Operadores vectoriales

Las tres magnitudes $\{v_1, v_2, v_3\}$ son las componentes de un vector $\vec{v}$ si ante una rotación R_{ij} se transforman como $v'_i = R_{ij}\, v_j$.

Un ket $|\alpha\rangle \in \mathscr{H}$ ante una rotación se transforma en el ket $|\alpha'\rangle = U(R)\,|\alpha\rangle$.
Decimos que $\vec{V} = \{V_1, V_2, V_3\}$ es un operador vectorial si $\langle V_i\rangle' = R_{ij}\,\langle V_j\rangle$.

$$\langle V_i\rangle' = \langle\alpha'|V_i|\alpha'\rangle = R_{ij}\,\langle\alpha|V_j|\alpha\rangle$$

$$\langle\alpha|\, U^\dagger(R)\, V_i\, U(R)\,|\alpha\rangle = R_{ij}\,\langle\alpha|V_j|\alpha\rangle$$

$$U^\dagger(R)\, V_i\, U(R) = R_{ij}\, V_j$$

Operadores vectoriales: transformado de un operador

Sea $|\alpha'\rangle = U(R)\,|\alpha\rangle$. Se define A', el operador transformado de A, como :

$$\langle\alpha'|\,A'\,|\alpha'\rangle = \langle\alpha|\,A\,|\alpha\rangle$$

$$\langle\alpha|U^\dagger(R)\,A'\,U(R)|\alpha\rangle = \langle\alpha|\,A\,|\alpha\rangle$$

$$U^\dagger(R)\,A'\,U(R) = A$$

$$A' = U(R)\,A\,U^\dagger(R)$$

Definición de operador vectorial en términos de operadores transformados:

$$U^\dagger(R)\,V_i\,U(R) = R_{ij}\,V_j$$

$$U^\dagger(R^{-1})\,V_i\,U(R^{-1}) = (R^{-1})_{ij}\,V_j$$

$$U(R)\,V_i\,U^\dagger(R) = R_{ji}\,V_j$$

$$V_i' = U(R)\,V_i\,U^\dagger(R) = V_j\,R_{ji}$$

Operadores tensoriales

Generalizamos la definición de operador vectorial $U(R)\, V_i\, U^\dagger(R) = V_j\, R_{ji}$ a operadores tensoriales de rango arbitrario j .

Los $2j{+}1$ operadores T^j_m $(m = \text{-}j,\, j)$ son las componentes de un operador tensorial de rango j si ante rotaciones se transforman entre sí según la representación irreducible de dimensión $2j{+}1$ del grupo de las rotaciones:

$$\boldsymbol{U(R)\; T^j_m\; U^\dagger(R) = \sum_{m'} T^j_{m'}\, D^j_{m'm}(R)}$$

Esta definición es equivalente a:

$$\begin{cases} [J_z, T^j_m] \;=\; \hbar\, m\, T^j_m \\ [J_+, T^j_m] \;=\; \hbar \sqrt{j(j{+}1) - m(m{+}1)}\;\; T^j_{m+1} \\ [J_-, T^j_m] \;=\; \hbar \sqrt{j(j{+}1) - m(m\,\text{-}1)}\;\; T^j_{m\,\text{-}1} \end{cases}$$

Operadores tensoriales: rotación infinitesimal $D^{j}_{m'm}(\varepsilon) = \langle jm' | \, U(\varepsilon) \, | jm \rangle$

$$U(\boldsymbol{\varepsilon})\, T^j_m\, U^\dagger(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{m'} T^j_{m'}\, D^j_{m'm}(\boldsymbol{\varepsilon})$$

$$(1-\tfrac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J})\, T^j_m\, (1+\tfrac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J}) = \sum_{m'} T^j_{m'}\, \langle jm' | \, (1-\tfrac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J}) \, | jm \rangle$$

$$T^j_m - \tfrac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J}\, T^j_m + \tfrac{i}{\hbar}\, T^j_m\, \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J} = \sum_{m'} T^j_{m'}\, \delta_{mm'} - \tfrac{i}{\hbar}\, T^j_{m'}\, \langle jm' | \, \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J} \, | jm \rangle$$

$$-\tfrac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\varepsilon}\cdot[\,\boldsymbol{J}, T^j_m\,] = -\tfrac{i}{\hbar}\,\boldsymbol{\varepsilon}\cdot \sum_{m'} T^j_{m'}\, \langle jm' | \, \boldsymbol{J} \, | jm \rangle$$

$$[\,\boldsymbol{J}, T^j_m\,] = \sum_{m'} T^j_{m'}\, \langle jm' | \, \boldsymbol{J} \, | jm \rangle$$

Operadores tensoriales: rotación infinitesimal $D^j_{m'm}(\varepsilon) = \langle jm' | U(\varepsilon) | jm \rangle$

$$U(\boldsymbol{\varepsilon})\, T^j_m\, U^\dagger(\boldsymbol{\varepsilon}) = \sum_{m'} T^j_{m'}\, D^j_{m'm}(\boldsymbol{\varepsilon})$$

$$(1 - \tfrac{i}{\hbar}\, \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J})\, T^j_m\, (1 + \tfrac{i}{\hbar}\, \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J}) = \sum_{m'} T^j_{m'}\, \langle jm' | (1 - \tfrac{i}{\hbar}\, \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J}) | jm \rangle$$

$$T^j_m - \tfrac{i}{\hbar}\, \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J}\, T^j_m + \tfrac{i}{\hbar}\, T^j_m\, \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J} = \sum_{m'} T^j_{m'}\, \delta_{mm'} - \tfrac{i}{\hbar}\, T^j_{m'}\, \langle jm' | \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{J} | jm \rangle$$

$$-\tfrac{i}{\hbar}\, \boldsymbol{\varepsilon} \cdot [\boldsymbol{J}, T^j_m] = -\tfrac{i}{\hbar}\, \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \sum_{m'} T^j_{m'}\, \langle jm' | \boldsymbol{J} | jm \rangle$$

$$[\boldsymbol{J}, T^j_m] = \sum_{m'} T^j_{m'}\, \langle jm' | \boldsymbol{J} | jm \rangle$$

$$\begin{cases} [J_z, T^j_m] = \sum_{m'} T^j_{m'}\; \hbar\, m\; \langle jm' | j\, m \rangle = \hbar\, m\, T^j_m \\ [J_+, T^j_m] = \sum_{m'} T^j_{m'}\; \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\, \langle jm' | j\, m+1 \rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\; T^j_{m+1} \\ [J_-, T^j_m] = \sum_{m'} T^j_{m'}\; \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\, \langle jm' | j\, m-1 \rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\; T^j_{m-1} \end{cases}$$

Teorema de Wigner-Eckart

$$\langle \alpha\, j\, m \,|\, T^{j_1}_{m_1} \,|\, \alpha' j' m' \rangle = \langle j\, m | j_1 j' m_1\, m' \rangle \, \langle \alpha\, j \,\|\, T^{j_1} \,\|\, \alpha' j' \rangle$$

$$\frac{1}{\hbar} \langle \alpha\, j\, m \,| \left[J_{-} , T^{j_1}_{m_1} \right] |\, \alpha' j' m' \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \alpha\, j\, m \,|\, J_{-}\, T^{j_1}_{m_1} \,|\, \alpha' j' m' \rangle - \frac{1}{\hbar} \langle \alpha\, j\, m \,|\, T^{j_1}_{m_1}\, J_{-} \,|\, \alpha' j' m' \rangle$$

$$\sqrt{j_1 (j_1{+}1) - m_1 (m_1{-}1)}\, \langle j\, m \,|\, T^{j_1}_{m_1-1} \,| j' m' \rangle =$$

$$\sqrt{j\,(j{+}1) - m(m{+}1)}\, \langle j\, m{+}1 |\, T^{j_1}_{m_1} \,| j' m' \rangle - \sqrt{j' (j'{+}1) - m' (m'{-}1)}\, \langle j\, m \,|\, T^{j_1}_{m_1} \,| j' m'{-}1 \rangle$$

Teorema de Wigner-Eckart

$$\langle \alpha\, j\, m \,|\, T^{j_1}_{m_1} \,|\, \alpha' j' m' \rangle = \langle j\, m | j_1 j' m_1\, m' \rangle\, \langle \alpha j \,\|\, T^{j_1} \,\|\, \alpha' j' \rangle$$

$$\frac{1}{\hbar} \langle \alpha\, j\, m \,|\, \left[J_- \,, T^{j_1}_{m_1} \right] \,|\, \alpha' j' m' \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \alpha\, j\, m \,|\, J_- \, T^{j_1}_{m_1} \,|\, \alpha' j' m' \rangle - \frac{1}{\hbar} \langle \alpha\, j\, m \,|\, T^{j_1}_{m_1} \, J_- \,|\, \alpha' j' m' \rangle$$

$$\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)}\, \langle j\, m \,|\, T^{j_1}_{m_1-1} \,| j' m' \rangle =$$

$$\sqrt{j\,(j+1) - m(m+1)}\, \langle j\, m+1 |\, T^{j_1}_{m_1} \,| j' m' \rangle - \sqrt{j'(j'+1) - m'(m'-1)}\, \langle j\, m \,|\, T^{j_1}_{m_1} \,| j' m'-1 \rangle$$

Idéntico a la relación de recurrencia de los coeficientes de CG con $j_2 m_2 \to j' m'$:

$$\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)}\, \langle j\, m \,|\, j_1\, j_2, m_1-1\, m_2 \rangle =$$

$$\sqrt{j\,(j+1) - m(m+1)}\, \langle j\, m+1 | j_1\, j_2, m_1 m_2 \rangle - \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)}\, \langle j m \,|\, j_1\, j_2, m_1\, m_2-1 \rangle$$

Teorema de Wigner-Eckart

$$\langle \alpha j m \,|\, T^{j_1}_{m_1} \,|\, \alpha' j' m' \rangle = \langle j m | j_1 j' m_1 m' \rangle \, \langle \alpha j \,\|\, T^{j_1} \,\|\, \alpha' j' \rangle$$

$$\frac{1}{\hbar} \langle \alpha j m | \left[J_- , T^{j_1}_{m_1} \right] | \alpha' j' m' \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \alpha j m \,|\, J_- T^{j_1}_{m_1} \,|\, \alpha' j' m' \rangle - \frac{1}{\hbar} \langle \alpha j m \,|\, T^{j_1}_{m_1} J_- \,|\, \alpha' j' m' \rangle$$

$$\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1\text{-}1)} \, \langle j m \,|\, T^{j_1}_{m_1\text{-}1} \,| j' m' \rangle =$$

$$\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \, \langle j m+1 | \, T^{j_1}_{m_1} \,| j' m' \rangle - \sqrt{j'(j'+1) - m'(m'\text{-}1)} \, \langle j m \,|\, T^{j_1}_{m_1} \,| j' m'\text{-}1 \rangle$$

Idéntico a la relación de recurrencia de los coeficientes de CG con $j_2 m_2 \to j' m'$:

$$\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1\text{-}1)} \, \langle j m \,|\, j_1 j_2, m_1\text{-}1 \, m_2 \rangle =$$

$$\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \, \langle j m+1 | j_1 j_2, m_1 m_2 \rangle - \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2\text{-}1)} \, \langle jm \,|\, j_1 j_2, m_1 \, m_2\text{-}1 \rangle$$

$$\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1\text{-}1)} \, \langle j m \,|\, j_1 j_2, m_1\text{-}1 \, m_2 \rangle =$$

$$\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \, \langle j m+1 | j_1 j_2, m_1 m_2 \rangle - \sqrt{j'(j'+1) - m'(m'\text{-}1)} \, \langle jm \,|\, j_1 j', m_1 \, m'\text{-}1 \rangle$$

Descomposición en tensores irreducibles

$$T^{j}_{m} = \sum_{m_1 m_2} X^{j_1}_{m_1}\; Y^{j_2}_{m_2}\; \langle j_1 j_2, m_1\, m_2 | jm \rangle$$

$$\hbar^{-1} \left[J_+ , T^{j}_{m} \right] = \sum_{m_1 m_2} \hbar^{-1} \left\{ \left[J_+ , X^{j_1}_{m_1} \right] Y^{j_2}_{m_2} + X^{j_1}_{m_1} \left[J_+ , Y^{j_2}_{m_2} \right] \right\} \langle j_1\, j_2, m_1\, m_2 | jm \rangle =$$

$$= \sum_{m_1 m_2} X^{j_1}_{m_1+1}\, Y^{j_2}_{m_2} \sqrt{j_1(j_1{+}1){-}m_1(m_1{+}1)}\, \langle j_1\, j_2, m_1\, m_2 | jm \rangle +$$

$$+ \sum_{m_1 m_2} X^{j_1}_{m_1}\, Y^{j_2}_{m_2+1} \sqrt{j_2(j_2{+}1){-}m_2(m_2{+}1)}\, \langle j_1\, j_2, m_1\, m_2 | jm \rangle =$$

$$= \sum_{q_1 m_2} X^{j_1}_{m_1}\, Y^{j_2}_{m_2} \Big\{ \underbrace{\sqrt{j_1(j_1{+}1){-}m_1(m_1{-}1)}\, \langle j_1\, j_2, m_1{-}1\, m_2 | jm \rangle + \sqrt{j_2(j_2{+}1){-}m_2(m_2{-}1)}\, \langle j_1\, j_2, m_1\, m_2{-}1 | jm \rangle}_{\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\, \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j\, m+1 \rangle} \Big\}$$

$$= \sqrt{j(j{+}1){-}m(m{+}1)} \sum_{m_1 m_2} X^{j_1}_{m_1}\, Y^{j_2}_{m_2}\; \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | j\, m{+}1 \rangle$$

$$= \sqrt{j(j{+}1){-}m(m{+}1)}\;\; T^{j}_{m+1}$$

La base cartesiana

- Para $j = 1$ tenemos la base $\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,\text{-}1\rangle\}$.

- Otra posibilidad es la base cartesiana $\{|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle\}$, compuesta por kets invariantes ante rotaciones en $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$, es decir los autoestados de J_x, J_y, J_z con autovalor 0.

- Claramente es $|z\rangle = |1,0\rangle$ pues $U(\hat{z},\phi)\,|1,0\rangle = |1,0\rangle$.

- Para obtener $|x\rangle, |y\rangle$ aplicamos rotaciones: $|x\rangle = U(\hat{y}, \frac{\pi}{2})\,|z\rangle$ y $|y\rangle = U(\hat{z}, \frac{\pi}{2})\,|x\rangle$.

Usando: $d^1(\beta) = \dfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta & 1-\cos\beta \\ \sqrt{2}\sin\beta & 2\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta \\ 1-\cos\beta & \sqrt{2}\sin\beta & 1+\cos\beta \end{pmatrix} \longrightarrow d^1(\frac{\pi}{2}) = \dfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$

$$|x\rangle = U(\hat{y}, \tfrac{\pi}{2})\,|1,0\rangle = \sum_m |1,m\rangle\,\langle 1,m\,|\,U(\hat{y},\tfrac{\pi}{2})\,|1,0\rangle = \sum_m |1,m\rangle\, d^1_{m,0}(\tfrac{\pi}{2}) = \tfrac{-1}{\sqrt{2}}\big(|1,1\rangle - |1,\text{-}1\rangle\big)$$

$$|y\rangle = U(\hat{z},\tfrac{\pi}{2})\,|x\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\pi}{2}J_z}\,\tfrac{-1}{\sqrt{2}}\big(|1,1\rangle - |1,\text{-}1\rangle\big) = \tfrac{-1}{\sqrt{2}}\big(e^{-i\frac{\pi}{2}}|1,1\rangle - e^{i\frac{\pi}{2}}|1,\text{-}1\rangle\big) = \tfrac{i}{\sqrt{2}}\big(|1,1\rangle + |1,\text{-}1\rangle\big)$$

$$|z\rangle = |1,0\rangle$$

Singlete y triplete de $\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{3} \oplus \mathbf{5}$ en la base cartesiana

Sea S un tensor de rango cero. Sean T, V, W operadores vectoriales (tensores rango 1)

Los denotamos tanto por sus componentes esféricas como cartesianas.

- componentes esféricas $\{T_{+1}, T_0, T_{-1}\}$, que se transforman según $D^1_{mm'}(\alpha, \beta, \gamma)$
- componentes cartesianas, $\{T_x, T_y, T_z\}$, que se transforman según $R_{ij}(\alpha, \beta, \gamma)$

$$\begin{cases} T_{+1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(T_x + iT_y) \\ T_{-1} = \frac{-1}{\sqrt{2}}(T_x - iT_y) \\ T_0 = T_z \end{cases} \qquad \begin{cases} T_x = \frac{-1}{\sqrt{2}}(T_{+1} - T_{-1}) \\ T_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(T_{+1} + T_{-1}) \\ T_z = T_0 \end{cases}$$

Sea $V^1 \otimes W^1$. Usando CG escribimos el $\mathbf{1}$ y $\mathbf{3}$ (T^0 y T^1) de $\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{3} \oplus \mathbf{5}$:

$$\begin{cases} T^1_{+1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_1 W_0 - V_0 W_1) \\ T^1_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_0 W_{-1} - V_{-1} W_0) \\ T^1_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_1 W_{-1} - V_{-1} W_1) \\ T^0_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}(V_1 W_{-1} - V_0 W_0 + V_{-1} W_1) \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} T_x = V_y W_z - V_z W_y \\ T_y = V_z W_x - V_x W_z \\ T_z = V_x W_y - V_y W_x \\ T^0_0 = V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z \end{cases}$$

Ejemplo de operadores tensoriales: momentos multipolares

Campo electromagnético de una distribución de carga $\rho(\boldsymbol{r})$ y corriente $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r})$:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\Phi(\boldsymbol{r}) \qquad \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$$

donde el potencial eléctrico y magnético, dado $\rho(\boldsymbol{r})$ y $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r})$, son :

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \int \frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \qquad \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{c}\int \frac{\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

Desarrollo en armónicos esféricos de $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^{-1}$:

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1}\,\frac{r'^{\,\ell}}{r^{\ell+1}}\,Y^*_{\ell m}(\theta',\phi')\,Y_{\ell m}(\theta,\phi) \qquad \text{(con } r' < r\text{)}$$

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \int \frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}' = \sum_{\ell,m} \frac{4\pi}{2\ell+1}\,\underbrace{\int \rho(\boldsymbol{r}')\,r'^{\,\ell}\,Y^*_{\ell m}(\theta',\phi')\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}_{q_{\ell m}}\,\frac{1}{r^{\ell+1}}\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = 4\pi\sum_{\ell,m}\frac{4\pi}{2\ell+1}\,q_{\ell m}\,\frac{1}{r^{\ell+1}}\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

Ejemplo de operadores tensoriales: momentos multipolares

Los momentos eléctricos multipolares son :

$$q_{\ell m} = \int \rho(\boldsymbol{r})\, r^{\ell}\, Y^{*}_{\ell m}(\theta,\phi)\ \mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

y los operadores correspondientes :

$$Q_{\ell m} = \int q\, r^{\ell}\, Y^{*}_{\ell m}(\theta,\phi)\, |\,\boldsymbol{r}\,\rangle\langle\,\boldsymbol{r}\,|\ \mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

Verficar que $Q_{\ell m}$ es un operador esférico irreducible de rango ℓ :

$$[\,L_{+},\ Q_{\ell m}\,] = \hbar\,\sqrt{\ell(\ell{+}1) - m(m{+}1)}\, Q_{\ell\, m+1}$$

$$[\,L_{-},\ Q_{\ell m}\,] = \hbar\,\sqrt{\ell(\ell{+}1) - m(m\,\text{-}1)}\, Q_{\ell\, m-1}$$

$$[\,L_{z},\ Q_{\ell m}\,] = \hbar\, m\, Q_{\ell m}$$