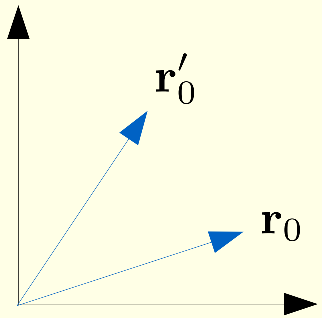
Clase 16 - Martes 26/10/2021

La clase pasada vimos:

- Rotaciones geométricas
- Operador de rotación en el espacio de estados
- Propiedades del operador de rotación
- Operador de rotación y el momento angular

En esta clase veremos:

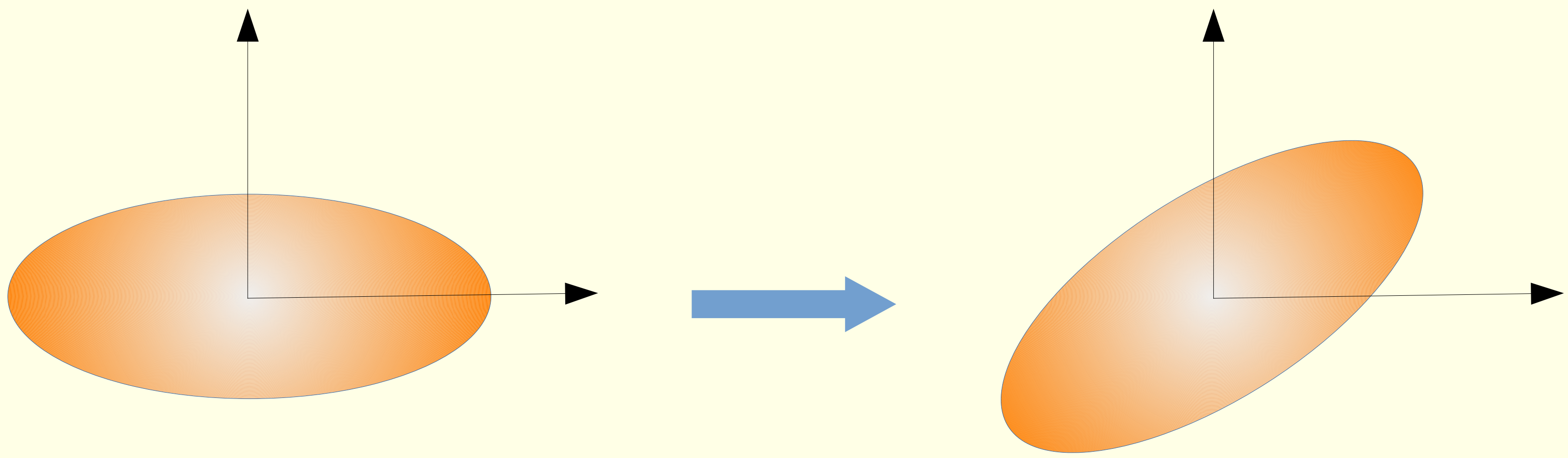
- Suma de momentos angulares: introducción
- Ejemplo importante: suma de dos espines ½
- Solución por diagonalización



REPASO

Operadores de rotación en el espacio de estados

Rotación de la función de onda:



REPASO

Para una dirección $\hat{u}$ arbitraria:

$$R_{\hat{u}}(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha\, \vec{L} \cdot \hat{u}$$

Solución: $R_z(\alpha) = e^{-i\alpha L_z/\hbar}$

En general: $R_{\hat{u}}(\alpha) = e^{-i\alpha \vec{L}\cdot\hat{u}/\hbar}$

Suma de momentos angulares: introducción

Suma de momentos angulares

$$\vec{L}_{\mathrm{TOTAL}} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$$

OAM total de dos partículas

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

OAM y SAM de la misma partícula

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^{N} \vec{J}_i$$

Momento angular total de N partículas

Suma de momentos angulares en **mecánica clásica**

El momento angular (orbital) de N partículas con respecto a un punto O es:

$$\mathscr{L} = \sum_{i=1}^{N} \mathscr{L}_i \qquad \text{con} \qquad \mathscr{L}_i = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$$

Conservación:

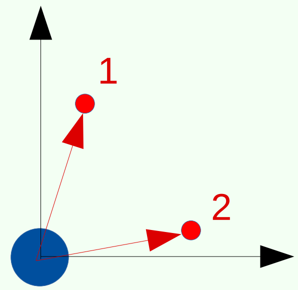
$$\frac{d\mathcal{L}}{dt} = \mathcal{N}^{(ext)}$$

Torque de la fuerza externa total

Notar que $\mathcal{L}$ se conserva si $\mathcal{N}^{(ext)} = 0$, o en particular si $\mathcal{F}^{(ext)} = 0$ (sistema aislado)

Sin embargo, si hay interacciones internas, los $\mathcal{L}_i$ individuales en general no se conservarán.

Suma de momentos angulares en **mecánica cuántica**



Supongamos un sistema de dos partículas en un potencial central:

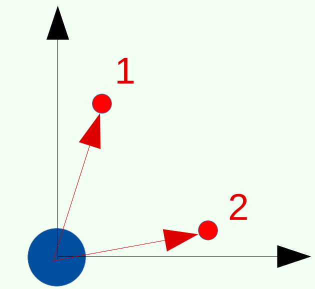
Ket posición de las dos partículas: $\{ | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle \}$

$$H_0 = H_1 + H_2 \quad \begin{cases} H_1 = -\dfrac{\hbar^2}{2\mu_1}\Delta_1 + V(r_1) \\ H_2 = -\dfrac{\hbar^2}{2\mu_2}\Delta_2 + V(r_2) \end{cases}$$

Sabemos que: $\left\{ \begin{array}{l} [\mathbf{L}_1, H_1] = \mathbf{0} \\ [\mathbf{L}_1, H_2] = \mathbf{0} \end{array} \right\} \Rightarrow [\mathbf{L}_1, H] = [\mathbf{L}_1, H_1 + H_2] = 0$

Análogamente: $[\mathbf{L}_2, H] = 0$

Suma de momentos angulares en mecánica cuántica



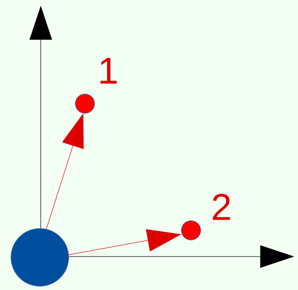
$$\left.\begin{array}{l} [\mathbf{L}_1, H] = 0 \\ \\ [\mathbf{L}_2, H] = 0 \end{array}\right\} \Rightarrow \quad [\mathbf{L}, H] = [\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2, H] = 0$$

Las 3 componentes del momento angular se conservan

Ahora incluyamos una interacción entre las partículas que dependa de la distancia entre ellas:

$$\Rightarrow \quad H = H_1 + H_2 + v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$$

Suma de momentos angulares en mecánica cuántica



$$H = H_1 + H_2 + v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$$

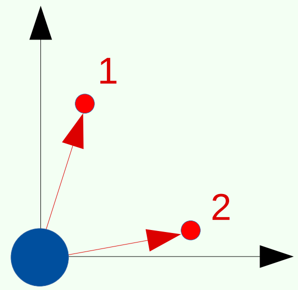
$$\Rightarrow \quad [\mathbf{L}_1, H] = [\mathbf{L}_1, v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)]$$

Por ejemplo para la componente z:

$$[L_{1z}, H] = [L_{1z}, v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)] = \frac{\hbar}{i}\left(x_1 \frac{\partial v}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial v}{\partial x_1}\right) \neq 0$$

De nuevo, vemos que los momentos angulares individuales dejan de ser constantes de movimiento si hay interacciones entre las partículas.

Suma de momentos angulares en mecánica cuántica



Por otro lado, si consideramos el momento angular total:

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$$

Se puede verificar que se anula el conmutador:

$$[L_z, H] = [L_{1z} + L_{2z}, H] = 0$$

En conclusión: en mecánica cuántica también las tres componentes del **momento angular total** son **constantes de movimiento** aun en presencia de interacciones internas.

Suma de momentos angulares

ejemplo importante: dos espines 1/2

Suma de dos espines $\frac{1}{2}$ (Sección X.B) Cohen-Tannoudji, Diu, Lalöe

Sean dos partículas de espín 1/2 $\longrightarrow \vec{S}_1 , \vec{S}_2$

Espacios de estados individuales generados por:

Autoestados de:

$$\{S_1^2, S_{1z}\} \Longleftrightarrow \mathcal{E}_{S_1} : \{|1:+\rangle, |1:-\rangle\}$$

$$\{S_2^2, S_{2z}\} \Longleftrightarrow \mathcal{E}_{S_2} : \{|2:+\rangle, |2:-\rangle\}$$

Espacio de Hilbert total: $\mathcal{E}_S = \mathcal{E}_{S_1} \otimes \mathcal{E}_{S_2}$

La “base producto” de este espacio de Hilbert es:

$$\{ |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle \} = \{ |+,+\rangle, |+,-\rangle, |-,+\rangle, |-,-\rangle \}$$

que son los autovectores comunes del CCOC: $\mathbf{S}_1^2, S_{1z}, \mathbf{S}_2^2, S_{2z}$

$$\mathbf{S}_1^2 |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \mathbf{S}_2^2 |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$$

$$S_{1z} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_1 \frac{\hbar}{2} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$$

$$S_{2z} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \varepsilon_2 \frac{\hbar}{2} |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$$

$$\varepsilon_1, \varepsilon_2 = \pm 1$$

En el espacio producto, los operadores se "extienden"

$$S_1^2 \longrightarrow S_1^2 \times \mathbb{1}_2 \quad , \quad S_2^2 \longrightarrow \mathbb{1}_1 \otimes S_2^2$$

pero normalmente no escribimos la identidad del otro espacio.

Definimos el espín total del sistema:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$$

Este operador “vectorial” es un momento angular, pues satisface las reglas de conmutación correspondientes:

$$\begin{aligned}[S_x, S_y] &= [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] \\ &= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] \\ &= i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z} \\ &= i\hbar S_z\end{aligned}$$

De nuevo trabajaremos con los operadores S^2 y S_Z, donde:

$$\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

Se puede verificar que los operadores: $\mathbf{S}_1^2, \mathbf{S}_2^2, \mathbf{S}^2, S_z$

conmutan entre sí y forman un CCOC (hacerlo).

Este CCOC puede reeemplazar al “original”: $\mathbf{S}_1^2, S_{1z}, \mathbf{S}_2^2, S_{2z}$

- Queremos pasar de $\{S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$

a $\{S_1^2, S_2^2, \boxed{S^2, S_z}\}$

En realidad alcanza con tomar como C.C.O.C.

a $\{S_{1z}, S_{2z}\}$ o $\{S^2, S_z\}$

porque **todos los estados** del espacio producto ya son autoestados de S_1^2 y S_2^2

con autovalor $\frac{3}{4}\hbar^2$

$$\mathbf{S}_1^2 \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = \mathbf{S}_2^2 \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle$$

$$S_{1z} \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = \varepsilon_1 \frac{\hbar}{2} \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle$$

$$S_{2z} \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = \varepsilon_2 \frac{\hbar}{2} \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle$$

$$\mathbf{S}_1^2 \,|\, S, M \rangle = \mathbf{S}_2^2 \,|\, S, M \rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 \,|\, S, M \rangle$$

$$\mathbf{S}^2 \,|\, S, M \rangle = S(S+1)\hbar^2 \,|\, S, M \rangle$$

$$S_z \,|\, S, M \rangle = M\hbar \,|\, S, M \rangle$$

"Base producto"

"Base acoplada"

$$\varepsilon_1, \varepsilon_2 = \pm$$

Todavía no sabemos qué valores toman S y M

Problema a resolver:

- Hallar los valores de S y M
- Expresar $|S, M\rangle$ en términos de $|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$

$$\mathbf{S}_1^2 \,|\, S, M \,\rangle = \mathbf{S}_2^2 \,|\, S, M \,\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 \,|\, S, M \,\rangle$$

$$\mathbf{S}^2 \,|\, S, M \,\rangle = S(S+1)\hbar^2 \,|\, S, M \,\rangle$$

$$S_z \,|\, S, M \,\rangle = M\hbar \,|\, S, M \,\rangle$$

Sabemos que:

S debe ser entero o semientero y M = -S, -S+1, -S+2, … , S-1, S

Método manual de diagonalización en la suma de dos espines 1/2

Método manual suma espines 1/2

Diagonalización de S_z

$$S_z|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle = (S_{1z}+S_{2z})|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2}(\varepsilon_1+\varepsilon_2)}_{M}\,\hbar\,|\varepsilon_1,\varepsilon_2\rangle$$

✓ ya es autoestado

$$S_z|++\rangle = \hbar\,|++\rangle$$

$$\left.\begin{aligned} S_z|+-\rangle &= 0 \\ S_z|-+\rangle &= 0 \end{aligned}\right\}\ \text{subespacio degenerado con autovalor } M=0$$

$$S_z|--\rangle = -\hbar\,|--\rangle$$

$$M \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$$

$$(S_z) = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & & \\ 0 & 0 & & \\ & & 0 & 0 \\ & & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{en la base } \{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$$

La matriz de S_z ya está diagonalizada en la base producto y vale

$$M \begin{array}{l} \nearrow \; 1 \\ \rightarrow \; 0 \\ \searrow \; -1 \end{array}$$

Método manual suma espines 1/2

Diagonalización de S^2

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$$
$$S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)$$

$$S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2$$
$$= S_1^2 + S_2^2 + 2\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$
$$= S_1^2 + S_2^2 + 2\left(S_{1x} S_{2x} + S_{1y} S_{2y} + S_{1z} S_{2z}\right)$$
$$= S_1^2 + S_2^2 + S_{1+} S_{2-} + S_{1-} S_{2+} + 2 S_{1z} S_{2z}$$

y sabemos como actúan $S_\pm$ para cada espín:

$$\begin{cases} S_+ |+\rangle = 0 \\ S_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle \end{cases} \qquad \begin{cases} S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle \\ S_- |-\rangle = 0 \end{cases}$$

Método manual suma espines 1/2

Diagonalización de S^2

Ejemplo:

$$S^2 |-+\rangle = \left(S_1^2 + S_2^2 + 2 S_{1z} S_{2z} + S_{1+} S_{2-} + S_{1-} S_{2+}\right)|-+\rangle$$

$$= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \frac{1}{2}\hbar^2\right)|-+\rangle + \hbar^2 |+-\rangle$$

$$= \hbar^2 \left(|-+\rangle + |+-\rangle\right)$$

Método manual suma espines 1/2

Diagonalización de S^2

Podemos calcular la matriz de S^2 en base $\{|m_1 m_2\rangle\}$

$$(S^2) = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \hbar^2$$

Dos kets ya son autoestados:

$$S^2 \,|++\rangle = 2\hbar^2 \,|++\rangle \qquad (M = 1)$$

$$S^2 \,|--\rangle = 2\hbar^2 \,|--\rangle \qquad (M = -1)$$

Pero $\{|+-\rangle, |-+\rangle\}$ no son autoestados, pero son autoestados de S_z con $M = 0$.

Método manual suma espines 1/2

Podemos calcular la matriz de S^2 en base $\{|m_1 m_2\rangle\}$

$$(S^2) = \left[\begin{array}{c|cc|c} 2 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 2 \end{array}\right] \hbar^2$$

Diagonalización de S^2

Falta diagonalizar en el subespacio $M=0$

$$(S^2)_{M=0} = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

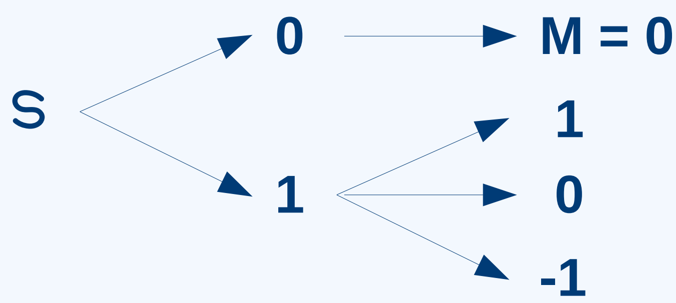
$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 \\ 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda = 0, 2$$

Autovectores:

$$2\hbar^2 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right)$$

$$0 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)$$

Resumen: triplete y singlete



$$|0\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)$$

singlete
singulete
(antisimétrico)

$$\begin{cases} |1\,1\rangle = |++\rangle \\ |1\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right) \\ |1\,-1\rangle = |--\rangle \end{cases}$$

Triplete
$\{|1\,M\rangle\}$
(simétricos)

Método manual suma espines 1/2

$$\mathbf{S}_1^2 \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = \mathbf{S}_2^2 \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle$$

$$S_{1z} \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = \varepsilon_1 \frac{\hbar}{2} \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle$$

$$S_{2z} \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = \varepsilon_2 \frac{\hbar}{2} \,|\, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle$$

"Base producto"

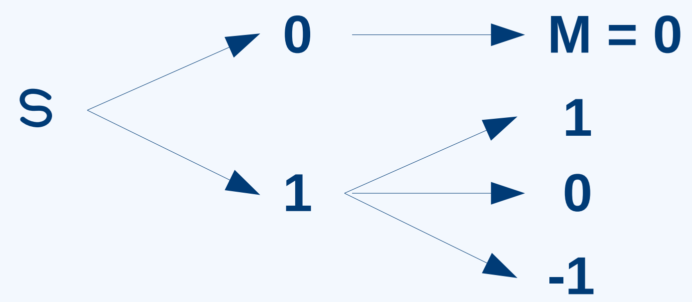
$$\varepsilon_1, \varepsilon_2 = \pm$$

$$\mathbf{S}_1^2 \,|\, S, M \rangle = \mathbf{S}_2^2 \,|\, S, M \rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 \,|\, S, M \rangle$$

$$\mathbf{S}^2 \,|\, S, M \rangle = S(S+1)\hbar^2 \,|\, S, M \rangle$$

$$S_z \,|\, S, M \rangle = M\hbar \,|\, S, M \rangle$$

"Base acoplada"



$$\{|S, M\rangle\} = \{|1,1\rangle, \underbrace{|1,0\rangle, |0,0\rangle}_{M=0}, |1,-1\rangle\}$$

Resumen de la Clase **16**

En esta clase vimos:

- Suma de momentos angulares: introducción
- Suma de dos espines 1/2
- Solución por diagonalización