\ell = 0, 1, \dots, n-1$ [n valores]

Número cuántico magnético: $m = -\ell, -(\ell-1), \dots, \ell-1, \ell$ [2 $\ell+1$ valores]

2.3.4.2. Niveles de Energía y Degeneraciones

Aunque necesitamos 3 números cuánticos para definir por completo un autoestado del átomo de hidrógeno, su energía depende únicamente de n :

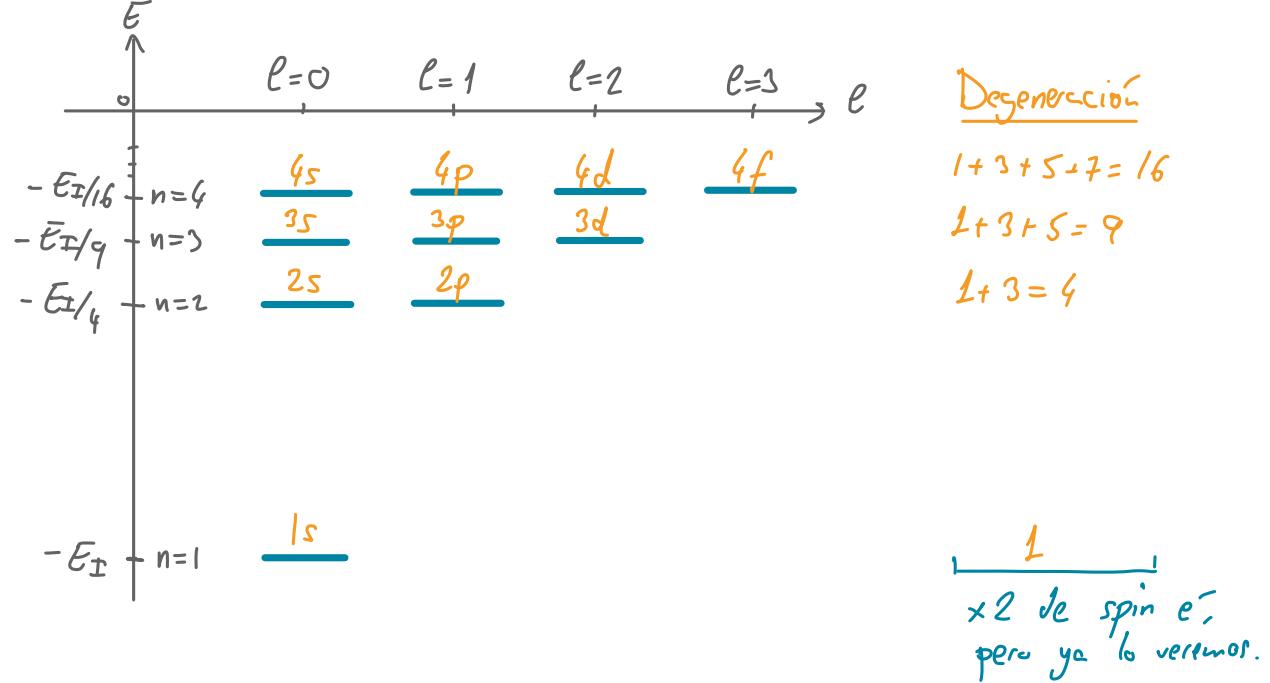
$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}$$

Esto quiere decir que habrá muchos estados degenerados. En concreto, para cada n tendremos:

$$g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n = n^2$$

Entonces decimos que n define la capa electrónica, cada una de ellas con una energía En concreta pero con una degeneración de n^2 .

Esquemáticamente:



Notación Espectroscópica

Por razones históricas de cuando se observaban y clasificaban líneas espectrales, se usa la llamada notación espectroscópica basada en letras. La MC lo ha mantenido, usando una letra para cada momento angular l :

$$l=0 \leftrightarrow s$$

$$l=1 \leftrightarrow p$$

$$l=2 \leftrightarrow d$$

$$l=3 \leftrightarrow f$$

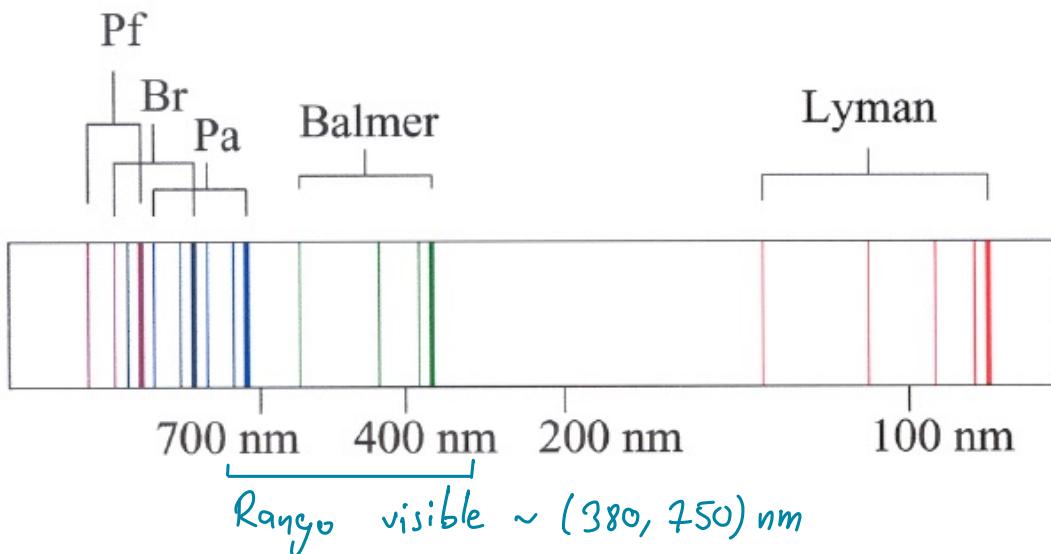
:

orden alfabético

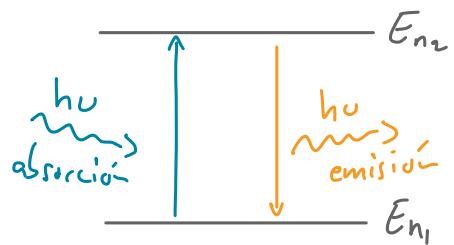
Así que cada subcapa se nombra con una letra.

2.3. 4.3. Líneas Espectrales

Este modelo de capas es capaz de explicar las distintas series de líneas espectrales que se veían experimentalmente.

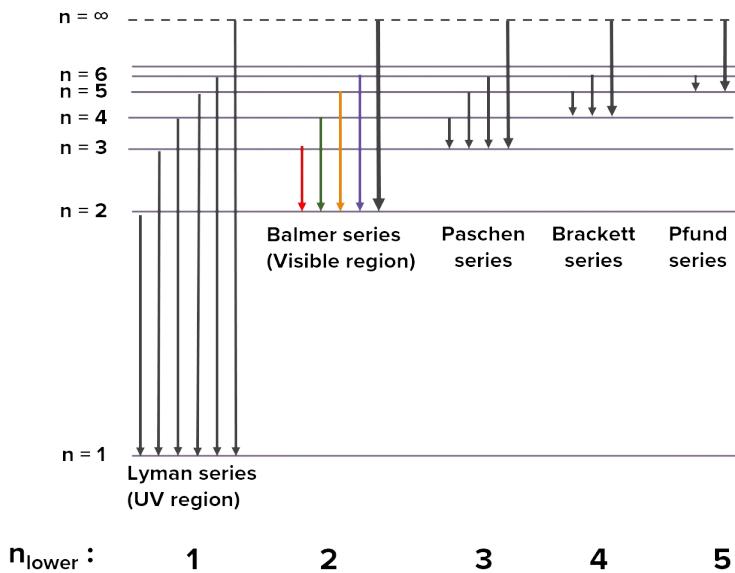


La explicación combina el modelo de capas, la conservación de la energía y la cuantización de la radiación de la luz, en forma de fotones de energía $h\nu$, tal y como lo introdujo Einstein para explicar el efecto fotoeléctrico.



$$h\nu = E_{n_2} - E_{n_1} = -E_I \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{c}{\nu} \quad \text{discreto}$$



De esta forma, cada serie de líneas observadas se explican como transiciones con n_i fijo, de forma que siguen una ley tipo

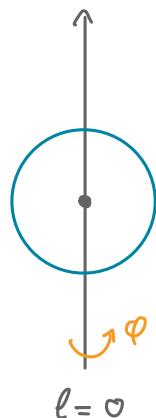
$$U \sim a/n^2 + b$$

Como se observa.

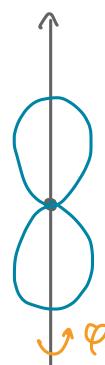
2.3.4.4. Funciones de Onda

Dependencia Angular.

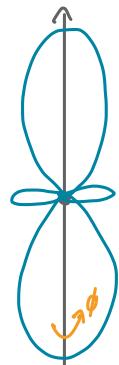
Como ya hemos dicho muchas veces, vendrá determinado por los Y_e^m , como en cualquier potencial central.



$$|Y_0^0|^2 \sim cte$$



$$|Y_1^m|^2 \sim \cos^2\theta$$



$$|Y_2^m|^2 \sim (3\cos^2\theta - 1)^2$$

El módulo se carga el $e^{im\phi}$, así que las prob. son indep de m y ϕ . simetría de revolución sobre eje z.

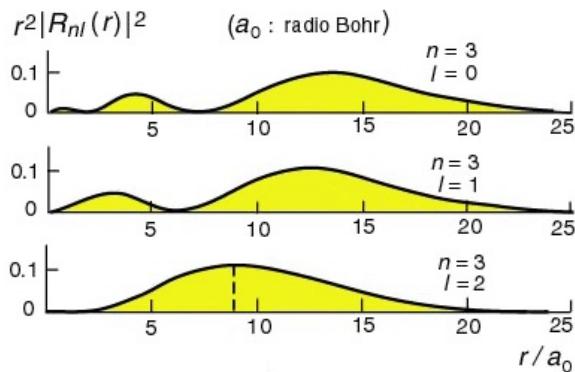
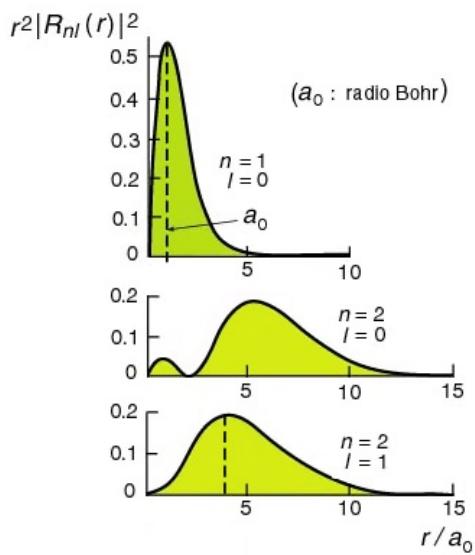
Notas:

- La parte angular de las probabilidades vendrá dada por $|Y_{e^m}|^2$. El módulo se carga el factor $e^{im\phi}$, así que serán indep. de m y ϕ . Tendrán simetría de rotación/revolución sobre el eje z .
- Usando esta simetría, podemos representarlos como una sección paralela al eje z , como en las imágenes de arriba para los l más bajos.
La forma de interpretar estas figuras sería como una función paramétrica en θ , y que lo que pintamos es el tamaño de $|Y_{e^m}|^2$ como distancia respecto el origen.
- Vemos que el $l=0$ es esférico, tiene probabilidad indep de los ángulos (isotrópico), como debe ser porque no tiene momento angular y por tanto tiene que tener simetría esférica (escalar)
Según subimos en l nos van saliendo formas más complejas.

Dependencia Radial

Esto nos vendrá dado por la parte R_{ne}. Recordando que la probabilidad tiene un r² adicional de dr,

$$P_r(r) \sim r^2 |R_{ne}(r)|^2$$



Notar:

- A mayor n, más lejos del centro. Tenemos un modelo de capas.
 - A mayor l, el radio menor probable y menos nodos. De hecho, el número de nodos es:
- $\# \text{ nodos} = n - l - 1 = K - 1$
- Para l=n-1, la capa sin nodos, la probabilidad es máxima en

$$P_r^{l=n-1}|_{\max} = n^2 r_B$$

Que coincide con las órbitas circulares del modelo de Bohr.

[Es curioso que no sea para l=0, que sería circular...]

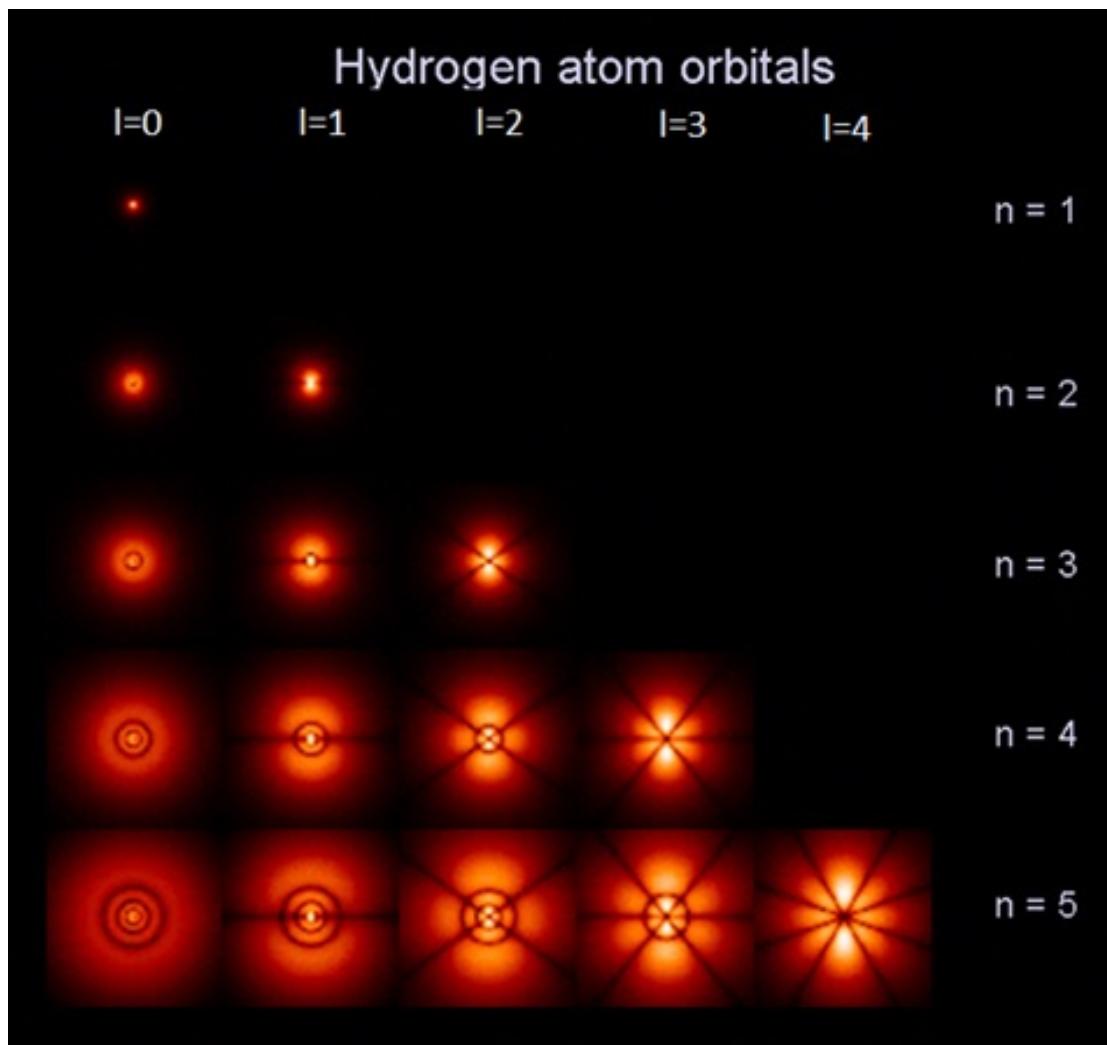
Dependencia Completa

Juntando todo, tendremos que la densidad de prob:

$$P_{nem}(r, \theta, \varphi) = |\Psi_{nem}(\vec{r})|^2 d^3r = |R_{ne}(r)|^2 r^2 dr |Y_e^m(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

Tenemos que multiplicar las dos partes anteriores.

[El resultado mejor que lo saquen de google aunque
puedo intentar dibujar los ls, 2s y 2p]



La forma explícita de los niveles más bajos:

$$1s: \Psi_{100}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_B^3}} e^{-r/r_B}$$

$$2s: \Psi_{200}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi r_B^3}} \left(1 - \frac{r}{2r_B}\right) e^{-r/2r_B}$$

$$2p: \begin{cases} \Psi_{210}(\vec{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi r_B^3}} \frac{r}{r_B} e^{-r/2r_B} \cos\theta \\ \Psi_{21\pm 1}(\vec{r}) = \frac{1}{8\sqrt{2\pi r_B^3}} \frac{r}{r_B} e^{-r/2r_B} \sin\theta e^{\pm i\varphi} \end{cases}$$

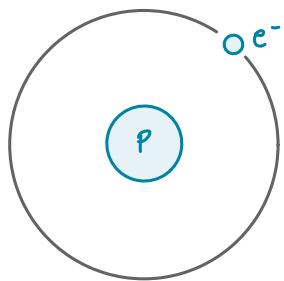
2.5. MÁS ALLÁ DEL ÁTOMO H

Este es una clase extra para transmitir la importancia de los resultados obtenidos, ya que se aplican a muchos sistemas hidrogenoideos, y también para preparar el camino a las correcciones relativistas que veremos más adelante en teoría de perturbaciones.

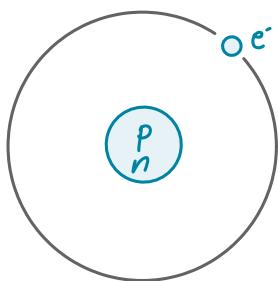
2.5.1. Sistemas Hidrogenoideos

El átomo de hidrógeno es el sistema más simple que podemos resolver, ya que tiene sólo un electrón. Esto es importante en sí mismo, ya que el H es uno de los elementos más importantes en la naturaleza, pero resulta que existen más sistemas con un único electrón para los que podemos reciclar fácilmente nuestros resultados.

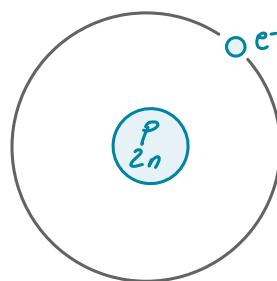
Isoatópos de Hidrógeno



Hidrógeno



Deuterio

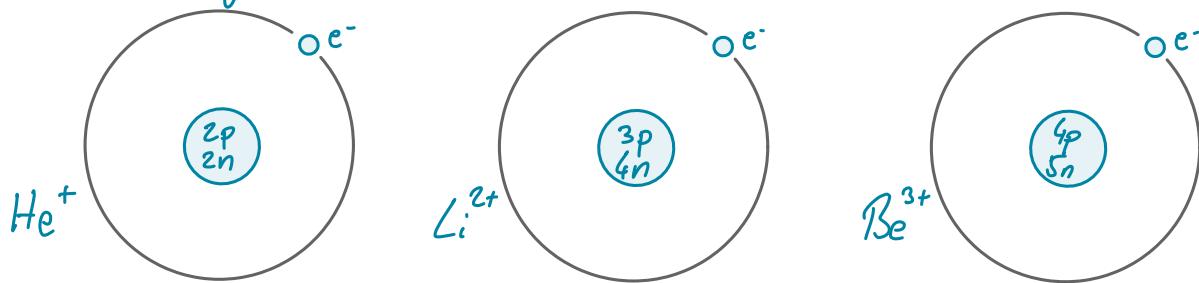


Tritio

[Estable. Agua pesada D_2O] [Inestable: $T \rightarrow ^3He^+ + e^- + \bar{\nu}_e$]

Misma carga, mismo potencial. Sólo cambiará la masa reducida.

Átomos Hidrogenoideos

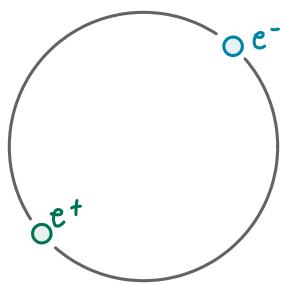


Son los siguientes elementos en la tabla periódica, pero con solo un e^- . Al ser isótopos cargados, tenderán a capturar más e^- .

Los autoestados serán iguales que antes, pero con cambios en la masa reducida y una interacción más intensa:

$$e^2 \longrightarrow Ze^2 \quad [\text{serán átomos más pequeños}]$$

Positronio



Estado ligado de e^- y e^+ . Inestable, se desintegran a fotones $\sim 10^{-7/10}$ segundos

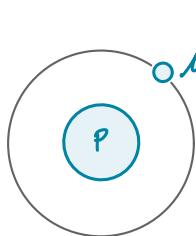
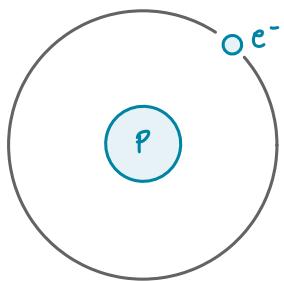
El positrón es la antipartícula del electrón, misma masa (y espín), carga opuesta.

El movimiento relativo será igual que antes, mismo pot. central porque las cargas son iguales, pero la masa reducida será muy distinta:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e^-} + \frac{1}{m_{e^+}} \Rightarrow \mu = \frac{m_e}{2}$$

Perdemos la identificación de que la partícula con masa μ es el e^- , pero los resultados para el mov. relativo son válidos.

Átomos Muónicos



Cambiamos el e^- por un muón, una versión pesada del electrón:

$$m_\mu \approx 200 \text{ me}$$

El único cambio estará en la masa reducida, que será mucho mayor:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_p} + \frac{1}{m_\mu} \Rightarrow \mu \approx 190 \text{ me}$$

Así que el radio de Bohr asociado será

$$r_B^\mu = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \approx 190 r_B$$

Tenemos un átomo 190 veces más pequeño.

Eso sí, es instable, ya que el muón se desintegra:

$$\mu \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu, \quad \tau_\mu \sim 10^{-6} \text{ s}$$

2.5.2. Correcciones Relativistas

Hemos resuelto la ecuación de Schrödinger de toda la vida, la no relativista. Pero cómo de realista es esto? Está bien justificando despreciar los efectos de la relatividad?

Para ello, vamos a mirar cuál es la velocidad que tiene un electrón en el estado fundamental según las soluciones que hemos encontrado y compararlo con c.

Como sólo nos interesa la magnitud de \vec{v} , estudiaremos v^2 , que se puede relacionar fácilmente con magnitudes conocidas:

$$v^2 = \frac{P^2}{\mu} = \frac{2}{\mu} \left(H + \frac{e^2}{r} \right)$$

Y para hacernos una idea de su tamaño, miramos su valor esperado para el estado fundamental 1s:

$$|\Psi_{1s}\rangle = |10\rangle \quad [\text{en base } lne \text{ y omitiendo } m]$$

$$\Psi_{1s}(\vec{r}) = R_{1s}(r) Y_0^0, \quad R_{1s}(r) = \frac{2}{r_B^{3/2}} e^{-r/r_B}$$

$$\langle v^2 \rangle_{1s} = \langle 10 | v^2 | 10 \rangle = \frac{2}{\mu} \langle 10 | \left[H + \frac{e^2}{r} \right] | 10 \rangle = \frac{2}{\mu} \left(-E_I + e^2 \langle \frac{1}{r} \rangle \right)$$

El promedio $\langle \frac{1}{r} \rangle$ lo calculamos explícitamente.

$$\begin{aligned}\langle \frac{1}{r} \rangle &= \int d^3r |\psi_{1s}|^2 \frac{1}{r} = \int_0^\infty r^2 dr \frac{1}{r} |R_{10}|^2 \underbrace{\int d\Omega |\chi_0|^2}_L \\ &= \frac{4}{r_B^3} \int_0^\infty dr r e^{-2r/r_B}\end{aligned}$$

cambiamos $\rho = \frac{2r}{r_B}$, $r = \frac{r_B}{2}\rho$

$$= \frac{1}{r_B} \int_0^\infty d\rho \rho e^{-\rho}$$

usamos $\int_0^\infty dx x^{n-1} e^{-x} = \Gamma(n) = (n-1)!$

$$= \frac{1}{r_B} \Gamma(2) = \frac{1}{r_B}$$

Juntando todo y usando $E_I = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$, $r_B = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$

$$\langle v^2 \rangle = \frac{2}{\mu} \left(-E_I + \frac{e^2}{r_B} \right) = \frac{2}{\mu} \left(-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} + \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \right) = \frac{e^4}{\hbar^2} \equiv \alpha^2 c^2$$

Donde hemos definido la constante de estructura fina

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

La velocidad media del electrón en el átomo de H es una 100 veces más pequeña que la de la luz. Esto es mucho?

El e^- va muy muy rápido, $\sim 10^6 \text{ m/s}$, pero es suficiente?
Todo depende de la precisión a la que trabajemos.

La ecuación no relativista que hemos resuelto será válida y funcionará bien hasta orden α . Al ser un número pequeño, $\alpha \sim 10^{-2}$, parece una buena primera aproximación. De hecho, hemos visto que funciona bien para explicar el espectro del átomo de Hidrógeno (la fórmula de Rydberg y las líneas espectrales de Lyman, Balmer...).

Pero, si mejoráramos nuestro experimento y conseguimos llegar a precisiones de orden α , empezaremos a ver desviaciones de nuestras predicciones, ya que a este orden sí que importarán las correcciones relativistas.

Como todas estas correcciones dependen de $\frac{v}{c} \sim \alpha$, α será el parámetro que las controle. Por eso se le llama la constante de estructura fina, porque controla las pequeñas correcciones debidas a la relatividad.

Y cómo las incorporamos? Como α es pequeño, lo podemos tratar de manera perturbativa, como pequeñas correcciones a lo gordo que es lo no relativista que ya sabemos. Esto lo aprenderemos a hacer más adelante en el curso y veremos, por ejemplo, que el espectro es un poco más complejo, que los niveles de energía dependrán de n y l , y que donde habrá una línea espectral aparecerán varias muy juntas, como las estrellas binarias.

TEMA 3: El Espín

OUTLINE:

3.1. INTRODUCCIÓN

Qué es el espín? Por qué estudiarlo?

3.2. EVIDENCIAS EXPERIMENTALES

Motivación histórica que llevó a descubrir el spin.

- Stern-Gerlach
- Estructura Fine
- Efecto Zeeman anómalo \rightarrow Átomos en \vec{B}

3.3. TEORÍA DE PAULI

Postulados para añadir el espín en MC: $E = E_r \otimes E_S$

3.4. REPRESENTACIONES MATRICIALES

Motivar espacios $E_{(j,m)}$ en general.

Caso $j=1/2$ en detalle \rightarrow matrices de Pauli.

3.5. CASO ESPECIAL $s=1/2$

Teoría no relativista de $s=1/2$. Espinores. Operadores y prob.

3.6. ROTACIONES $s=1/2$

3.1. INTRODUCCIÓN

Hasta ahora hemos asumido que nuestra función de onda está totalmente definida una vez conocemos su posición, es decir, $\Psi \equiv \Psi(\vec{r})$.

En caso del átomo H, por ejemplo, nos ha funcionado bien, ya que hemos sido capaces de explicar el espectro, o eso creíamos...

Al mirar las líneas espectrales en más detalle, nos empezamos a encontrar sorpresas. Las líneas no están exactamente donde deberían y sobre todo, algunas de ellas se descubren como varias líneas muy juntas. Es verdad que en el átomo H nos salió que cada nivel tenía una degeneración de n^2 , así que si no estuviesen exactamente degeneradas igual podríamos explicar este fenómeno, pero qué es lo que rompe la degeneración? Y será suficiente?

Mirando el tema anterior, hemos visto que la apox. no relativista para el e^- era buena hasta $O(\alpha)$. Además, estábamos ignorando todos los efectos magnéticos (sólo metímos los electrostáticos con el potencial de Coulomb). Con suerte esto nos ayuda, y veremos cómo meterlos de forma perturbativa más adelante. Sin embargo, en este tema vamos a ver primero que sólo con un $\Psi(\vec{r})$ estamos jodidos.

Una descripción relativista en full glory, completamente consistente, nos llevará a la ecuación de Dirac, que igual mencionaremos al final del curso. Esta ecuación hace manifeste una nueva propiedad de las partículas como el electrón: su espín.

Pero no hace falta irse a la relatividad para meter el espín. De hecho, se descubrió antes del formalismo de Dirac y Pauli consiguió incorporarlo al formalismo de MC.

Esto es justo lo que veremos aquí, tanto los experimentos que llevaron a descubrir el espín como la teoría de Pauli, que es mucho más simple que el formalismo relativista completo pero nos servirá para explicar los experimentos. Si seguís en teórico, o en FAE el año que viene, vereis la ecuación de Dirac y cómo su límite no-relativista da el formalismo de Pauli.

Pero antes de empezar, una pregunta: qué es el espín?

Nota: ya han visto el spin antes: la polarización de la luz.

3.2. EVIDENCIAS EXPERIMENTALES

A día de hoy tenemos muchísimos experimentos que no sólo demuestran la existencia del espín, sino que juegan con ello a su antojo (e.g. ordenadores cuánticos). Aquí vamos a hablar de los primeros experimentos, aquellos que dieron resultados sorprendentes y que explicarlos llevó al descubrimiento o necesidad de introducir el espín en nuestra teoría. En concreto hablaremos de 3 exp:

- a. Stern - Gerlach
- b. Efecto Zeeman anómalo
- c. Estructura fina

Pero para entenderlos mejor primero debemos reparar cómo se comporta el e^- de un átomo en un campo magnético.

Efectos de \vec{B} : momento magnético

[Cohen: DvII]

Para una partícula con carga q en un potencial $V(\vec{r})$ y un campo magnético $\vec{B} = \vec{J} \times \vec{A}$ externo, tenemos

$$H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad [\text{signos: } qe^- = -e]$$

Nota: una partícula cargada "libre" en un \vec{B} cambia su definición de momento canónico $\vec{\pi} = \vec{p} - q\vec{A}$, que no coincide con $\vec{p} = m\vec{v}$. Esto igual lo han visto en MC1.

Para \vec{B} uniformes, el potencial vector se cogerá:

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B}$$

Nota: que \vec{B} sea uniforme realmente es un muy buen
aprox., ya que en los experimentos que hacemos los \vec{B}
que podemos crear no suelen cambiar a escalas tan
pequeñas como la atómica. Por lo que es justo pensar
que \vec{B} será uniforme dentro de cada átomo.

Sustituimos el término cinético y expandimos:

$$\begin{aligned} (\vec{p} - q\vec{A})^2 &= (\vec{p} + \frac{1}{2}q\vec{r} \times \vec{B})^2 \\ &= p^2 + \frac{1}{2}q \left[\vec{p} \cdot (\vec{r} \times \vec{B}) + (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{p} \right] + \frac{1}{4}q^2 (\vec{r} \times \vec{B})^2 \\ &= p^2 + \frac{1}{2}q \vec{B} \cdot [\vec{p} \times \vec{r} - \vec{r} \times \vec{p}] + \frac{1}{4}q^2 [r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2] \end{aligned}$$

Demo: como \vec{B} es const, es un número, no un operador, así
que commute con todo. Ponéndolo en índices:

$$\begin{aligned} \vec{p} \cdot (\vec{r} \times \vec{B}) + (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{p} &= p_i \epsilon_{ijk} r_j B_k + \epsilon_{ijk} r_j B_k p_i \\ &= B_k \epsilon_{kij} p_i r_j - B_k \epsilon_{kji} r_j p_i \\ &= \vec{B} \cdot [\vec{p} \times \vec{r} - \vec{r} \times \vec{p}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\vec{r} \times \vec{B})^2 &= \epsilon_{ijk} \epsilon_{imn} r_j B_k r_m B_n = (\delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}) r_j r_m B_k B_n \\ &= r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2 \end{aligned}$$

El término lineal en \vec{B} se puede poner en función de \vec{L} usando:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = -\vec{p} \times \vec{r}$$

Demo: $L_i = (\vec{r} \times \vec{p})_i = \epsilon_{ijk} r_j p_k = -\epsilon_{ijk} [p_k r_j - i \hbar \delta_{jk}] = -(\vec{p} \times \vec{r})_i$

Y tenemos $H = H_0 + H_1 + H_2$

→ si $q < 0$, tendremos un signo en H_1

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

$$H_1 = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B}$$

con

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \approx 9.3 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$$

MAGNETÓN DE BOHR

$$H_2 = \frac{q^2}{8m} [r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2]$$

En principio deberímos resolver los niveles de energía para el H completo, pero como \vec{B} suele ser pequeño, H_0 domina sobre el resto. Por ejemplo, metiendo números del átomo de hidrógeno, vemos que las energías asociadas a las transiciones entre niveles de energía cumplen

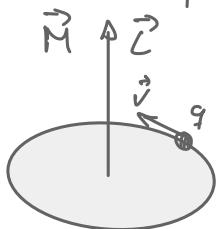
$$\Delta E_2 \ll \Delta E_1 \ll \Delta E_0 \rightarrow \begin{array}{l} \text{contribución de cada } H_i \text{ a las} \\ \text{transiciones de energía es genérico,} \\ \text{no se refiere a un nivel } E_n \text{ concreto.} \end{array}$$

Con una jerarquía de unos 10^4 para $B < 10 \text{ T}$, que ya sería grandecito para un exp. Por lo tanto, podemos tratar H_1 como una pequeña perturbación de H_0 , pero esto veremos como hacerlo más adelante.

Interpretación de H_i : acoplamiento paramagnético

Lo que nos interesa por ahora es la interpretación de estos nuevos términos, ya que nos están diciendo cómo se acopla la partícula q a \vec{B} .

Para ello, recurrimos a nuestra visión clásica de una carga girando en una órbita circular. Esto no es más que una corriente rodeando una superficie circular S , por lo que le corresponderá un momento magnético \vec{M} :



$$|\vec{M}| = I \cdot S = \frac{qV}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{1}{2} q v r = \frac{q}{2m} |\vec{L}|$$
$$\Rightarrow \vec{M} = \frac{q}{2m} \vec{L} \quad \begin{array}{l} \text{paralelos para } q > 0, \\ \text{antiparalelos para } q < 0. \end{array}$$

El momento angular genera un momento magnético, que es justo como clásicamente interacciona con \vec{B} :

$$H_{mag} = - \vec{M} \cdot \vec{B}$$

Que es justo la estructura que tenemos en nuestro H_i :

$$H_i = - \vec{M}_i \cdot \vec{B} \quad \text{con} \quad \vec{M}_i = \frac{\mu_0}{h} \vec{L}$$

El átomo tendrá un momento magnético independiente a \vec{B} siempre que tenga \vec{L} . Además, \vec{M} siempre se orientará con \vec{B} , así que tenemos un acoplamiento paramagnético.

Interpretación de H_2 : acople diamagnético

La comparación clásica de antes está mal, o no del todo bien al menos. El truco está en que la idea de corrientes y cargas moviéndose hacen referencia a \vec{v} , que hemos traducido a \vec{z} usando $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m\vec{r} \times \vec{v}$. Pero esto no es verdad en presencia de \vec{B} , porque ahora tenemos que el momento canónico es $\vec{p} - q\vec{A}$. Así que igual el momento magnético total debe ser proporcional al momento canónico total:

$$M = \frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{r} \times \vec{\pi}) = \frac{\mu_B}{\hbar} [\vec{L} - q\vec{r} \times \vec{A}] = \vec{M}_1 + \vec{M}_2$$

\hookrightarrow el paralelo de antes

volviendo a asumir $\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}$

$$\vec{M}_2 = \frac{q\mu_B}{2\hbar} \vec{r} \times \vec{r} \times \vec{B} = \frac{q^2}{4m} [(\vec{r} \cdot \vec{B}) \cdot \vec{r} - r^2 \vec{B}]$$

Tenemos un momento magnético que depende de \vec{B} , es inducido. Además siempre es opuesto a \vec{B} , por lo que tenemos un acople diamagnético. \hookrightarrow Demo: $\vec{M} \parallel \vec{B}$ y $\vec{M} \cdot \vec{B} \sim -B^2 r_\perp^2 < 0$.

Para calcular la energía correspondiente, o Hamiltoniana, tenemos que integrar desde $\vec{B}=0$ al \vec{B} final. Nos dará H_2 :

$$H_2 = \int_0^B -\vec{M}_2(B') \cdot d\vec{B}' = -\frac{1}{2} \vec{M}_2 \cdot \vec{B} = \frac{q^2}{8m} [r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2] = \frac{q^2}{8m} B^2 r_\perp^2$$

\hookrightarrow perp.
a \vec{B} .

Nota: es algo muy pequeño, $\mathcal{O}(B^2)$ que solo podría ser interesante para $\vec{L}=0$, ya que $M_1=0$. Pero no vamos a estudiarlo más.

Evidencias experimentales.

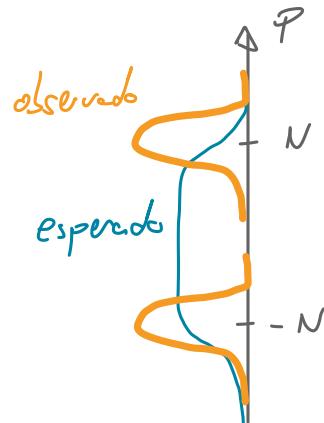
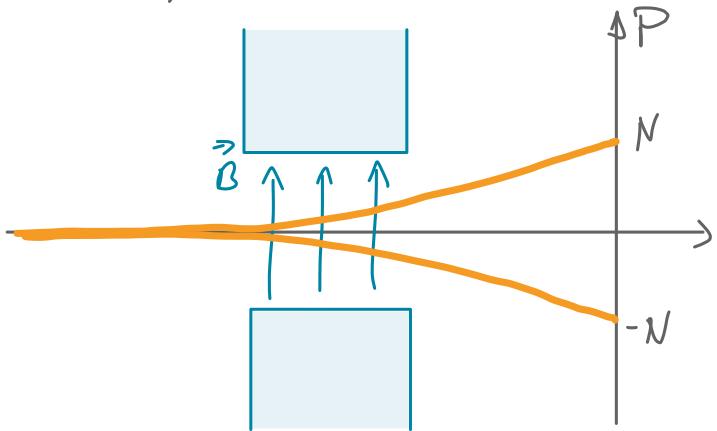
Ahora que hemos repasado que \vec{L} genera un momento magnético con el que acoplarse al \vec{B} :

$$H_{\text{mag}} = - \vec{M} \cdot \vec{B} \quad \text{con} \quad \vec{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$$

podemos intentar entender los experimentos que nos llevaron al espín. O más bien entender por qué no se entendían...

@ Exp. Stern Gerlach [Cohen ch. IV, lo habrás visto en MCI]

Este experimento supuso la demostración de que el momento angular estaba cuantizado, como ya lo vieron en MCI, así que no me enrollo mucho. Lo que sí quiero volver a mencionar es el hecho de que la cuantización, para átomos de plata por ejemplo, que es como la hicieron, mostraba solo dos posibles valores de L_z . Ahora que ya hemos aprendido que ℓ es entero y m tiene $2\ell+1$ valores posibles (impar), como es posible?



Como ya vieron, la fuerza que sienten los átomos es proporcional al momento magnético en el eje z, que a su vez es prop. a L_z :

$$F \propto M_z \propto L_z$$

Como, aparte, los átomos sólo aparecen en posiciones concretas, esto nos demuestra que L_z está cuantizado, que está OK con nuestra teoría:

$$L_z = m\hbar$$

Pero en el Tema 2 hemos visto que todas las órbitas tienen l entero, o sea que m tiene un número impar de valores posibles ($2l+1$). Para explicar sólo 2 valores necesitaríamos un $j=1/2$, cómo es posible?

Además, la última capa de un átomo de plata tiene $l=0$, lo que es aún peor para explicar la disposición...

Necesitamos que este último electrón tenga un momento angular adicional que valga $j=1/2$.

④ Efecto Zeeman Anómalo

Empiezemos por el efecto Zeeman normal. [Cohen Dvill]
 Se trata de los cambios en el espectro de emisión/absorción de un átomo al someterlo a \vec{B} .

Nota. Son cambios en frecuencia y también en polarización, que todo se puede explicar con teoría de perturbaciones como hace el Cohen Dvill. Pero nos centramos sólo en la energía, en concreto en la ruptura de la degeneración.

Consideremos un átomo de H, que ya lo hemos resuelto y la lógica será parecida para átomos más complejos. Al aplicar \vec{B} , el Hamiltoniano tendrá un término extra, tal y como hemos visto antes:

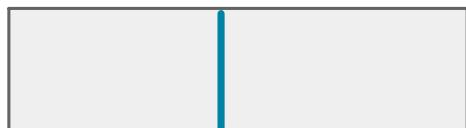
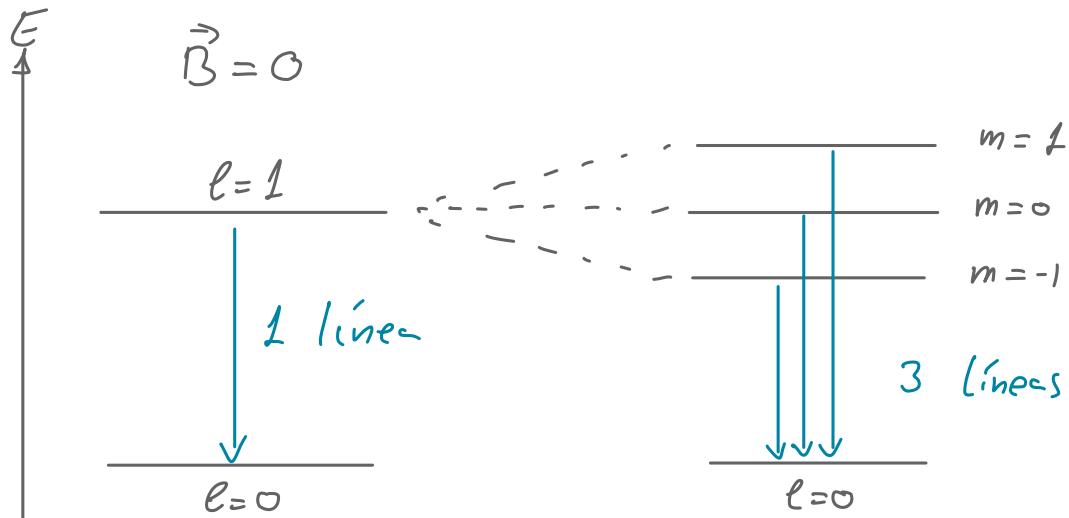
$$H = H_0 - \vec{M} \cdot \vec{B} = H_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B} \xrightarrow{\text{cambio de signo}} g_e = -e.$$

Nota: \vec{B} tendrá una dirección concreta, por lo que rompe la simetría esférica. Por suerte, para \vec{B} cte, podemos tomar el eje z a lo largo de \vec{B} , de forma que el nuevo término sea prop. a L_z y los autoestados $|\Psi_{nem}\rangle$ de H_0 también lo sean de H :

$$H |\Psi_{nem}\rangle = \left(H_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} L_z B \right) |\Psi_{nem}\rangle = \underbrace{(-E_I + m\mu_B B)}_{E_{nem}} |\Psi_{nem}\rangle$$

Los autoestados no cambian, pero ahora las energías dependen también de m , lo que romperá (parte de) la degeneración n^2 que teníamos antes:

Ej. líneas $p \rightarrow s$:



Esta separación debido al \vec{B} es el efecto Zeeman y se observa de manera parecida en muchos átomos más complejos. Como se separa cada nivel en sus $(2l+1)$ valores posibles de m , cada línea del espectro de una transición $l_2 \rightarrow l_1$ se ve multiplicada

$$(2l_1 + 1) \times (2l_2 + 1)$$

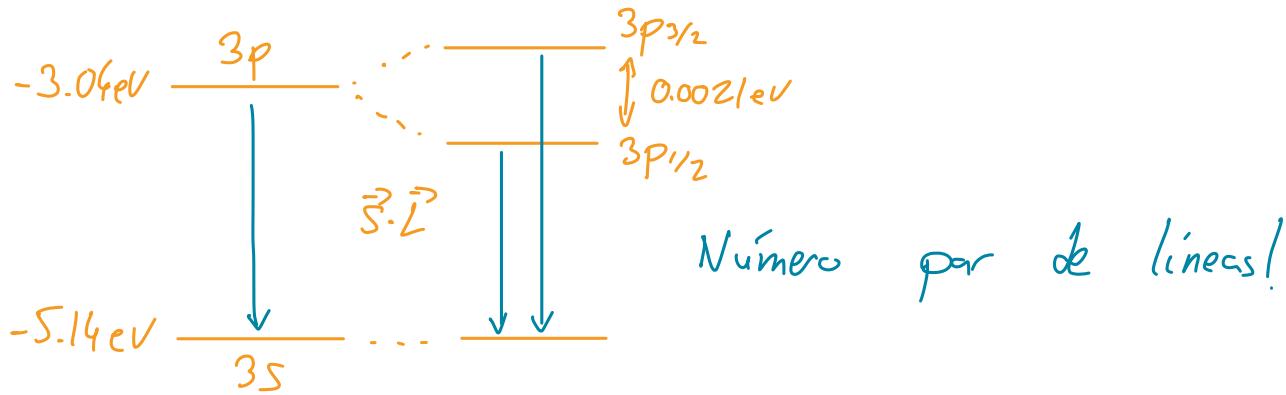
que siempre será impar, pero...

Algunos átomos dividían sus líneas en un número par, contradiciendo lo anterior, lo que se conoció como efecto Zeeman anómalo.

Ejemplo (opcional): El doblete de sodio.

La luz amarilla que emiten los bombillos de sodio viene de la transición $3p \rightarrow 3s$. En el átomo H ambos niveles tendrían la misma energía, pero en átomos multielectrónicos los niveles de energía también dependen de ℓ , ya que $\ell=0$ se mete más hacia el centro y por tanto siente menos el atractamiento.

Además, como mencionaremos justo después, el efecto espín-órbita rompe la degeneración del $3p$ en dos niveles: $3p_{1/2}$ y $3p_{3/2}$. Esta separación es muy pequeña, 0.0021 eV sobre $E_{3s} \sim -3.04\text{ eV}$, pero al aplicar \vec{B} se amplía y podemos ver dos líneas bien separadas en el espectro:



l igual que antes, explicar estos números pares requería introducir un momento angular semi-entero. De hecho, todo funcionaba perfectamente si el e^- tuviese un momento angular propio, siempre el mismo, e igual a $s = \frac{1}{2}$. Todo funcionaba si el e^- tenía espín $\frac{1}{2}$.

De esta forma, el efecto Zeeman anómalo no era más que el efecto Zeeman normal, pero teniendo en cuenta también el espín del e^- .

② Estructura Fina

Realmente no tenemos que aplicar \vec{B} para romper las degeneraciones que vimos en el tema anterior. Si nuestro experimento es suficientemente preciso, seremos capaces de ver que las líneas espectrales están en general compuestas por varias muy cercanas.

Como veremos más adelante, esto se debe a las correcciones relativistas y, en particular, al término espín-órbita que acopla \vec{L} y \vec{S} , $H_{SO} \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$.

Clásicamente podemos verlo como un espín reaccionando frente al campo \vec{B} creado por \vec{L} (o al revés).

Todo esto lo veremos más adelante como perturbaciones al H₀. Lo único que nos interesa por ahora es que suponía una motivación adicional para el espín.

Solución: el electrón tiene espín $\frac{1}{2}$

En 1925 Uhlenbeck y Goudsmit propusieron como solución que el e⁻ giraba, dandole un momento angular intrínseco. A día de hoy todo cuadra con que el e⁻ sea una partícula puntual, ^{determinado} _{sólo por \vec{r}} así que esta idea de girar para generar su espín ya no funciona, pero el nombre de "algo que gira" se ha quedado.

Este $s = \frac{1}{2}$ explicaba el número de niveles de energía o L_z que se medían, pero no el tamaño total del efecto. Para cuadrarlo, se postuló que el momento magnético asociado al espín era:

$$\vec{M} = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

Es decir, el doble que el asociado a \vec{L} . Decímos que la relación giromagnética del espín es el doble que la del momento angular.

Este factor, que solemos marcar como $g=2$ y que es invent total para que cuadre con los experimentos, se puede calcular desde primeros principios con la ecuación de Dirac. Además de darnos $g=2$ a primer orden, también nos da las desviaciones respecto a $g=2$ al calcularlo con más precisión, lo que llamamos el momento magnético anómalo del e^- : $a_e = \frac{g-2}{2}$.

De hecho, las medidas exp de a_e son tan precisas,

$$a_e = 0.00115965218073 \text{ (28)}$$

que es lo que se usa, al comparar con las también muy precisas predicciones teóricas, para extraer el valor de α :

$$\alpha^{-1} = 137.035999150 \text{ (33)}$$

Una vez fijado α (y un par de parámetros más), la teoría que tenemos en física de partículas (el SM) nos predice el resto de observables. Y aunque funcione que te cagas, casualidad el $g-2$ del muon igual no va tan bien:

$$\left. \begin{array}{l} a_\mu^{\text{exp}} = 0.00116592059 \text{ (22)} \\ a_\mu^{\text{th}} = 0.00116591810 \text{ (44)} \end{array} \right\} a_\mu^{\text{exp}} - a_\mu^{\text{th}} = 249(48) \cdot 10^{-11}$$

↳ Datos del PDG (obviamente sin lattice)

3.3. TEORÍA DE PAULI

Pauli propuso una descripción cuántica del espín. Hablando en placa, básicamente mete un momento angular intrínseco a huevo, totalmente independiente de momento angular orbital y de todas las coordenadas espaciales. En esta sección vamos a poner esto en lenguaje matemático.

Nota: Como hemos dicho al principio, el espín sale de manera natural en la ecuación de Dirac, que es la descripción QFT completa. Sin embargo, en el límite no relativista recuperamos la teoría de Pauli.

Postulados de Pauli para incluir \vec{S} en MC:

- Espacio de Hilbert orbital \mathcal{H}_r . Compuesto por las funciones de onda definidas por \vec{r} , como hemos hecho hasta ahora.

- Espacio de Hilbert de espín \mathcal{H}_s . A las variables espaciales le añadimos las variables de espín \vec{S} , que cumplirán:

↳ \vec{S} será un momento angular:

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$$

y todo lo que ello implica (Tema 1)

↳ $\{S^2, S_z\}$ forman un CCOC de E_s . El espacio de espín está totalmente determinado por S^2 y S_z , y tendremos una base $|s, m\rangle$ tal que:

$$S^2 |s, m\rangle = s(s+1) \hbar^2 |s, m\rangle , \quad s=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$

$$S_z |s, m\rangle = m \hbar |s, m\rangle , \quad m=-s, -(s-1), \dots, s-1, s$$

↳ Espín de las partículas. Cada partícula vendrá caracterizada por un único valor de s . Decimos que una partícula tiene espín s , igual que tiene masa m . Por tanto,

$$\dim E_s = 2s+1$$

- Espacio de Hilbert completo $E = E_r \otimes E_s$. Al ser un producto tensorial de ambos, todos los obs de espín comutarán con los orbitales.

- El electrón: tiene $s=\frac{1}{2}$ y momento magnético:

$$\vec{M} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} , \quad \text{con } g=2$$

Notas: - Conocemos partículas con $s=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$, algunas fundamentales, otras no.

- Partículas con $s=\frac{1}{2}$ pueden tener $g \neq 2$ (ej: protón/neutrón)

→ Lo iba a contar en el Tema 1 como el Cohen, pero lo muere aquí mejor

3.4. REPRESENTACIONES MATRICIALES [Cohen ch. VI]

Vamos a ver que el espacio de espín es se puede representar mediante matrices. Pero como esto es algo más genérico, que aplica a cualquier momento angular, volvamos a la notación del Tema 1 de \vec{J} y $|K, l, m\rangle$. Además, asumimos un obs. adicional para A para completar el CCOC y simetría rotacional:

$$\text{sym rot} \Rightarrow [A, \vec{J}] = 0$$

↓
podrían ser más, pero con uno nos vale para la discusión

En genérico, tendremos que $A|K, j, m\rangle = \alpha_{Kj|m} |K, j, m\rangle$, pero la simetría quitará la dependencia en m :

$$A|K, j, m\rangle = \alpha_{Kj} |K, j, m\rangle$$

Demo: Como $[A, \vec{J}] = 0 \Rightarrow [A, J_{\pm}] = 0$, por lo que $|K, j, m \pm 1\rangle$ tendrán los mismos autovalores que $|K, j, m\rangle$:

$$A|K, j, m \pm 1\rangle \xrightarrow{\vec{J}^{\text{norm}}} A J_{\pm} |K, j, m\rangle = \alpha_{Kj|m} J_{\pm} |K, j, m\rangle \xrightarrow{|K, j, m|^{\text{norm}}} \alpha_{Kj|m} |K, j, m \pm 1\rangle$$

Como tiene que ser verdad para todo m : $\alpha_{Kj|m} \equiv \alpha_{Kj}$ indep de m .

Interpretación:

- La simetría rotacional (i.e. \vec{J}) no cambia K ni j , pero si m , que controla las proyecciones (~orientación)
- Dos estados con K o j distintos serán ortogonales y no se podrán mezclar incluso rotando (aplicando \vec{J}).

- Esto nos permite dividir todo el espacio de estados en subespacios con K y j definidos, todos ellos ortogonales entre sí. Y no podemos conectarlos ni aplicando operadores (que respeten la simetría), así que tendremos la estructura diagonal por bloques:

	$\mathcal{E}(K, j)$	$\mathcal{E}(K, j')$	$\mathcal{E}(K', j)$...
$\mathcal{E}(K, j)$	$\begin{matrix} \text{matriz} \\ (2j+1) \times (2j+1) \end{matrix}$	0	0	
$\mathcal{E}(K, j')$	0	$\begin{matrix} \text{matriz} \\ (2j'+1) \times (2j'+1) \end{matrix}$	0	
$\mathcal{E}(K', j)$	0	0	$\begin{matrix} \text{matriz} \\ (2j+1) \times (2j+1) \end{matrix}$	

- Podemos estudiar estos espacios una vez y nos servirá para describir la parte angular de cualquier problema con simetría rotacional.
- Cada uno de estos subespacios tendrá una dimensión de $(2j+1) \times (2j+1)$, los valores que podrá coger m . Se representan con matrices. [representar = cumplen el álgebra del grupo]
- Útil sobre todo con j bajos, porque las matrices serán pequeñas y manejables.

→ y lc del espín del e⁻

Ej. Representación $j=1/2$ [la más pequeña no trivial ($j>0$)]

- La dimensión será $2j+1 = 2 \Rightarrow m = \pm 1/2$
- Usamos la base $\{|+\rangle, |-\rangle\} \equiv \{|m=1/2\rangle, |m=-1/2\rangle\}$.
- En esta base:

$$\begin{aligned} \langle \pm | J_z | \pm \rangle &= \pm \frac{\hbar}{2} \\ \langle \mp | J_z | \pm \rangle &= 0 \end{aligned} \quad \left\{ \Rightarrow J_z^{(1/2)} = \langle m | J_z | m' \rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right.$$

$$\langle + | J_+ | - \rangle = \hbar \quad \Rightarrow \quad J_+^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\langle - | J_- | + \rangle = \hbar \quad \Rightarrow \quad J_-^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

De aquí también tenemos:

$$J_x^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}; \quad J_y^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$J^2^{(1/2)} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Notas: comentarlo por encima, pero van como ejercicio.

- Las matrices $J_i^{(1/2)}$ cumplen el álgebra de momento angular:

$$[J_i^{(1/2)}, J_j^{(1/2)}] = i \epsilon_{ijk} J_k^{(1/2)}$$

- $J^2^{(1/2)}$ tiene autovalores $\frac{3}{4}\hbar^2 \Rightarrow j = 1/2$

↳ son una representación de $j = 1/2$.

- Aunque $J_x^{(1/2)}$ y $J_y^{(1/2)}$ no son diagonales en esta base, tienen autovalores $\pm \hbar/2$.

→ Este ya sí que es importante explicarlo en clase

$J_i^{(1/2)}$, que es justo el espín del electrón, son proporcionales a las matrices de Pauli:

$$J_i^{(1/2)} = S_i^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \sigma_i$$

$$\sigma_1 \equiv \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_2 \equiv \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_3 \equiv \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Propiedades:

- Hermíticas $\sigma_i^+ = \sigma_i$

- Involutivas $\sigma_i^2 = \mathbb{H}$

⇒ unitarias $\sigma_i^+ \sigma_i = \mathbb{H}$

- Sin traza $\text{Tr}\{\sigma_i\} = 0$ y $\det \sigma_i = -1$

- No comutan $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$

- Pero sí anticommutan: $\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij}\mathbb{I}$

- De aquí sale $\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z$ (y sus permutaciones)

Una propiedad importante es que $\{\mathbb{I}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ forman una base de las matrices 2×2 hermíticas (realmente de $SU(2)$, las matrices unitarias con $\det = 1$, y después de coser $\sigma \rightarrow i\sigma$ para compensar el $\det \sigma = -1$). → a veces se pone $\sigma_0 = \mathbb{I}$

Esto tiene sentido porque son indep. entre sí y son 4, los mismos elementos que tiene una matriz 2×2 hermética, así que serán perfectas para describir observables en el espacio es de espín $1/2$.

Esto es justo lo que hizo Pauli. Además, como en su teoría E es indep. de \vec{r} y está totalmente determinado por $\hbar S^2, S_x, S_y, S_z$, estas matrices 2×2 describirán todo la parte del espín del electrón, como veremos ahora.

→ Meter en problemas las matrices para $j=1$.

3.5. CASO ESPECIAL $s=1/2$

Lo estudiamos en detalle por ser el j más simple no trivial y, sobre todo, por ser el espín del electrón. Con lo que hemos visto antes, sabemos que la dim de E_s será 2, que el operador espín será proporcional a las matrices de Pauli:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

y por tanto tendrá más propiedades que j más altos:

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \hbar^2/4$$

$$\{S_i, S_j\} = 2\hbar^2/4$$

$$S_x S_y = \frac{i\hbar}{2} S_z \quad (\text{y permutaciones: } S_i S_j = 2\hbar^2 S_{ij} + \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} S_k)$$

$$S_+^2 = S_-^2 = 0$$

Usando todo esto, la teoría de Pauli nos da una descripción no relativista de una partícula de $s=1/2$.

Teoría no relativista de una partícula de $s=1/2$

Como hemos visto, nuestro espacio de Hilbert estará descrito por los obs. espaciales y los de espín, de forma que nuestro CCOC será:

$$\{\vec{r}, S^z, S_x\} = \{x, y, z, S^z, S_x\}$$

o de manera equivalente $\{H, L^z, L_x, S^z, S_x\}$.

Nota: trabajaremos indistintamente con estos dos CCOC, aunque también podríamos usar otros como $\{\vec{p}, S^z, S_x\}$.

Como en esta teoría no-relativista (la de Pauli) el espacio y el espín son totalmente independientes:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$$

los autoestados comunes que buscamos se podrán poner como un producto tensorial de su parte espacial y de espín:

$$|\psi\rangle = |\vec{r}, \varepsilon\rangle = |\vec{r}\rangle \otimes |\varepsilon\rangle$$

De forma que podemos estudiar la parte de espín por separado. Como en nuestro caso tenemos $s=1/2$,

$$\dim \mathcal{E}_s = 2 \xrightarrow{\text{base } \{S^z, S_x\}} |s, m\rangle = |1/2, \pm 1/2\rangle \equiv |\pm\rangle$$

Como tenemos un espacio Es pequeño y discreto, es útil definir las proyecciones de la f.d.o. como:

$$\langle \vec{r}, \pm | \psi \rangle = \psi_{\pm}(\vec{r})$$

de forma que tenemos 2 f.d.o., pero que sólo dependen de \vec{r} . Estas se suelen poner como un **espinor de 2 componentes**:

$$\psi(\vec{r}, \epsilon) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

donde hemos identificado (\equiv elegido base),

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |- \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Vamos a ver un poco cómo trabajar con estos espines.

Producto escalar:

Si un ket es un vector columna, un bra será uno fila:

$$\psi^+(\vec{r}, s) = (\psi_+^*(\vec{r}) \quad \psi_-^*(\vec{r}))$$

de forma que el producto escalar:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int d^3r \varphi^* \psi = \int d^3r [\varphi_+^*(\vec{r}) \psi_+(\vec{r}) + \varphi_-^*(\vec{r}) \psi_-(\vec{r})]$$

Normalización:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3r \left(|\Psi_+(\vec{r})|^2 + |\Psi_-(\vec{r})|^2 \right) = 1.$$

Operadores:

Su parte de espín se podrá codificar según cómo actúan sobre los componentes del espín, dándonos matrices 2×2 en E_S , cada componente siendo un operador sólo en \vec{r} . Ejemplos:

→ operadores puro espín: el propio $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, también $S^2, S_z \dots$

→ operadores puro orbital: no afectan a E_S , serán matrices diagonales:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r} H_2 = \begin{pmatrix} \vec{r} & \\ & \vec{r} \end{pmatrix}, \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} H_2 = -i\hbar \begin{pmatrix} \vec{v}^+ & \\ & \vec{v}^- \end{pmatrix}$$

→ operadores mixtos:

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{L} \cdot \vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} L_z & L_x - iL_y \\ L_x + iL_y & L_z \end{pmatrix}$$

Probabilidades:

Con la normalización de antes, las f.d.o. $\Psi_{\pm}(\vec{r})$ tienen su propia interpretación probabilística. En concreto, sus módulos cuadrado nos dará la probabilidad de encontrar la partícula en una posición \vec{r} con un espín dado:

$$P(\vec{r}, \pm) = P_{\pm}(\vec{r}) = |\psi_{\pm}(\vec{r})|^2$$

Y de aquí sacamos todo. Por ejemplo, si queremos la probabilidad de tener espín \pm , dc igual su posición:

$$P_{\pm} = \int d^3r |\psi_{\pm}(\vec{r})|^2$$

y si lo que queremos es la prob. de estar en \vec{r} , independientemente de su espín:

$$P(\vec{r}) = \sum_{\epsilon} |\psi_{\epsilon}(\vec{r})|^2 = |\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2.$$

3.6. ROTACIONES $s=1/2$

Para cerrar, mencionamos muy brevemente como son las rotaciones de una partícula con espín $1/2$. No es más que un caso particular de las rotaciones genéricas que vimos en el tema 1, pero merece comentarlo para ver que \vec{r} se encargará de rotar la parte espacial y que \vec{s} rotará la parte de espín. Además, esta última tendrá una forma muy compacta gracias a que estamos en un \mathbb{E} pequeño.

Momento angular total.

Pregunta: qué tipo de operador es \vec{S} ? al ser un momento angular, con 3 componentes, lo lógico sería pensar que se trata de un vector. Sin embargo, tenemos

$$[\vec{L}, \vec{S}] = 0$$

que, según lo visto en el tema 1, nos lleva a pensar que se trata de un operador escalar.

El truco está en que \vec{L} sólo rota el espacio, respecto al cual \vec{S} sí que es escalar, pero la rotación completa vendrá dada por el momento angular total:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

respecto al cual tanto \vec{L} como \vec{S} son vectores:

$$[J_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k, \quad [J_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$$

De modo que los generadores de las rotaciones completas serán \vec{J} :

$$R_u(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \vec{J} \cdot \hat{u}}$$

Nota. Esto es una motivación para estudiar cómo es la suma de momentos angulares, que será el siguiente tema.

Rotaciones espaciales y espinoricas

Como tenemos $\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$ dos espacios de Hilbert indep, la rotación total de \vec{f} la podemos poner como el producto de dos rotaciones:

$$R_u(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{\sigma} \cdot \vec{u}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{\sigma} \cdot \vec{v}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{\sigma} \cdot \vec{v}} = R_u^r(\alpha) \otimes R_u^s(\alpha)$$

$\hookrightarrow [\vec{\sigma}, \vec{\sigma}] = 0.$

de forma que que $\vec{\sigma}$ y $\vec{\sigma}$ rotan en \mathcal{E}_r y \mathcal{E}_s , respect.

Miramos la parte de espín más de cerca. Como es un operador en \mathcal{E}_s , se puede poner como una matriz 2×2 . La sacamos expandiendo la exponencial y usando las propiedades de las matrices de Pauli:

$$R_u^s(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{\sigma} \cdot \vec{u}} = e^{-i \frac{\alpha}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{u}} = \cos \frac{\alpha}{2} - i (\vec{\sigma} \cdot \vec{u}) \sin \frac{\alpha}{2}$$

Demo: usando

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{u})^2 = \sigma_i \sigma_j u_i u_j = (\delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k) u_i u_j = u^2 = I \Rightarrow \vec{\sigma} \cdot \vec{u} = \begin{cases} \vec{\sigma} \cdot \vec{u} & n \text{ impar} \\ 2 & n \text{ par} \end{cases}$$

$$\Rightarrow e^{-i \frac{\alpha}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{u}} = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i\alpha}{2}\right)^n (\vec{\sigma} \cdot \vec{u})^n$$

$$= \left[I - \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^4 + \dots \right] - i (\vec{\sigma} \cdot \vec{u}) \left[\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{2!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^3 + \dots \right]$$

$$= \cos \frac{\alpha}{2} - i (\vec{\sigma} \cdot \vec{u}) \sin \frac{\alpha}{2} //$$

Rotaciones $\alpha = 2\pi$.

Esta rotación debería dejar la física invariante, sin embargo vemos que la parte espiral coge un signo:

$$R_u^s(2\pi) = -I_2$$

como ya vimos en el Tema 1. Es problemático?

Por un lado, podemos pensar que un signo menos no es más que una fase global en la f.d.o., que sabemos que no es física.

Además, lo importante es cómo cambian los observables, pero como van cuadráticos en R , no cambiarán.

$$A \rightarrow A' = R A R^T \xrightarrow{\alpha=2\pi} A \quad \checkmark$$

TEMA 4: SUMA DE MOMENTOS ANGULARES

OUTLINE:

4.1. INTRODUCCIÓN

Por qué sumarlos? Ejemplos $\vec{L}_1 + \vec{L}_2$, $\vec{L} + \vec{S}$

4.2. SUMA DE 2 $S=1/2$

Caso más simple, explícito para ver qué pasa.

↳ Presentación del problema: qué sabemos? qué buscamos?

↳ Fuerza bruta: diagonalizando matrices S^2 y S_z

↳ Método elegante: preparación para generalizarlo.

4.3. SUMA DE MOMENTOS ANGULARES ARBITRARIOS

Descripción formal del problema.

Coef. Clebsch-Gordan

Ejemplos entre de cómo derivarlos y usarlos.

4.1. INTRODUCCIÓN

Ya hemos estudiado mucho el momento angular, sus definiciones, el momento angular orbital y el espín, cómo usarlo para simplificar problemas con simetría esférica... entonces, qué más nos queda?

La cosa es que hasta ahora hemos visto las cosas compartmentadas. Primero cuando tenemos una sola partícula sin espín, y hemos visto cómo es su \vec{L} . Luego hemos estudiado su \vec{s} por separado. Pero qué pasa cuando tenemos una partícula con \vec{L} y \vec{s} ? o cuando tenemos dos o más partículas cada una con su \vec{L}_i ?

Como ya vimos al final del tema anterior, la respuesta será el momento angular total, que será la suma de todos los diferentes momentos angulares. Éste será el generador de las rotaciones en estos sistemas y por tanto la magnitud conservada. Así que nos toca sumar.

Pero bueno, a estas alturas del grado de física ya sabemos sumar vectores. Por qué narices dedicar un tema a ello? La respuesta es la misma de siempre: cuántica.

Llevamos todo el curso viendo lo peculiar que es el momento angular en MC, con sus reglas de commutación, su cuantización... así que por qué esperarnos que su suma fuese normal? Al fin y al cabo, sumar varios momentos angulares nos dará otro momento angular, con sus peculiaridades cuánticas.

Por eso este tema va de aprender a sumar. Veremos que esto nos llevará a lo que se conoce como **coeficientes Clebsch-Gordan**, que nos ayudarán a sumar o **componer momentos angulares** en MC.

Pero antes de meternos en faena, veamos un par de ejemplos (algunos de nuevo) donde lo importante al final es el momento angular total.

Ej. 1: Dos partículas sin espín en $V(r)$

Consideremos un sistema formado por 2 partículas sin espín en un potencial central $V(r)$. Por ejemplo, los dos electrones de un átomo de Helio, si nos olvidamos de sus espines, claro.

Si además despreciamos la interacción entre estas dos partículas, el Hamiltoniano total será simplemente la suma de los individuales:

$$H = H_1 + H_2$$

con $H_i = \frac{P_i^2}{2m_i} + V(r_i) = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \vec{\nabla}_i + V(r_i)$

Con todo lo que hemos aprendido, la dinámica de este sistema es trivial. Cada L_i será un buen observable conservado:

$$[L_i, H] = [L_i, H_i] = 0$$

así que simplemente tenemos que combinar las soluciones para cada partícula por separado:

$$|\vec{r}_1, \vec{r}_2\rangle = |\vec{r}_1\rangle \otimes |\vec{r}_2\rangle$$

Pero sabemos que el mundo no es tan simple y que estas partículas, si son electrones por ejemplo, interactuarán entre sí. Asumiendo que esta interacción depende sólo de la distancia entre las dos partículas (un pot. central entre ellas):

$$V_{int}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V_{int}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

El Hamiltoniano completo será:

$$H = H_1 + H_2 + V_{\text{int}}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

Y podemos preguntarnos si cada L_i seguirá siendo una magnitud conservada. Cogemos L_{iz} como ejemplo para hacerlo explícito:

$$L_{iz} = x_i p_{iy} - y_i p_{ix} = -i\hbar \left(x_i \frac{\partial}{\partial y_i} - y_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right)$$

$$[L_{iz}, H] = [L_{iz}, V_{\text{int}}] = -i\hbar \left(x_i \frac{\partial V_{\text{int}}}{\partial y_i} - y_i \frac{\partial V_{\text{int}}}{\partial x_i} \right)$$

$$[L_{zz}, H] = [L_{zz}, V_{\text{int}}] = -i\hbar \left(x_z \frac{\partial V_{\text{int}}}{\partial y_z} - y_z \frac{\partial V_{\text{int}}}{\partial x_z} \right)$$

Nota: como el commutador es un operador, para ver esto es mejor aplicarlo sobre ψ :

$$[\vec{\nabla}, V]\psi = (\vec{\nabla}V - V\vec{\nabla})\psi = \vec{\nabla}(V\psi) - V\vec{\nabla}\psi = (\vec{\nabla}V)\psi$$

↳ aquí ya ψ sin derivar

$$\Rightarrow [\vec{\nabla}, V] = \vec{\nabla}V$$

De aquí vemos que en general estos dos commutadores no se anulan, así que cada \vec{L}_i dejará de estar conservado:

$$[\vec{L}_i, H] \neq 0.$$

Sin embargo, como V_{int} depende sólo de la distancia, tenemos:

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$$

$$\frac{\partial V_{int}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}{\partial x_1} = V'_{int} \frac{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\partial x_1} = V'_{int} \frac{x_1 - x_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\frac{\partial V_{int}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)}{\partial x_2} = V'_{int} \frac{\partial |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{\partial x_2} = V'_{int} \frac{x_2 - x_1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = - \frac{\partial V_{int}}{\partial x_1}$$

Las derivadas respecto cada x_i son iguales y de signo opuesto (y lo mismo para y_i , z_i). Sustituyendo en los comutadores:

$$[L_{1z}, H] = \frac{V'_{int}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} (x_1(y_1 - y_2) - y_1(x_1 - x_2)) = \frac{V'_{int}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} (-x_1 y_2 + x_2 y_1)$$

$$[L_{2z}, H] = \frac{V'_{int}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} (x_2(y_2 - y_1) - y_2(x_2 - x_1)) = \frac{V'_{int}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} (-x_2 y_1 + y_2 x_1)$$

$$\Rightarrow [L_{1z}, H] = - [L_{2z}, H]$$

Aunque cada uno de ellos no se anula, son de signo opuesto, así que si definimos el momento angular orbital total

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$$

Si que tendremos algo conservado:

$$[\vec{L}, H] = [\vec{L}_1, H] + [\vec{L}_2, H] = 0$$

Por lo tanto, en sistemas con interacción entre las partículas, la magnitud conservada será el momento angular total.

Notas: Esto es justo lo que pasa clásicamente. La interacción entre las partículas puede cambiar el momento angular individual de cada una, pero si el sistema está aislado, el momento angular total se conservará.

El truco está en que cada partícula sí que puede sufrir una fuerza, y más concretamente un momento, que cambie su momento angular, pero en un sist. aislado estas fuerzas serán iguales y de signo opuesto, de forma que el momento total es cero y el \vec{L} total se conserva. Por tanto, la relación

$$[\vec{L}_2, H] = -[\vec{L}_1, H]$$

que nos ha salido se puede interpretar como el principio de acción-reacción en MC.

Si lo pensamos en términos de simetrías, al final lo que tenemos es un sistema invariantes bajo rotaciones del sistema completo. No nos vale con rotar sólo una de las dos partículas, porque eso cambiaría la posición relativa entre ellas y por tanto su interacción. Tenemos que rotar ambas. Matemáticamente, la rotación completa vendrá dada por \vec{L} , que rotará ambas partículas, cada una con su L_i :

$$R_u(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{L} \cdot \vec{u}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{L}_1 \cdot \vec{u}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{L}_2 \cdot \vec{u}} = R_u^{(1)}(\alpha) \otimes R_u^{(2)}(\alpha)$$

Ej.2. Partícula con \vec{L} y \vec{s} .

Este ejemplo ya lo vimos al final del Tema 3, cuando vimos que la rotación completa de una partícula con \vec{L} y \vec{s} venía dada por el momento angular total

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{s}$$

$$R_u(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{J} \cdot \vec{u}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{L} \cdot \vec{u}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{s} \cdot \vec{u}} = R_u^{(r)}(\alpha) \otimes R_u^{(s)}(\alpha)$$

De hecho, esto era fundamental incluso para la propia definición de \vec{L} y \vec{s} como vectores.

Todo esto aplica ya en la teoría no-relativista de Pauli, donde espacio y espín van por su cuenta

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$$

pero como ya hemos mencionado alguna vez (y veremos más adelante), las correcciones relativistas mezclarán ambos a través del acople espín-órbita:

$$H_{SO} \propto \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Como mezclamos \vec{L} y \vec{S} , al incluir este término al Hamiltoniano \vec{L} y \vec{S} dejarán de ser obs. conservados:

$$[L_i, H] = [L_i, \vec{L} \cdot \vec{S}] = [L_i, L_j] S_j = i\hbar \epsilon_{ijk} S_j L_k$$

$$[S_i, H] = [S_i, \vec{L} \cdot \vec{S}] = [S_i, S_j] L_j = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k L_j = -i\hbar \epsilon_{ijk} S_j L_k$$

pero la suma sí que lo será:

$$[\vec{J}, H] = [\vec{L}, H] + [\vec{S}, H] = 0$$

Así que de nuevo nos interesaría sumar todos los momentos angulares del problema.

4.2. SUMA DE 2 ESPINES $\frac{1}{2}$

Ahora que hemos visto que en general lo que nos interesará será el momento angular total, vamos a ver cómo sumarlos.

Empezamos con el caso más simple, el de dos espines $s=\frac{1}{2}$. Esto nos servirá para coger un poco de intuición sobre lo que buscamos y cómo lograrlo, para luego poder generalizarlo.

4.2.1. Nuestro Objetivo

Nuestro punto de partida es la base $1\pm$ que ya conocemos para cada espín. Y como son de dos partículas, simplemente combinamos los estados, dándonos una base de 4 estados:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \Rightarrow |m_1, m_2\rangle = |m_1\rangle \otimes |m_2\rangle$$

$$|m_1, m_2\rangle = \{ |++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle \}$$

En esta base, cada partícula tiene un $\{S^2, S_z\}$ definido, de forma que nuestro CCOC viene dado por

$$\{ S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z} \}$$

$$\vec{S}_1^2 |m_1, m_2\rangle = \vec{S}_2^2 |m_1, m_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |m_1, m_2\rangle$$

$$\vec{S}_{1,2} |m_1, m_2\rangle = m_1 \hbar |m_1, m_2\rangle$$

$$S_{2z} |m_1, m_2\rangle = m_2 \hbar |m_1, m_2\rangle$$

Pero nuestro objetivo ahora es estudiar el espín total:

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

Lo primero que tenemos que hacer es asegurarnos que \vec{S} también es un momento angular, pero esto es fácil gracias a la liberdad de los commutadores y que S_1 y S_2 commuten:

$$[S_i, S_j] = [S_{1i}, S_{1j}] + [S_{2i}, S_{2j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$$

Y por tanto sabemos que existirá una base $|S, M\rangle$ tal que el espín total esté bien definido:

$$S^2 |S, M\rangle = S(S+1)\hbar^2 |S, M\rangle$$

$$S_z |S, M\rangle = M\hbar |S, M\rangle$$

Para ver la relación de este base $|S, M\rangle$ con $|m_1, m_2\rangle$, empezamos calculando algunos commutadores. Usando:

$$\vec{S}^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

$$[\vec{S}_1, \vec{S}_2] = 0$$

Este término será el que nos jode los commutadores

Tenemos [dejar como ejercicio]

$$[S_z, S_z^2] = [S_z, S_{2z}] = 0$$

$$[S_z, S_{1z}] = [S_z, S_{2t}] = 0$$

$$[S^2, S_z^2] = [S^2, S_{2z}] = 0$$

pero... $[S^2, S_{1z}] = -[S^2, S_{2t}] \neq 0$, y por tanto No podemos encontrar una base común para S^2 y $\{S_z, S_{2z}\}$. Esto nos deja con dos opciones:

① CCOC $\{S_1^2, S_2^2; S_{1z}, S_{2z}\}$: base en la que cada partícula tiene su espín bien definido

$$|S_1, S_2; m_1, m_2\rangle$$

② CCOC $\{S_1^2, S_2^2; S^2, S_z\}$: base en la que el espín total está bien definido:

$$|S_1, S_2; S, M\rangle$$

Al tratarse de dos bases del mismo espacio, tendremos una relación lineal entre ellas, que es justo lo que vamos a buscar ahora. Con cuál nos quedamos y dependerá del problema que queremos resolver.

4.2.2. Método 1: Fuerza Bruta

Buscamos la base $|s_1, s_2; S, M\rangle$ de $\{S_1^2, S_2^2; S^2, S_z\}$. Como en nuestro caso tenemos $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ fijo, nos los ahorraremos de ponerlos explícitos. Entonces buscamos $|S, M\rangle$ tal que:

$$S_1^2 |S, M\rangle = S_2^2 |S, M\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |S, M\rangle$$

$$S^2 |S, M\rangle = S(S+1) \hbar^2 |S, M\rangle$$

$$S_z |S, M\rangle = M \hbar |S, M\rangle$$

Como decíamos, nuestro punto de partida será la base $|m_1, m_2\rangle$ de cada espín. Por suerte, esta base también será autoestada del S_z total:

$$S_z |m_1, m_2\rangle = (S_1 + S_2) |m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2) \hbar |m_1, m_2\rangle$$

Y más explícitamente:

$$S_z |++\rangle = \hbar |++\rangle ; \quad S_z |--\rangle = -\hbar |--\rangle$$

$$S_z |+-\rangle = 0 ; \quad S_z |-+\rangle = 0$$

Así que el número cuántico M tendrá valores $+1, -1$ y 0 , el último estando degenerado. Esto lo podemos ver más fácil si construimos la representación matricial de S_z en la base $|m_1, m_2\rangle$:

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \begin{array}{l} |+ +\rangle \\ |+ -\rangle \\ |- +\rangle \\ |- -\rangle \end{array}$$

Y como ya es diagonal, no tenemos nada más que hacer. Esto tampoco debería sorprendernos, ya que hemos visto que S_z commuta con S_{1x} y S_{2z} , por lo que podemos tener autoestados comunes y los autovalores en este caso no son más que la suma de ambos:

$$M = m_1 + m_2.$$

El problema lo teníamos con S^2 , que era el que no commutaba con S_{1z} . De hecho, su matriz no nos saldrá diagonal. Para verlo usamos:

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}$$

Demo: $S_{i\pm} = S_{ix} \pm i S_{iy}$

$$S_{1x}S_{2x} = \frac{1}{4}(S_{1+} + S_{1-})(S_{2+} + S_{2-}) = \frac{1}{4}(S_{1+}S_{2+} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} + S_{1-}S_{2-})$$

$$S_{1y}S_{2y} = \frac{-1}{4}(S_{1+} - S_{1-})(S_{1+} - S_{2-}) = -\frac{1}{4}(S_{1+}S_{2+} - S_{1+}S_{2-} - S_{1-}S_{2+} + S_{1-}S_{2-})$$

$$\Rightarrow 2S_{1x}S_{2x} + 2S_{1y}S_{2y} = S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}$$

Y aplicándolo sobre la base $|m_1, m_2\rangle$:

$$S^2 |++\rangle = 2 \frac{3}{4} \hbar^2 |++\rangle + 2 \frac{\hbar^2}{4} |++\rangle = 2\hbar^2 |++\rangle$$

$$S^2 |+-\rangle = 2 \frac{3}{4} \hbar^2 |+-\rangle - 2 \frac{\hbar^2}{4} |+-\rangle + \underbrace{\frac{\hbar^2}{4} |-+\rangle}_{S_1 - S_2 + I_{+-}} = \hbar^2 (|+-\rangle + |-+\rangle)$$

$$S^2 |-+\rangle = 2 \frac{3}{4} \hbar^2 |-+\rangle - 2 \frac{\hbar^2}{4} |-+\rangle + \hbar^2 |+-\rangle = \hbar^2 (|+-\rangle + |-+\rangle)$$

$$S^2 |--\rangle = \text{igual que } |++\rangle = 2\hbar^2 |--\rangle$$

$$\Rightarrow S^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & & & & |++\rangle \\ - & 1 & 1 & 1 & |+-\rangle \\ - & 1 & 1 & 1 & |-+\rangle \\ - & 1 & 1 & 1 & |--\rangle \\ 1 & & & & |--\rangle \end{pmatrix}$$

Obtenemos algo que efectivamente no es diagonal, aunque sí que lo es por bloques. Realmente esto ya lo podríamos haber intuido, ya que $[S^2, S_z] = 0$ y por tanto sólo podremos mezclar estados con el mismo S_z , que es justo el bloque 2×2 central y el lo único que debemos diagonalizar. Nos saldrá:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \longrightarrow \text{autovector } 2\hbar^2$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \longrightarrow \text{autovector } 0.$$

Resultado final: singlete más triplete

Ya tenemos los 4 estados $1S, M_S$. Uno corresponde a $S=0$ y se suele llamar singlete:

$$|0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Los otros 3 tienen $S=1$, cada uno con $M=-1, 0, 1$. Se les llama triplete:

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |++\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |1, -1\rangle &= |--\rangle \end{aligned}$$

Notas:

- El resultado final tiene la forma esperada para un momento angular, con $2S+1$ valores de M para cada S .
- Esta base tiene $\{S^2, S_z\}$ bien definida, pero no S_{iz} . En concreto mezcla los estados $|1\pm, \mp\rangle$
- Todos los estados del triplete son SIMÉTRICOS, mientras que el singlete es ANTISIMÉTRICO. Esto suele pasar dentro de cada multiplete y será importante más adelante, cuando hablaremos de partículas indistinguibles (y fermiones y bosones).

4.2.3. Método más elegante

En el método anterior no hemos explotado una de las herramientas que sabemos que es muy útil a la hora de estudiar momentos angulares: los J_z .

Usarlos es lo que nos va a permitir obtener los resultados anteriores de una forma más limpia y, sobre todo, poder aplicarlos a casos más complejos, donde diagonalizar matrices $(2j+1) \times (2j+1)$ se puede volverse complejo.

La idea es simple: realmente conocemos los estados extremos, ya que sólo hay una configuración que nos da $M = +L$, que es cuando los estados están alineados:

$$|+++\rangle = |LLL\rangle$$

Nota: esto realmente nos dice que $M = +L$, no sabemos cómo será S más allá de que $S \geq L$. Pero como $M = +L$ es el valor más alto que podemos obtener, y siendo S un momento angular, no nos queda más remedio que tener $S = L$.

Y ahorrando simplemente usamos J_z para ir bajando M sin tocar S :

$$J_z = J_{1z} + J_{2z}$$

teniendo cuidado con las normalizaciones (según si $s = \frac{1}{2} \circ L$):

$$J_- |S, M\rangle = \hbar \sqrt{S(S+1) - M(M-L)} |S, M-L\rangle$$

$$J_{i-} |S_i, m_i\rangle = \hbar \sqrt{S_i(S_i+1) - m_i(m_i-L)} |S_i, m_i-L\rangle$$

Así que tenemos por un lado:

$$J_- |L, L\rangle = \sqrt{2}\hbar |L, 0\rangle$$

y por otro:

$$J_- |L, LS = (J_{1-} + J_{2-}) |++\rangle = \hbar (|+-\rangle + |-+\rangle)$$

comparando:

$$|L 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle)$$

Repetimos:

$$J_- |L 0\rangle = \sqrt{2}\hbar |L-L\rangle$$

$$\hookrightarrow (J_{1-} + J_{2-}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|--\rangle + |--\rangle) = \sqrt{2} |--\rangle$$

$$\Rightarrow |L-L\rangle = |--\rangle$$

Que realmente ya sabíamos y podíamos haber usado para empezar y después usar J_+ , así que es un buen check de que lo hemos hecho bien.

Como ya no podemos seguir aplicando J_z , tenemos los 3 estados posibles de $S=1$, que son justo el triplete de antes:

$$\left. \begin{array}{l} |1+1\rangle = |++\rangle \\ |100\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |1-1\rangle = |--\rangle \end{array} \right\} \text{triplete } S=1 \text{ (simétricos)}$$

Y ahora como seguimos? Sabemos que nos falta sólo L , porque tienen que ser 4, así que tiene que ser un estado con $S=0$. Además, ya sabemos que no hay más opciones para tener $H=\pm L$, así que todo cuadra.

Para sacarlo, usamos que $|S, MS\rangle$ forma una base ortonormal, así que el estado $|0,0\rangle$ deberá ser ortogonal al $|10\rangle$ que ya tenemos:

$$|0,0\rangle = \alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle \rightarrow \text{comb. genérica de estados } H=0.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle 10 | 00 \rangle = \alpha + \beta \equiv 0 \Rightarrow \alpha = -\beta \\ \langle 00 | 00 \rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \equiv 1 \xrightarrow{\text{eligiendo } \alpha \text{ real}} \alpha = -\beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{array} \right.$$

$$\Rightarrow |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Que es justo el singlete (antisim) de antes.

4.3. SUMA DE MOMENTOS ANGULARES ARBITRARIOS

Vamos a generalizar lo aprendido para el caso simple de dos espines $\frac{1}{2}$. Vamos a ponerlo en plan formal, que así parece más serio y cierto, pero la idea es exactamente la misma que en el caso concreto de antes.

Consideremos dos sistemas (e.g. dos partículas) cada uno con un momento angular j_i . Para el primer sistema, sabemos que tendremos una base estandar tal que:

$$J^2 |K_1, j_1, m_1\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2 |K_1, j_1, m_1\rangle$$

$$J_{1z} |K_1, j_1, m_1\rangle = m_1 \hbar |K_1, j_1, m_1\rangle$$

$$J_{1\pm} |K_1, j_1, m_1\rangle = \hbar \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1\pm 1)} |K_1, j_1, m_1\pm 1\rangle$$

Sabemos también el espacio de Hilbert \mathcal{E} , donde vive el sistema 1 se puede compartmentar según sus números cuánticos (K_1, j_1) :

$$\mathcal{E}_1 = \sum_{(+)} \mathcal{E}_1(K_1, j_1)$$

De forma que:

$$- La \dim \mathcal{E}_1(K_1, j_1) = 2j_1 + 1$$

- Cada $\epsilon_{ij}(K_i, j_i)$ es invariante bajo \vec{J} , y por tanto respecto a cualquier operador que dependa exclusivamente de J :
Inv. bajo $F(\vec{J})$, y en particular bajo J^2, J_z, J^\pm
- En cada $\epsilon_{ij}(K_i, j_i)$ podemos encontrar una representación matricial para cualquier operador $F(\vec{J})$, que serán matrices $(2j_i+1) \times (2j_i+1)$ e independientes de K .

Nota: Vamos a usar el último punto como excusa para ahorrarnos escribir K_1, K_2, \dots en todo este apartado. Realmente deberíamos, porque realmente hay física más allá del momento angular, pero como ésto es lo único que nos interesa en este tema, nos tomamos esa libertad.

De manera análoga, para el sist. 2 tendremos:

$$J_z^2 |j_2, m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2 |j_2, m_2\rangle \xrightarrow{\text{realmente}} |K_2, j_2, m_2\rangle$$

$$J_{zz} |j_2, m_2\rangle = m_2 \hbar |j_2, m_2\rangle$$

$$J_{z\pm} |j_2, m_2\rangle = \hbar \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)} |j_2, m_2 \pm 1\rangle$$

$$\epsilon_2 = \sum_{\oplus} \epsilon_2(j_2)$$

El espacio de Hilbert completo será:

$$\mathcal{E} = \sum_{\oplus} \mathcal{E}(j_1, j_2) = \sum_{\oplus} \mathcal{E}_1(j_1) \times \mathcal{E}_2(j_2)$$

Por otro lado, en este espacio de Hilbert completo podemos definir el momento angular total:

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

que será un momento angular:

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

y por tanto tendremos la base $|J, M\rangle$:

$$J^2 |J, M\rangle = J(J+1) \hbar^2 |J, M\rangle$$

$$J_z |J, M\rangle = M \hbar |J, M\rangle$$

$$J_{\pm} |J, M\rangle = \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)} |J, M\rangle$$

$$\mathcal{E} = \sum_{\oplus} \mathcal{E}(J)$$

y sus comutadores: (todo esto es totalmente análogo a $S, + S_z$)

$$[J_x, J_{1z}] = [J_x, J_{2z}] = 0$$

$$[J^2, J_{1z}] = [J^2, J_{2z}] = 0$$

pero... $[J^2, J_{1z}] = -[J^2, J_{2z}] \neq 0$

Esto último viene de nuevo del término cruzado en J^2 :

$$J^2 = (J_1 + J_2)^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2$$

que nos será útil poner como: (ahor no lo usaremos)

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}$$

Este conmutador no nulo nos dice que J^2 no es compatible con J_{1z} y J_{2z} , no podemos medir a la vez el momento angular total y sus tercera componentes individuales. Por tanto solvemos a tener la dicotomía de elegir bases:

- ① CCOC $\{J_1^2, J_2^2; J_{1z}, J_{2z}\}$ en la que cada sistema tiene su momento angular total y proyectado bien definido:

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle ; \quad E(j_1, j_2) = \sum_{\oplus} E_1(j_1) \times E_2(j_2)$$

- ② CCOC $\{J_1^2, J_2^2; J^2, J_z\}$ en la que el sistema completo tiene un momento total y proyectado bien definido:

$$|j_1, j_2; J, M\rangle ; \quad E(j_1, j_2) = \sum_{\oplus} E(J)$$

Nuestro objetivo es, dados j_1 y j_2 , encontrar qué valores posibles tenemos para J y M , y cuál será la base de autoestados de $\{J^2, J_z\}$.

Nota: tenemos dos formas de descomponer el mismo $E(j_1, j_2)$.

4.3.1. Valores de J y M

Empezamos por M , que como vimos en el caso de espines $\frac{1}{2}$ era más simple porque commute con J_{iz} . De hecho, simplemente aplicando J_z :

$$J_z |m_1, m_2\rangle = (J_{1z} + J_{2z}) |m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2) \hbar |m_1, m_2\rangle$$

vemos que los estados $|m_1, m_2\rangle$ tambien son autoestados de J_z con autovalor

$$M = m_1 + m_2$$

y como sabemos que los m_i varían a intervalos de $\frac{1}{2}$ pero acotados a $|m_i| \leq j_i$, tendremos que los valores posibles de M serán:

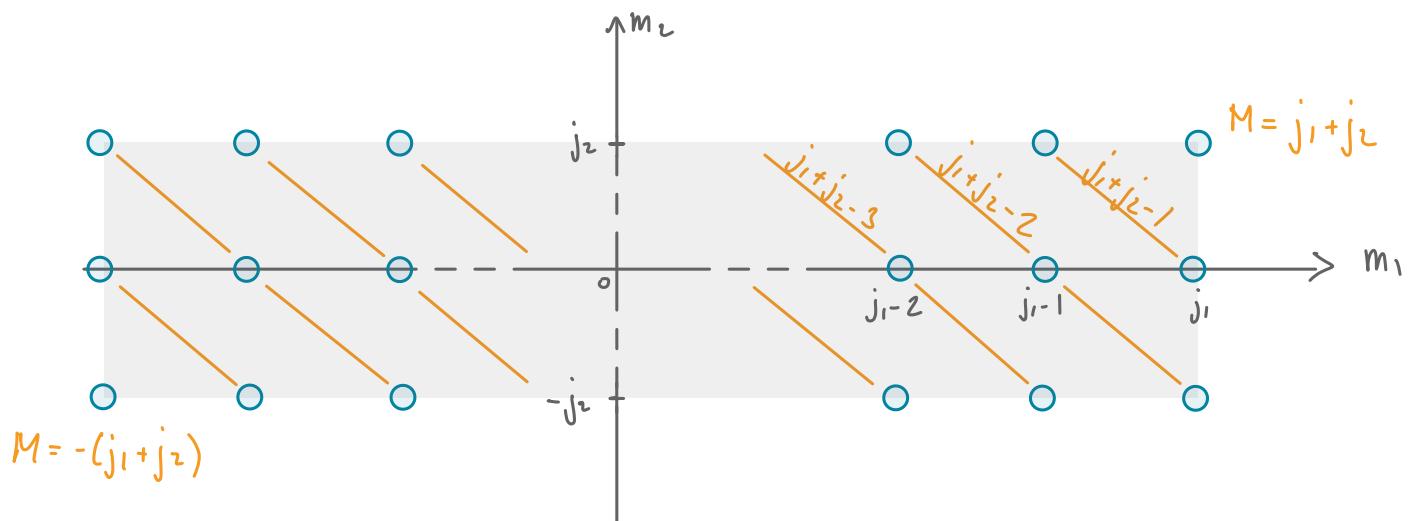
$$-(j_1 + j_2), -(j_1 + j_2 - 1), \dots, M, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2$$

De aquí sacamos una consecuencia importante:

M (y por tanto J) tendrán valores enteros al sumar dos momentos angulares enteros o dos semienteros, y sólo tendrán valores semienteros cuando tengamos uno de cada.

Nota: la siguiente parte para demostrar los valores de J me parece muy liosa en el Cohen. Le intento aligerar basándome más en la figura, a ver si lo consigo...

Es interesante dibujar los valores posibles de M en el plano (m_1, m_2) :



Tenemos que:

- Todos los estados posibles están en el cuadrado gris de $(2j_1+1) \times (2j_2+1)$.
- A lo largo de las líneas naranjas el valor de M se mantiene constante. Básicamente estamos pasando una unidad de m_1 a la otra.

- La degeneración de cada M va cambiando:

↳ El extremo sólo se da una vez, cuando los dos m_i están alineados.

↳ Al bajar M en una unidad, aumentamos su degeneración en 1. Por ejemplo, el caso $M = j_1 + j_2 - l$ lo podemos obtener reduciendo cada m_i en uno:

$$|j_1, j_2 - l\rangle \text{ ó } |j_1 - 1, j_2\rangle$$

↳ Este juego de bajar M , subir su degeneración seguirá así hasta que sature, que sabemos que lo tiene que hacer porque la degeneración de $-M$ es la misma, así que tendrá que bajar hasta l otra vez.

El máximo de este conteo, es decir la degeneración máxima, nos la marcará el j_1 más pequeño. Por ejemplo si $j_2 \leq j_1$, la diagonal más grande que podemos dibujar tendrá una longitud de

$$2j_2 + l \leftarrow \text{degeneración máxima}$$

Nota: una forma de ver esto es ponerse en el extremo $(j_1, -j_2)$ e ir pasando una unidad de m_1 a m_2 hasta llegar a $m_2 = j_2$ 2 $j_2 + l$ valores después (o hasta que lleguemos a $m_1 = -j_1$, si $j_1 < j_2$)

Combinando toda esta información, podemos sacar los valores posibles de J (pero aviso, ¡es tricky!):

1. Como \vec{J} es un momento angular sabemos que M variará entre $-J \leq M \leq J$. Pero como no hay $M > j_1 + j_2$, tendremos:

$$J \leq j_1 + j_2$$

2. El estado $M = j_1 + j_2$ sólo aparece una vez (no está degenerado). De hecho sabemos que será

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle \otimes |j_2, j_2\rangle$$

3. Como sabemos que existe el estado anterior, también existirá el estado con el mismo $J = j_1 + j_2$ y $M = j_1 + j_2 - l$. Pero vemos que este nivel de M tiene una degeneración de l , así que tendrá que existir otro estado con esta M .

Pero este estado tendrá que ser ortogonal al anterior. Como tiene la misma M , tendrá que tener J distinto, que para cumplir con los límites de M tendrá que tener $J = j_1 + j_2 - l$.

Ya tenemos dos valores de J : $j_1 + j_2, j_1 + j_2 - l$.

4. Repitiendo los pasos anteriores, vemos que mientras bajar M aumente la degeneración necesitando la existencia de un J más bajo.

5. Pero hemos dicho que la degeneración se para. Como la degeneración máxima era $2j_2+1$ (asumiendo $j_2 \leq j_1$), que sabemos que va subiendo de uno en uno, habremos encontrado $2j_2$ valores posibles de J , siendo el más pequeño

$$J_{\min} = J_{\max} - 2j_2 = j_1 + j_2 - 2j_2 = j_1 - j_2$$

$$\text{y lo mismo si } j_1 < j_2 \Rightarrow J_{\min} = |j_1 - j_2|$$

6. Juntando todo, los valores de J que nos encontraremos serán:

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$

Cada uno con sus $2J+1$ valores de M , que podemos comprobar que suman lo que deben:

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

Demo ($j_2 \leq j_1$):

$$\sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2J+1) = \sum_{i=0}^{2j_2} [2(j_1 - j_2 + i) + 1] = (2j_2 + 1)(2j_1 - 2j_2 + 1) + 2 \frac{(2j_2 + 1)2j_2}{2} = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

4.3.2. Autovectores de J^2 y J_z

Ahora que sabemos los valores posibles de J , sabemos que podemos descomponer el espacio de Hilbert completo como:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(J=j_1+j_2) \oplus \mathcal{E}(J=j_1+j_2-1) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}(J=|j_1-j_2|)$$

Y que existirá una base $|JM\rangle$, que estará relacionada con la $|m_1, m_2\rangle$ anterior como:

$$|JM\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | JM \rangle$$

Los coeficientes que nos salen de este cambio de base tienen nombre:

coef. CLEBSH-GORDAN $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; JM \rangle$

Notas:

- Hemos vuelto a poner explícitamente j_1 y j_2 para recordarnos que estos coef. dependen de ellos. Tendremos coef. distintos al combinar dos $s=1/2$ o dos $s=1$, aunque ambos nos puedan dar un $|00\rangle$.

- El convenio es tomarlos reales, de forma que son reversibles

$$\langle JM | m_1, m_2 \rangle = \langle m_1, m_2 | JM \rangle$$

- Están tabulados y simplemente tendríamos que aprender a usarlos. Pero como estamos en clase, vamos a aprender también cómo sacarlos. Sin embargo esto lo hacemos mejor con un par de ejemplos.

→ Cómo usar los CG: ejemplo $\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}$

Ler la tabla y recuperar singlete + triplete.

→ Cómo calcular los CG: ejemplo $1 \times \frac{1}{2}$.