

8 Momento angular y rotaciones

El momento angular en física moderna aparece en varios contextos. Espectroscopía atómica, molecular y nuclear. Problemas de dispersión y la teoría de grupos desarrollada en el contexto de momento angular puede extenderse a física de partículas.

8.1 Rotaciones espaciales

Asumiremos del punto de vista de que el sistema físico es rotado dejando quieto el sistema de referencia. Una rotación espacial de un vector alrededor de un eje $\hat{\mathbf{e}}_{x,y,z} = \hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}$ puede escribirse en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & R_{ij} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}, \quad (186)$$

donde $R \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ es una matriz ortogonal que cumple

$$\frac{RR^T}{\sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2}} = \frac{R^T R}{\sqrt{V_x'^2 + V_y'^2 + V_z'^2}} = I,$$

es decir mantiene la longitud de un vector aunque sea rotado. **Puede observarse que rotaciones consecutivas alrededor del mismo eje conmutan mientras que alrededor de ejes diferentes no.** Cuando definimos por ejemplo de $R_z(\phi)$ hablamos de una rotación alrededor del eje Z con ϕ positivo en sentido antihorario,

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\text{sen}\phi & 0 \\ \text{sen}\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (187)$$

y donde $R_x(\phi), R_y(\phi)$ se obtienen de (187) poniendo el 1 en las distintas posiciones de la diagonal R_{11}, R_{22} , haciendo cero la fila y columna donde queda y ocupando los demás elementos de la matriz con los elementos de la submatriz $\begin{pmatrix} \cos\phi & -\text{sen}\phi \\ \text{sen}\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$ en el mismo orden. Para producir una rotación infinitesimal se hace un desarrollo $\cos\epsilon = 1 - \frac{\epsilon^2}{2} + \mathcal{O}(\epsilon^3)$, $\text{sen}\epsilon = \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^3)$ y conservando hasta el segundo orden. Puede verse por cálculo directo que a orden ϵ^2

$$\begin{aligned} R_i(\epsilon_1)R_i(\epsilon_2) - R_i(\epsilon_2)R_i(\epsilon_1) &= 0, \quad i, j = x, y, z \\ R_i(\epsilon)R_j(\epsilon) - R_j(\epsilon)R_i(\epsilon) &= \epsilon_{ijk}R_k(\epsilon) - (R(0) \equiv I), \end{aligned} \quad (188)$$

o sea comprobamos para rotaciones infinitesimales lo mencionado para conmutación de rotaciones.

8.2 Rotación de un sistema en mecánica cuántica

Si ahora rotamos un sistema físico, su ket representativo en el espacio de Hilbert debe cambiar. Pero ahora la rotación no se realizará con una matriz ortogonal de 3x3 sino con un operador de rotación asociado a la matriz R de la rotación espacial del sistema. Así tendremos

$$|\psi\rangle' = \hat{D}(R)|\psi\rangle, \quad (189)$$

la representación matricial de \hat{D} dependerá de la dimensión del espacio de Hilbert del sistema en cuestión. Ya sabemos que cualquier operador que realice una transformación de simetría debe ser unitario pues así los dos observables que son unitariamente equivalentes ($\hat{O} \rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{O} \hat{U}$) y tendrán los mismos autovalores con autovectores conectados por dicha transformación ($|\lambda_n\rangle \rightarrow \hat{U}|\lambda_n\rangle$). **Esto físicamente quiere decir que si transformo el sistema y a su vez el aparato de medida seguiré midiendo lo mismo, siempre que exista una simetría asociada a la transformación.**

Para ver que forma tiene dicho operador en el caso de rotaciones, sigamos el mismo camino que antes para los desplazamiento espaciales y temporales del sistema, donde comenzamos con transformaciones infinitesimales y planteamos que en general para una transformación asociada a una simetría (en el caso de rotaciones isotropía del espacio) el operador actuante en el espacio de Hilbert tiene la forma

$$\hat{U}_\epsilon = \hat{I} - i\epsilon\hat{G}, \quad (190)$$

donde al operador hermítico \hat{G} se lo denomina generador de la transformación. Donde para el caso de una partícula (Hasta el momento no hemos extendido a un sistema de partículas) vimos que para translaciones infinitesimales por ejemplo en la dirección X era

$$\hat{G} = \frac{\hat{p}_x}{\hbar}, \quad \epsilon = \delta x,$$

que puede extenderse a una translación infinitesimal a lo largo de una dirección $\delta\mathbf{r}$ como

$$\hat{U}_{\delta\mathbf{r}} = \hat{I} - i\delta\mathbf{r} \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar},$$

y para translaciones o evolución temporal teníamos

$$\hat{G} = \frac{\hat{H}}{\hbar}, \quad \epsilon = \delta t.$$

Ahora para rotaciones espaciales vamos a definir el generador de una rotación alrededor del eje $k = x, y, z$ como la componente del momento angular \hat{J}_k y así tendremos

$$\hat{G} = \frac{\hat{J}_k}{\hbar}, \quad \epsilon = \delta\phi,$$

y una rotación infinitesimal de ángulo $\delta\phi$ alrededor de un eje $\hat{\mathbf{e}}$ será

$$\hat{D}(\delta\phi, \hat{\mathbf{e}}) = \hat{I} - i\hat{\mathbf{e}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{J}}}{\hbar} \delta\phi.$$

Ahora cualquier transformación infinitesimal ϵ puede aplicarse en forma sucesiva N veces con $N \rightarrow \infty$ para obtener una finita $\Delta\epsilon$ si pensamos que $\epsilon = \frac{\Delta\epsilon}{N}$ y usamos la formula de Euler $e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n$

$$\begin{aligned} \hat{U}(\Delta\epsilon) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \overbrace{\hat{U}\left(\frac{\Delta\epsilon}{N}\right) \dots \hat{U}\left(\frac{\Delta\epsilon}{N}\right)}^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\hat{I} - i\frac{\Delta\epsilon}{N} \hat{G} \right)^N = e^{-\frac{i\hat{G}\Delta\epsilon}{\hbar}} \\ &= \hat{I} - \frac{i\hat{G}\Delta\epsilon}{\hbar} - \frac{\hat{G}^2\Delta\epsilon^2}{\hbar^2} + \dots \end{aligned} \quad (191)$$

$$\hat{U}(\Delta\epsilon) = e^{-\frac{i\hat{G}\Delta\epsilon}{\hbar}}$$

Para el caso particular de una rotación de ángulo ϕ alrededor del eje $k = x, y, z$ tendremos

$$\hat{D}_k(\phi) = e^{-\frac{i\hat{J}_k\phi}{\hbar}}. \quad (192)$$

Es importante notar que no hemos definido el momento angular mediante el principio de correspondencia $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$, porque entonces no serviría para un sistema que no tenga análogo clásico.

Nos restaría ver ahora cuales son las relaciones de conmutación entre las componentes del momento angular \hat{J}_k , para lo cual recordemos lo hecho para matrices de rotación en la Ec.(188) y la correspondencia establecida entre $R \longleftrightarrow \hat{D}(R)$ al comienzo de ésta sección. Tendremos

$$\hat{D}_i(\delta\phi)\hat{D}_j(\delta\phi) - \hat{D}_j(\delta\phi)\hat{D}_i(\delta\phi) = \epsilon_{ijk} \hat{D}_k(\phi) - \hat{I},$$

y donde si usamos (192) con $\phi = \delta\phi$ desarrollada a 2do orden $\hat{D}_k(\phi) \approx \hat{I} - \frac{i\hat{J}_k\delta\phi}{\hbar} + \frac{1}{2} \left(\frac{i\hat{J}_k\delta\phi}{\hbar} \right)^2$, veremos que los terminos de primer orden se cancelan y que si igualamos coeficientes de segundo orden obtendremos

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k. \quad (193)$$

conocidas como relaciones de conmutación fundamentales del momento angular.

A lo largo de esta sección hemos estado asumiendo en forma implícita que el conjunto de las $\{D(R)\}$ tiene una estructura de grupo similar al conjunto de las $\{R\}$, ya volveremos sobre este punto más adelante.

Ejemplos:

El sistema de menor dimensión donde las relaciones de conmutación (193) pueden *realizarse* es con $N = 2$ y es el de una partícula con spin $1/2$. Ahora tendremos

$$D_z(\phi) = e^{\frac{-i\hat{S}_z\phi}{\hbar}}$$

y para ver como impacta el rotar el sistema en una medida de las componentes de $\hat{\mathbf{S}}$ estudiemos como cambian los valores esperados

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\rightarrow |\psi'\rangle = D_z(\phi) |\psi\rangle \\ \langle \hat{S}_k \rangle &\rightarrow \langle \hat{S}_k \rangle' = \langle \psi | e^{\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}} \hat{S}_k e^{\frac{-i\hat{S}_z\phi}{\hbar}} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Para calcular ésto existe una relación útil llamada lema de Baker-Hausdorff

$$e^{-i\lambda\hat{G}} \hat{O} e^{i\lambda\hat{G}} = \hat{O} + i\lambda[\hat{G}, \hat{O}] + \frac{(i\lambda)^2}{2!} [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{O}]] + \dots + \left(\frac{i^n \lambda^n}{n!}\right) \underbrace{[\hat{G}, [\hat{G}, [\hat{G}, \dots [\hat{G}, \hat{O}]]]]}_{N\text{conmutadores}} + \dots$$

donde \hat{G} es un operador hermítico, $\lambda \in \mathbb{R}$, y \hat{O} un observable, la cual no demostraremos.

Para el caso particular $\hat{O} = \hat{S}_k$, $\hat{G} = \hat{S}_z$ se pueden ir usando las relaciones de conmutación $[\hat{S}_z, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{zjk}\hat{S}_k$ y se obtendrá

$$e^{\frac{i\hat{S}_z\phi}{\hbar}} \hat{S}_k e^{\frac{-i\hat{S}_z\phi}{\hbar}} = \begin{cases} \hat{S}_z, k = z \\ \hat{S}_x \cos\phi - \hat{S}_y \sin\phi, k = x \\ \hat{S}_y \cos\phi + \hat{S}_x \sin\phi, k = y \end{cases}, \quad (194)$$

con lo cual

$$\begin{pmatrix} \langle \hat{S}_x \rangle' \\ \langle \hat{S}_y \rangle' \\ \langle \hat{S}_z \rangle' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \hat{S}_x \rangle \\ \langle \hat{S}_y \rangle \\ \langle \hat{S}_z \rangle \end{pmatrix}, \quad (195)$$

o sea el valor esperado del spin se comporta como un vector clásico frente a rotación. **Esto se puede extenderse en general a un momento angular $\hat{\mathbf{J}}$ cualquiera.**

Una observación para el caso del spin, es que cuando tengo un estado desarrollado en la base de \hat{S}_z $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \\ (\hat{D}_z(\phi) = e^{\frac{-i\hat{S}_z\phi}{\hbar}}) |\psi\rangle &= c_+ e^{-\frac{i\phi}{2}} |+\rangle + c_- e^{\frac{i\phi}{2}} |-\rangle \\ \phi = 2\pi &\Rightarrow |\psi'\rangle = -|\psi\rangle, \end{aligned}$$

o sea rotando en 2π no vuelvo al estado original pero si se obtiene el mismo valor esperado pues $e^{i\pi} = -1$ no tiene efecto. Para volver al estado inicial debemos hacer una rotación de 4π . Esta particularidad del signo menos en el estado al rotar 2π ha sido comprobada experimentalmente en experimentos de interferencia de haz de neutrones térmicos. Quizas esto es un indicio que que estamos tratando con un observable no clásico y no podemos pensar clásicamente.

Finalmente si recordamos el problema de precesión de una partícula con spín $1/2$ en un campo magnético constante a lo largo del eje Z, teniamos un hamiltoniano $\hat{H} = \omega \hat{S}_z, \omega = \frac{|q|B}{mc}$ y entonces en este caso el operador evolución coincide con el de rotación

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{S}_z\omega t} = \hat{D}_z(\phi = \omega t),$$

y así utilizando las Ecs.(195) obtendremos

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_x \rangle' &= \langle \psi(t) | \hat{S}_x | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{S}_x | \psi(0) \rangle \cos\omega t - \langle \psi(0) | \hat{S}_y | \psi(0) \rangle \sin\omega t \\ \langle \hat{S}_y \rangle' &= \langle \psi(t) | \hat{S}_y | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{S}_x | \psi(0) \rangle \sin\omega t + \langle \psi(0) | \hat{S}_y | \psi(0) \rangle \cos\omega t \\ \langle \hat{S}_z \rangle' &= \langle \psi(t) | \hat{S}_z | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{S}_z | \psi(0) \rangle, \end{aligned}$$

con lo que comprobamos nuevamente la precesión y que los valores medios vuelven a repetirse en $\phi = \omega T = 2\pi$.

8.3 Formalismo de Pauli de dos componentes para $S = 1/2$

Si trabajamos en la representación matricial en la base de autovalores de \hat{S}_z $\mathcal{B} = \{|+\rangle, |-\rangle\}$, tanto los kets como las componentes de $\hat{\mathbf{S}}$ se pueden representar por matrices

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= (c_+ = \langle + | \psi \rangle) |+\rangle + (c_- = \langle - | \psi \rangle) |-\rangle \rightarrow \chi = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \\ |+\rangle &\rightarrow \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |-\rangle \rightarrow \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \langle \psi | \rightarrow \chi^\dagger = (c_+^* \ c_-^*), \end{aligned}$$

mientras que los operadores $\hat{\mathbf{S}}$ tendran matrices que los representaran como

$$\begin{aligned} \hat{S}_z &= \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|) \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_z \\ \hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|) \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_x \\ \hat{S}_y &= \frac{i\hbar}{2} (-|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|) \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \end{aligned}$$

donde las $\sigma_{i=x,y,z}$ se denominan matrices de Pauli y tienen las siguientes propiedades

$$\begin{aligned}\sigma_i^2 &= I \\ \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i &= 0, \quad i \neq j \\ \{\sigma_i, \sigma_j\} &= 2\delta_{ij} \\ [\sigma_i, \sigma_j] &= 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k,\end{aligned}$$

donde esta última es equivalente a las relaciones de conmutación entre componentes de \hat{S}_i .

Finalmente si tenemos una rotación de ángulo ϕ alrededor de un eje \hat{n} podemos expresarla en las matrices definidas anteriormente como

$$e^{\frac{-i\hat{S}\cdot\hat{n}\phi}{\hbar}} \rightarrow e^{\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{n}\phi}{2}} = I\cos\frac{\phi}{2} - i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{n}\sin\frac{\phi}{2},$$

donde hemos usado la expansión de la exponencial y la propiedad que puede comprobarse

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

Por ejemplo si $\hat{n} = \hat{k}$ tendremos

$$\begin{aligned}e^{\frac{-i\sigma_z\phi}{2}} &= I\cos\frac{\phi}{2} - i\sigma_z\sin\frac{\phi}{2} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} - i\sin\frac{\phi}{2} & 0 \\ 0 & \cos\frac{\phi}{2} + i\sin\frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \\ e^{\frac{-i\sigma_z\phi}{2}}\chi_{\pm} &= e^{\mp i\frac{\phi}{2}}\chi_{\pm} \equiv \chi_{\pm}.\end{aligned}$$

Es importante mencionar que las σ_i no cambian en las rotaciones pues son matrices fijas y no deben ser consideradas componentes de un vector, lo que si se comporta como la componente de un vector frente a la rotación es $\chi^\dagger\sigma_i\chi$. Así cuando intentamos transformar alguna, por ejemplo

$$e^{\frac{i\sigma_z\phi}{2}}\sigma_x e^{\frac{-i\sigma_z\phi}{2}} = \sigma_x\cos\phi - \sigma_y\sin\phi,$$

donde hemos usado el lema de Baker-Hausdorff, y vemos que se obtendría lo mismo que en la Ec.(194) cambiando por la representación matricial. **O sea las matrices son las mismas en el sistema rotado.**

8.4 Autovalores y autovectores del momento angular

Hasta ahora hemos estudiado el momento angular en un espacio de dimensión $N = 2$. Ahora generalizamos. Notemos que aplicando las reglas de conmutación puede demostrarse que

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{J}}^2 &= \hat{J}_x \hat{J}_x + \hat{J}_y \hat{J}_y + \hat{J}_z \hat{J}_z = \sum_i \hat{J}_i \hat{J}_i \\
 [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_k] &= \sum_i [\hat{J}_i \hat{J}_i, \hat{J}_k] = \sum_i (\hat{J}_i \hat{J}_i \hat{J}_k - \hat{J}_k \hat{J}_i \hat{J}_i) \\
 &= \sum_i (\hat{J}_i \hat{J}_i \hat{J}_k - i\hbar \epsilon_{kij} \hat{J}_j \hat{J}_i - \hat{J}_i \hat{J}_k \hat{J}_i) \\
 &= \sum_i (\cancel{\hat{J}_i \hat{J}_i \hat{J}_k} - i\hbar \epsilon_{kij} \hat{J}_j \hat{J}_i - i\hbar \epsilon_{kij} \hat{J}_i \hat{J}_j - \cancel{\hat{J}_i \hat{J}_i \hat{J}_k}) \\
 &= i\hbar \sum_i \hat{J}_j \hat{J}_i (\epsilon_{kji} - \epsilon_{kji}) = 0,
 \end{aligned}$$

entonces podemos hallar una base común a $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$ de autovectores, que los llamamos a, b respectivamente, así

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{J}}^2 |ab\rangle &= a |ab\rangle \\
 \hat{J}_z |ab\rangle &= b |ab\rangle.
 \end{aligned}$$

Es conveniente introducir los denominados operadores escalera (antes vistos para el spin)

$$\hat{J}_\pm \equiv \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y, \quad (196)$$

y usando las reglas de conmutación más lo visto arriba se ve que cumplen

$$\begin{aligned}
 [\hat{J}_+, \hat{J}_-] &= 2\hbar \hat{J}_z \\
 [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= \pm \hbar \hat{J}_\pm \\
 [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_\pm] &= 0,
 \end{aligned} \quad (197)$$

de donde puede comprobarse el efecto del operador escalera

$$\begin{aligned}
 \hat{J}_z \hat{J}_\pm |ab\rangle &= ([\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] + \hat{J}_\pm \hat{J}_z) |ab\rangle \\
 &= (\pm \hbar \hat{J}_\pm + b \hat{J}_\pm) |ab\rangle \\
 &= (b \pm \hbar) \hat{J}_\pm |ab\rangle,
 \end{aligned}$$

o sea $\hat{J}_\pm |ab\rangle$ siguen siendo autovectores s de \hat{J}_z pero con autovalores $b \pm \hbar$, de ahí su nombre. Notemos que comparando con otros casos donde aparecían reglas de conmutación por ejemplo

$$\begin{aligned} [\hat{x}_i, \hat{U}(\mathbf{d}) = e^{\frac{-i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{d}}] &= d_i \hat{U}(\mathbf{d}) \\ [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] &= \hat{a}^\dagger \\ [\hat{N}, \hat{a}] &= -\hat{a}, \end{aligned}$$

para el caso de una traslación o el oscilador armónico, donde se incrementa una distancia d_i al autovalor del operador posición o en número de excitaciones o autovalores del operador número en ± 1 , aca las relaciones (197) tienen la misma estructura y dichos operadores incrementan o decrementan los autovalores de \hat{J}_z en $\pm \hbar$.

Dado que estos operadores conmutan con $\hat{\mathbf{J}}^2$ no alteran los autovalores de dicho operador, así tendremos

$$\hat{J}_\pm |ab\rangle = c_\pm |ab \pm \hbar\rangle, \quad (198)$$

siendo c_\pm constantes de proporcionalidad a determinar y no autovalores pues vemos cambiar el ket.

Veamos como obtener los autovalores de $\hat{\mathbf{J}}^2 = \sum_i \hat{J}_i^2, \hat{J}_z$. Por la relación entre ambos operadores es claro que $a \geq b^2$ entonces el proceso de aplicar los operadores escalera como en (198) no puede ser indefinido. Notemos que puede obtenerse, usando las definiciones (196) que

$$\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_+^\dagger + \hat{J}_+^\dagger \hat{J}_+),$$

donde como

$$\langle \hat{J}_+ \hat{J}_+^\dagger \rangle = \|\hat{J}_+^\dagger |\psi\rangle\|^2 \geq 0, \quad \langle \hat{J}_+^\dagger \hat{J}_+ \rangle = \|\hat{J}_+ |\psi\rangle\|^2 \geq 0,$$

tendremos

$$\langle ab | \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 | ab \rangle \geq 0,$$

que esta de acuerdo con los observado de que $a \geq b^2$. Esto nos dice que para un determinado a tendremos un b_{max} de manera que

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ |ab_{max}\rangle &= 0 \\ \text{y aplicando } \hat{J}_- \Rightarrow (\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z) |ab_{max}\rangle &= (a - b_{max}^2 - \hbar b_{max}) |ab_{max}\rangle = 0 \\ |ab_{max}\rangle \neq 0 \implies a - b_{max}^2 - \hbar b_{max} &= 0 \\ a &= b_{max} (b_{max} + \hbar), \end{aligned}$$

y siguiendo un procedimiento similar pero teniendo en cuenta que $\hat{J}_+ \hat{J}_- |ab_{min}\rangle = 0$ llegaremos a

$$a = b_{min} (b_{min} - \hbar),$$

de donde finalmente $b_{max} = -b_{min}$ y así

$$b_{min} \leq b \leq b_{max},$$

pero $b_{max} = b_{min} + n\hbar$ para que en $\hat{J}_+^n |ab_{min}\rangle \rightarrow |ab_{max}\rangle$ de donde usando $b_{max} = -b_{min}$ obtendremos $b_{max} = \frac{n\hbar}{2} \equiv j\hbar$ y así finalmente $a = \hbar^2 j(j+1)$. También definimos $b = m\hbar$ con lo que resumiremos tendremos

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |ab\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |ab\rangle \\ \hat{J}_z |ab\rangle &= m\hbar |ab\rangle \\ m &= j, j-1, \dots, -j+1, -j, \end{aligned} \tag{199}$$

$j = \frac{n}{2}$ un entero o semientero según demos un número par o impar de pasos para pasar de b_{min} a b_{max} .

Esta cuantización del momento angular es consecuencia de las relaciones de conmutación que a su vez provienen de la no conmutatividad de las rotaciones y de definir al momento angular como generador de las mismas.

8.5 Elementos de matriz de $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$

La clase anterior estudiamos los autovalores y autovectores de $\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$, ahora calcularemos sus elementos de matriz. Tomaremos la base de autovectores $\mathcal{B} = \{|jm\rangle\}$ y tendremos

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

mientras que para obtener las constantes antes definidas c_{\pm} donde

$$\hat{J}_{\pm} | jm \rangle = c_{\pm} | jm \pm 1 \rangle,$$

ahora necesitamos (usando una expresión de la subsección anterior $\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z$)

$$\begin{aligned}\langle j'm' | \hat{J}_+ \hat{J}_+ | jm \rangle &= \langle j'm' | \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z | jm \rangle \\ &= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m].\end{aligned}$$

Ahora vemos que $\hat{J}_+ | jm \rangle = c_{jm}^+ | jm + 1 \rangle$ y entonces usando la ecuación previa tendremos

$$\begin{aligned}\langle jm | \hat{J}_+ \hat{J}_+ | jm \rangle &= |c_{jm}^+|^2 \langle jm + 1 | jm + 1 \rangle = |c_{jm}^+|^2 \\ |c_{jm}^+|^2 &= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m] = \hbar^2 (j-m)(j+m+1),\end{aligned}$$

donde hemos supuesto que la base $\mathcal{B} = \{|jm\rangle\}$ está normalizada, así como estamos definiendo c_{jm}^+ a menos de una fase no fijada, podemos tomarlo com real y tendremos

$$c_+^{jm} = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \quad (200)$$

y de igual manera puede demostrarse que

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

lo cual puede resumirse

$$\langle j'm' | \hat{J}_{\pm} | jm \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \delta_{jj'} \delta_{m', m \pm 1}.$$

8.6 Estructura de grupo

Las matrices de rotación $R \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ con la propiedad $RR^T = R^T R = I$ forman el grupo de matrices ortogonales y el operador correspondiente $\hat{D}(R)$ postulamos que tienen las mismas propiedades de grupo

- Identidad:

$$R \times I = I \times R = R \Rightarrow \hat{D}(R) \times \hat{I} = \hat{I} \times \hat{D}(R) = \hat{D}(R)$$

(el producto \times define cosas distintas segun el espacio donde estamos)

- Clausura:

$$R_1 R_2 = R_3 \Rightarrow \hat{D}(R_1) \hat{D}(R_2) = \hat{D}(R_3)$$

(producto de matrices ortogonales lo es también)

- Existe inversa:

$$\exists R^{-1} \mid RR^{-1} = R^{-1}R = I \Rightarrow \exists \hat{D}(R^{-1}) \mid \hat{D}(R) \hat{D}(R^{-1}) = \hat{D}(R^{-1}) \hat{D}(R) = \hat{I}$$

(rotación opuesta en ángulo)

- Asociatividad:

$$\begin{aligned} R_1(R_2 R_3) &= (R_1 R_2) R_3 = R_1 R_2 R_3 \Rightarrow \\ \hat{D}(R_1)(\hat{D}(R_2) \hat{D}(R_3)) &= (\hat{D}(R_1) \hat{D}(R_2)) \hat{D}(R_3) = \hat{D}(R_1) \hat{D}(R_2) \hat{D}(R_3) \end{aligned}$$

SO(3):

Veamos cuantos parámetros independientes necesitamos para definir una matriz ortogonal $R = \{R_{ij}\}$.

Tenemos $3 \times 3 = 9$ elementos de matriz pero la relación de ortogonalidad nos conduce a 6 ecuaciones independientes pues de las 9 obtenidas debemos eliminar tres pues la relación

$$RR^T = R^T R = I$$

es simétrica y sólo consideramos los $3 + 2 + 1$ elementos del triángulo superior de RR^T .

Así que tenemos $9 - 6 = 3$ parámetros independientes.

Esto también coincide con el hecho de que para determinar una rotación alrededor de un eje \hat{n} necesitamos dar los ángulos polar y azimutal del vector más el ángulo ϕ de rotación. Además tenemos que

$$\det(RR^T) = \det(R)\det(R^T) = \det(R)^2 = \det(I) = 1 \Rightarrow \det(R) = \pm 1,$$

notemos que por ejemplo que

$$\det(R_z(\phi)) = \det \begin{pmatrix} \cos\phi & -\operatorname{sen}\phi & 0 \\ \operatorname{sen}\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \cos\phi^2 + \operatorname{sen}\phi^2 = 1,$$

así que para las matrices de rotación del determinante es 1. La inversión espacial tiene asociada también una matriz ortogonal

$$P = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

pero tiene determinante igual a -1.

Por ésto se denomina al grupo de matrices de rotación $SO(3)$ donde S para indicar que son *especiales* con $\det=1$, O viene de ortogonal y el 3 indica que el espacio es de dimensión 3, o sea toda matriz de rotación podrá ser escrita en término de 3 matrices base y que además los vectores sobre las que actúan son de un espacio de 3 dimensiones.

SU(2)

Si bien podemos caracterizar una rotación espacial por matrices R de 3x3 que pertenecen a $SO(3)$, también estudiamos como caracterizar rotaciones en un espacio de dimensión 2 donde los vectores toman la forma

$$\chi = c_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

con $c_{\pm} \in \mathbb{C}$. Allí las matrices que producen la rotación tenían la forma

$$U(\hat{n}, \phi) = e^{-\frac{i\sigma \cdot \hat{n}\phi}{2}} = I \cos\frac{\phi}{2} - i\sigma \cdot \hat{n} \operatorname{sen}\frac{\phi}{2},$$

que puede expresarse en forma matricial usando la identidad y las matrices de Pauli en términos de $\hat{n}_{x,y,z}$ y ϕ pero teniendo en cuenta que $\hat{n}_x^2 + \hat{n}_y^2 + \hat{n}_z^2 = 1$. Claramente esa matriz $\in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ es unitaria pues $U^\dagger = e^{\frac{i\sigma \cdot \hat{n}\phi}{2}} = U^{-1}$ y conserva ahora la norma (no la longitud como en el caso de R) de un vector es decir

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1.$$

Una matriz unitaria $\in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ en general tendrá la forma

$$M = e^{ic} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, c \in \mathbb{R}, |a|^2 + |b|^2 = 1$$

$$MM^\dagger = e^{ic} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} e^{-ic} \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} = (|a|^2 + |b|^2) I,$$

donde la matriz

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \det(U) = |a|^2 + |b|^2 = 1,$$

se dice unimodular y forman un subgrupo especial llamado $SU(2)$ de $U(2)$ grupo de las matrices unitarias de dimensión 2. Notese que tenemos nuevamente 3 parámetros independientes que son las partes reales e imaginarias de a, b que son 4 -1condición (unimodularidad) =3.

Puede comprobarse por calculo directo que el producto de dichas matrices es cerrado

$$\begin{aligned} U(a_1, b_1)U(a_2, b_2) &= U(a_1a_2 - b_1b_2^*, a_1b_2 + a_2^*b_1), \\ |a_1a_2 - b_1b_2^*|^2 + |a_1b_2 + a_2^*b_1|^2 &= |a_1a_2|^2 + |b_1b_2^*|^2 - 2\operatorname{Re}(a_1a_2b_1b_2^*) + |a_1b_2|^2 + |b_1a_2^*|^2 + 2\operatorname{Re}(a_1a_2^*b_1b_2^*) \\ &= |a_1|^2 (|a_2|^2 + |b_2|^2) + |b_1|^2 (|b_2^*|^2 + |a_2^*|^2) = |a_1|^2 + |b_1|^2 = 1. \end{aligned}$$

Claramente puede verse que

$$U(\hat{n}, \phi) = U(a = \cos \frac{\phi}{2} - i\hat{n}_z \operatorname{sen} \frac{\phi}{2}, b = -\hat{n}_y \operatorname{sen} \frac{\phi}{2} - \hat{n}_x \operatorname{sen} \frac{\phi}{2}),$$

es decir las matrices que producen la rotación en el espacio de dimensión 2 perteneces a $SU(2)$.

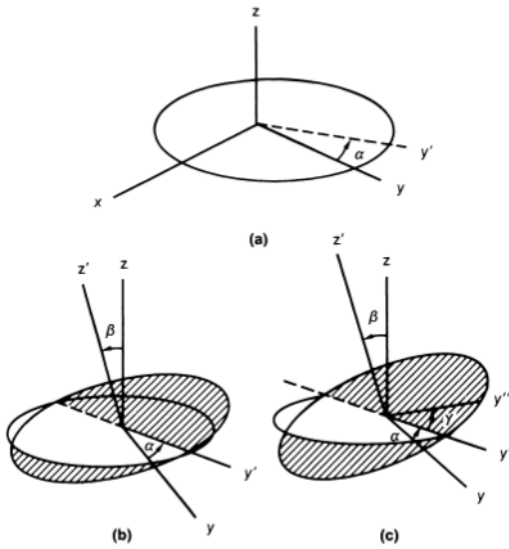
8.7 Rotación de Euler

Expresar una rotación en terminos de \hat{n}, ϕ no permite descomponerla en rotaciones sucesivas, por ejemplo en el caso de $SU(2)$ teniamos

$$e^{\frac{-i\sigma \cdot \hat{n}\phi}{2}} = e^{\frac{-i\sigma_x \hat{n}_x \phi}{2}} e^{\frac{-i\sigma_y \hat{n}_y \phi}{2}} e^{\frac{-i\sigma_z \sqrt{1-\hat{n}_x^2 - \hat{n}_y^2} \phi}{2}},$$

donde la tercera no es una rotación en x o y .

La forma de expresar una rotación como producto de rotaciones consecutivas es usando la expresión de Euler para las rotaciones que descompone una rotación cualquiera en tres según los ejes mostrados en la figura



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

donde y', z' son ejes fijos al sistema.

Puede demostrarse que la rotación anterior puede expresarse en rotaciones respecto a los ejes de coordenadas fijos del sistema de referencia como (no hay una única convención)

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

a esta rotación de Euler le corresponderá en el espacio de Hilbert

$$\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{D}_z(\alpha)\hat{D}_y(\beta)\hat{D}_z(\gamma),$$

donde para el caso particular de rotaciones en el espacio de dimensión 2

$$\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i\sigma_z\alpha}{2}} e^{-\frac{i\sigma_y\beta}{2}} e^{-\frac{i\sigma_z\gamma}{2}},$$

podríamos comparar ambas formas de expresar la rotación y conectar los parámetros.

$$D(\hat{\mathbf{n}}, \phi) = e^{-\frac{i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}} = \begin{pmatrix} \cos\phi/2 - i\hat{n}_z\text{sen}\phi/2 & (-i\hat{n}_x - \hat{n}_y)\text{sen}\phi/2 \\ (-i\hat{n}_x + \hat{n}_y)\text{sen}\phi/2 & \cos\phi/2 + i\hat{n}_z\text{sen}\phi/2 \end{pmatrix}$$

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i\sigma_z\alpha}{2}} e^{-\frac{i\sigma_y\beta}{2}} e^{-\frac{i\sigma_z\gamma}{2}} = \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\text{sen}\beta/2 \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2}\text{sen}\beta/2 & e^{i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 \end{pmatrix}.$$

Ya estudiaremos con más detalle luego las matrices de representación del operador de rotación para diferentes valores de j o sea

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

y con las diferentes formas de expresar \hat{D} .

8.8 Momento angular orbital

El operador momento angular fue introducido como generador de rotaciones en el espacio de Hilbert. Si tenemos una partícula sin momento angular intrínseco o espín debería coincidir con la definición $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ obtenida por correspondencia, mencionada antes cuando analizamos los postulados: los observables con análogos clásicos se obtienen haciendo la correspondencia $\mathbf{r}, \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$. Notemos que adoptando dicha definición y usando las relaciones de conmutación

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij},$$

obtendríamos

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= \epsilon_{ikl}\epsilon_{jrs} [\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{x}_r\hat{p}_s - \hat{x}_r\hat{p}_s\hat{x}_k\hat{p}_l] \\ &= \epsilon_{ikl}\epsilon_{jrs} [\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{x}_r\hat{p}_s - \hat{x}_r(-i\hbar\delta_{ks} + \hat{x}_k\hat{p}_s)\hat{p}_l] \\ &= \epsilon_{ikl}\epsilon_{jrs} [\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{x}_r\hat{p}_s + i\hbar\hat{x}_r\hat{p}_l\delta_{ks} - (\hat{x}_r\hat{x}_k\hat{p}_s\hat{p}_l = \hat{x}_k\hat{x}_r\hat{p}_l\hat{p}_s)] \\ &= \epsilon_{ikl}\epsilon_{jrs} [\cancel{\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{x}_r\hat{p}_s} + i\hbar\hat{x}_r\hat{p}_l\delta_{ks} - i\hbar\hat{x}_k\hat{p}_s\delta_{rl} - \cancel{\hat{x}_k\hat{p}_l\hat{x}_r\hat{p}_s}] \\ &= -i\hbar(\delta_{ij}\delta_{rl} - \delta_{ir}\delta_{lj})\hat{x}_r\hat{p}_l + i\hbar(\delta_{ij}\delta_{ks} - \delta_{is}\delta_{jk})\hat{x}_k\hat{p}_s \\ &= i\hbar(\hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{x}_j\hat{p}_i) = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \end{aligned}$$

donde hemos introducido el ϵ_{ijk} para dar los signos y todos los casos, ya así obtenemos que las mismas reglas de conmutación.

Ahora que hemos corroborado que para el caso orbital $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$, podemos estudiar las autofunciones en la representación de coordenadas que serán útiles en estudios futuros. Comencemos con (cuidado que son cantidades no conmutativas)

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 &= (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}})^2 = (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) = \hat{\mathbf{r}}^2 \cdot \hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \\ &= \hat{\mathbf{r}}^2 \cdot \hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{r}_i\hat{p}_i\hat{p}_j\hat{r}_j = \hat{\mathbf{r}}^2 \cdot \hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{r}_i\hat{p}_i(i\hbar + \hat{r}_j\hat{p}_j) \\ &= \hat{\mathbf{r}}^2 \cdot \hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{r}_i\hat{p}_i i\hbar - \hat{r}_i\hat{p}_i\hat{r}_j\hat{p}_j = \hat{\mathbf{r}}^2 \cdot \hat{\mathbf{p}}^2 + 2\hat{r}_i\hat{p}_i i\hbar - \hat{r}_i\hat{r}_j\hat{p}_i\hat{p}_j \\ &= \hat{\mathbf{r}}^2 \cdot \hat{\mathbf{p}}^2 + 2i\hbar(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) - \hat{\mathbf{r}} \cdot (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \hat{\mathbf{p}} \end{aligned}$$

tendiendo en cuenta las derivadas direccionales vemos que en la representación de coordenadas

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla = \frac{\hbar}{i}r\frac{\partial}{\partial r},$$

con lo que se puede escribir usando el laplaciano en coordenadas esféricas como

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{L}}^2 &= r^2 \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \nabla^2 + 2\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} + \hbar^2 r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \\
&= -r^2 \hbar^2 \nabla^2 + \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \\
&= -r^2 \hbar^2 \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + \hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \\
&= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right), \\
\hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \\
\frac{\partial}{\partial \phi} &= \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x} = r \cos\phi \sin\theta \frac{\partial}{\partial y} - r \sin\phi \sin\theta \frac{\partial}{\partial x} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \\
\hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}
\end{aligned}$$

resumiendo en la representación de coordenadas

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{L}}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \\
\hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}.
\end{aligned} \tag{201}$$

Cuando el Hamiltoniano conmuta con $\hat{\mathbf{L}}^2$, \hat{L}_z o sea

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, (\hat{\mathbf{L}}^2; \hat{L}_z)] &= 0 \\
\hat{H} |nlm\rangle &= E_n |nlm\rangle \\
(\hat{\mathbf{L}}^2; \hat{L}_z) |nlm\rangle &= (\hbar^2 l(l+1), m\hbar) |nlm\rangle,
\end{aligned}$$

y un ejemplo es cuando tenemos un potencial central que depende de $|\hat{\mathbf{r}}|$

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\mathbf{r}}|) \rightarrow \frac{\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \nabla^2}{2m} + V(r) = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(r) \\
&= \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \equiv \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + V(r),
\end{aligned}$$

donde hemos usado la Ec.(201) y definido un impulso radial.

Claramente como $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$ y el impulso radial sólo depende de r se cumple que $[\hat{H}, (\hat{\mathbf{L}}^2; \hat{L}_z)] = 0$. Si estos tres forman un CÓCOOCO tendremos estados unívocamente definidos por los autovalores E_n, l, m , sino tendremos todavía degeneración.

Puede verse que para que el potencial conmute con \hat{L}_i es necesario y suficiente que solo dependa de r

$$\begin{aligned} [V(\hat{\mathbf{r}}), \hat{L}_i] &= 0 \iff \frac{\hbar}{i} \left[V(\mathbf{r}), \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \right] \psi(\mathbf{r}) = 0 \\ \iff V(\mathbf{r}) \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(\mathbf{r}) - \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}) \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} V(\mathbf{r}) = 0, \forall \psi(\mathbf{r}) \\ \text{Si } V(\mathbf{r}) = V(r) &\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x_k} V(r) = \frac{x_k}{r} \frac{\partial}{\partial r} V(r) \Rightarrow \psi(\mathbf{r}) \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k} V(r) \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} V(r) (\mathbf{r} \times \mathbf{r})_i = 0 \text{ entonces } [V(r), \hat{L}_i] = 0 \end{aligned} \quad (202)$$

$$\text{Si } [V(\mathbf{r}), \hat{L}_i] \psi(\mathbf{r}) = 0 \Rightarrow \psi(\mathbf{r}) \hat{L}_i V(\mathbf{r}) = 0 \forall \psi(\mathbf{r}) \Rightarrow \hat{L}_i V(\mathbf{r}) = 0 \quad (203)$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_z V(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} V(\mathbf{r}) = 0 \Rightarrow V \neq f(\phi) \\ \hat{L}_x V(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{i} \left(-\text{sen}\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \text{cot}\theta \text{cos}\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar}{i} \text{sen}\phi \frac{\partial}{\partial \theta} V(\mathbf{r}) = 0 \end{aligned} \quad (204)$$

$$\hat{L}_y V(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i} \left(\text{cos}\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \text{cot}\theta \text{sen}\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) V(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i} \text{cos}\phi \frac{\partial}{\partial \theta} V(\mathbf{r}) = 0$$

$$\Downarrow \\ V(\mathbf{r}) \neq f(\theta)$$

$$\Downarrow \\ \text{entonces } V(\mathbf{r}) = V(r).$$

8.9 Esféricos Armónicos

Si consideramos la función de onda de una partícula en un atestado $|nlm\rangle$ en un potencial central tendrá la forma

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | nlm \rangle = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi),$$

pues debe cumplirse

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{nlm}(\mathbf{r}) &= \hbar^2 l(l+1) \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \\ \hat{L}_z \psi_{nlm}(\mathbf{r}) &= m \hbar \psi_{nlm}(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

y además no dependen de r estos operadores.

Podríamos expresar $|\mathbf{r}\rangle = |r\theta\phi\rangle = |r\rangle |\theta\phi\rangle$ como un producto tensorial ya antes visto y así se puede aislar la parte angular sin importar la forma del potencial central

$$\begin{aligned} \langle \theta\phi | nlm \rangle &= Y_{lm}(\Omega = \theta\phi) \\ \langle r | nlm \rangle &= R_{nlm}(r) \end{aligned}$$

$Y_{lm}(\Omega)$ sería la amplitud de encontrar a la partícula en el estado nlm en la dirección Ω y $R(r)$ entre $r, r + dr$. Todavía no decimos nada de como dependerá R de los números cuánticos nlm .

Estudiamos las autofunciones Y_{lm} que deberán cumplir (ver la ec.(201))

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) &= m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi),\end{aligned}$$

donde claramente como $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$ deberá ser $Y_{lm}(\theta, \phi) = c_{lm} \Theta(\theta) e^{im\phi}$. Habiendo definido en (204) las expresiones en esféricas de $\hat{L}_{x,y}$ podemos ahora construir $\hat{L}_{\pm} \equiv \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$, obteniendo

$$\hat{L}_+ = \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right),$$

y usando las propiedades del operador escalera tendremos

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ Y_{lm=l} &= 0 \\ \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_u &= \underbrace{c_u \hbar e^{i(l+1)\phi}}_{\neq 0} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right) \Theta = 0 \\ &\Downarrow \\ \Theta(\theta) &= \text{sen} \theta^l\end{aligned}$$

y así tendremos

$$\begin{aligned}Y_u(\theta, \phi) &= c_u e^{il\phi} \text{sen} \theta^l \\ \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_u^*(\theta, \phi) Y_u(\theta, \phi) &= 1 \\ &\Downarrow \\ c_u &= \frac{(-i)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l!)}{4\pi}},\end{aligned}$$

donde el i^l se agrega por conveniencia.

Ahora para generar los de $m = l-1, l-2, \dots$ podemos aplicar \hat{L}_- sobre $|nll\rangle$ teniendo en cuenta la normalización definida antes con los coeficientes c_{\pm}^{lm} en (200) así

$$Y_{lm-1}(\Omega) = \frac{\hat{L}_- Y_{lm}(\Omega)}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} = \frac{e^{-i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_{lm}(\Omega)}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}},$$

donde de la Y_u podremos encontrar Y_{u-1} y así. Como ya se ha visto antes en Electro I se puede obtener una expresión generatriz

$$Y_{lm}(\Omega) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} \frac{e^{im\phi}}{\text{sen}^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\text{sen} \theta)^{2l}.$$

8.10 Relación con las matrices de rotación

Si consideramos a un autoestado de coordenadas angulares $|\hat{\mathbf{n}} = (\text{sen}\theta\text{cos}\phi, \text{sen}\theta\text{sen}\phi, \text{cos}\theta) \equiv \Omega\rangle$ este podría obtenerse por sucesivas rotaciones a partir de $|\hat{\mathbf{k}} = (\theta = 0, \phi(\text{cualquiera})\rangle$ actuando con el operador $\hat{D}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) = R_z(\phi)R_y(\theta)R_z(0)$ o sea

$$\begin{aligned} |\hat{\mathbf{n}}\rangle &= \hat{D}(\phi, \theta, 0) |\hat{\mathbf{k}}\rangle \\ |\hat{\mathbf{n}}\rangle &= \sum_{lm} \hat{D}(\phi, \theta, 0) |lm\rangle \langle lm | \hat{\mathbf{k}} \rangle, \end{aligned}$$

donde hemos introducido la completitud $\sum_{lm} |lm\rangle \langle lm| = \hat{I}$. Si ahora aplicamos el bra $\langle lm'|$ por ortogonalidad sólo queda la suma sobre m

$$\begin{aligned} \langle lm' | \hat{\mathbf{n}} \rangle &= \sum_m \langle lm' | \hat{D}(\phi, \theta, 0) |lm\rangle \langle lm | \hat{\mathbf{k}} \rangle \\ Y_{lm'}^*(\theta, \phi) &= \sum_m \mathcal{D}^{lm'm}(\phi, \theta, 0) Y_{lm}^*(\theta = 0, \phi) \\ Y_{lm'}^*(\theta, \phi) &= \sum_m \mathcal{D}^{lm'm}(\phi, \theta, 0) Y_{lm}^*(\theta = 0, \phi) \\ Y_{lm'}^*(\theta, \phi) &= \sum_m \mathcal{D}^{lm'm}(\phi, \theta, 0) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \underbrace{P_l(\text{cos}\theta = 1)}_1 \delta_{m0} \end{aligned}$$

$$Y_{lm'}^*(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{D}^{lm'0}(\phi, \theta, 0).$$

y así hemos conectado los armónicos esféricos con las matrices de rotación.

8.11 Representaciones del operador de rotación

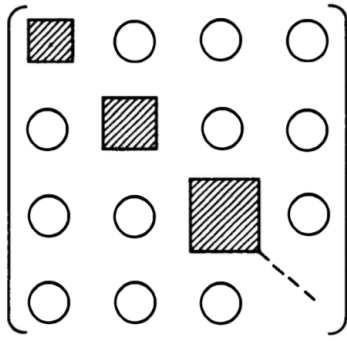
Consideremos una rotación R definida por $\hat{\mathbf{n}}, \phi$, tendremos un operador de rotación asociado en el espacio de Hilbert $\hat{D}(R)$ cuya matriz representativa en la base $\mathcal{B} = \{|jm\rangle\}$ será

$$\mathcal{D}_{m'm}^j(R) = \langle jm' | \hat{D}(R) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi} |jm\rangle, \quad (205)$$

denominadas matrices de Wigner, notemos que la matriz es diagonal en j pues $[\hat{D}, \hat{\mathbf{J}}] = 0$, siendo $\hat{D}(R) |jm\rangle$ también autovector de $\hat{\mathbf{J}}^2$ con autovalor $j(j+1)\hbar^2$ no pudiendo entonces tener overlap con un estado de j diferente.

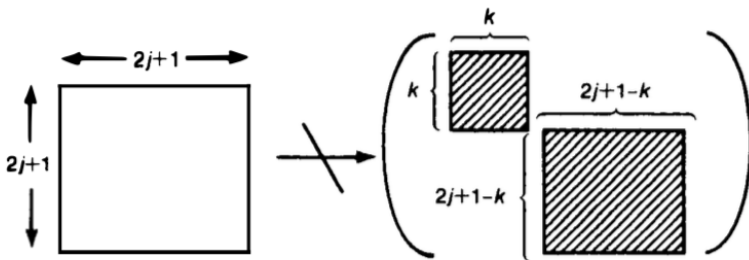
Usualmente a $\mathcal{D}_{m'm}^j(R)$ es de dimensión $(2j+1) \times (2j+1)$ (no olvidemos que m toma $2j+1$ valores) se la conoce como representación irreducible de dimensión $2j+1$ del operador de rotación $\hat{D}(R)$.

Si en nuestro espacio de Hilbert tenemos estados con j diferentes (como sucede por ejemplo cuando se acoplan momentos angulares diferentes) la matriz de rotación lucirá como



donde cada submatriz rayada $\mathcal{D}_{m'm}^j(R)$ tiene dimensión $(2j + 1) \times (2j + 1)$.

La palabra irreducible se agrega porque dichas submatrices no pueden ser descompuesta en bloques menores



realizando ningún cambio de base.

Las matrices de rotación para un dado j forman un grupo

- Existe la identidad de dimensión $(2j + 1) \times (2j + 1)$ correspondiente a una rotación de ángulo $\phi = 0$
- Existe la matriz inversa que corresponde a una rotación en $\hat{n}, -\phi$
- El producto de dos matrices de rotación es una matriz de rotación del mismo j

$$\sum_{m''} \mathcal{D}_{m'm''}^j(R_1) \mathcal{D}_{m''m}^j(R_2) = \mathcal{D}_{m'm}^j(R_1 R_2)$$

- Notemos que las matrices de rotación son unitarias pues corresponden a un operador de rotación unitario, existiendo la relación

$$\mathcal{D}_{m'm}^j(R^{-1}) = \mathcal{D}_{mm'}^{j*}(R)$$

- $\mathcal{D}_{m'm}^j$ representa la amplitud de que un sistema rotado a partir de $|jm\rangle$ se encuentre en $|jm'\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{D}(R) |jm\rangle &= \sum_{m'} |jm'\rangle \langle jm'| \hat{D}(R) |jm\rangle \\ &= \sum_{m'} |jm'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^j(R), \end{aligned}$$

donde notamos que si bien j no cambia si lo hace m .

Si usamos la forma de Euler para las rotaciones donde $\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\alpha}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\gamma}$, tendremos una matriz de rotación

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m'm}^j(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle jm' | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\gamma} | jm \rangle \\ &= e^{-i(m'\alpha+m\gamma)} \langle jm' | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_y\beta} | jm \rangle \\ &\equiv e^{-i(m'\alpha+m\gamma)} d_{m'm}^j(\beta) \end{aligned}$$

donde vemos que d no es diagonal porque \hat{J}_y conecta diferentes m .

Ejemplos:

$$j = 1/2$$

$$d_{\beta}^{(1/2)} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix}.$$

$$j = 1$$

$$d^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos \beta) & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin \beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos \beta) \\ \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin \beta & \cos \beta & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin \beta \\ \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos \beta) & \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin \beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos \beta) \end{pmatrix}.$$