

Ecuación de Dirac

Algebra del momento angular

El operador de momento angular orbital $\hat{\vec{L}}$ se puede definir en mecánica cuántica precisamente como en la teoría clásica,

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \quad (1)$$

notese que, $\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{r}}$. En coordenadas cartesianas, las componentes de $\hat{\vec{L}}$ son,

$$\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} X_j \hat{P}_k = -i\hbar \epsilon_{ijk} X_j \frac{\partial}{\partial X_k} \quad (2)$$

ϵ_{ijk} : tensor totalmente antisimétrico de Levi-Civita.

En coordenadas esféricas tomamos,

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (3)$$

De aquí se sigue que $\hat{L}$ conmuta con las funciones de r y $\frac{\partial}{\partial r}$, es decir,

$$[\hat{L}, f(r, \frac{\partial}{\partial r})] = 0 \quad (4)$$

Propiedades de conmutación de $\hat{L}$ con diferentes variables dinámicas,

$$[x_i, p(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial p}{\partial p_i} \quad ; \quad [\hat{p}_i, Q(x)] = -i\hbar \frac{\partial Q}{\partial x_i} \quad (5)$$

Ejemplo:

$$[\hat{L}_x, x] = 0$$

$$[\hat{L}_x, y] = i\hbar z$$

$$[\hat{L}_x, z] = -i\hbar y$$

$$\hat{L}_i = -i\hbar \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_x] = 0$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_y] = i\hbar \hat{p}_z$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_z] = -i\hbar \hat{p}_y$$

Considerando

$$P(\hat{p}) = \hat{p}^2 / 2m$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}^2 / 2m] = 0$$

$$\text{ó } [\hat{\vec{L}}, \hat{p}^2 / 2m] = 0$$

Simbolo de Levi-Civita:

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 \\ -1 \\ 0 \end{cases}$$

si $(i,j,k) \hookrightarrow$

$(1,2,3), (2,3,1)$ ó $(3,1,2)$

si $(i,j,k) \hookrightarrow$

$(3,2,1), (1,3,2)$ ó $(2,1,3)$

de otro modo $i=j$ ó $j=k$ ó $k=i$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$$
$$\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}} = i\hbar \hat{\vec{L}}$$

$$\text{y } [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

(6)

Es común definir $\hat{L}^2$ como la suma de los cuadrados de las componentes cartesianas de $\hat{L}$,

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0 \quad i=1,2,3 \quad (7)$$

Eigenvalores y eigenfunciones del momento angular orbital

- Para determinar las eigenfunciones $\psi(\theta, \varphi)$ y los eigenvalores de los operadores de momento angular orbital, estableceremos las correspondientes ecuaciones diferenciales, lo que se puede hacer fácilmente en coordenadas esféricas. Las ecuaciones a resolver son,

$$\hat{L}^2 \psi(\theta, \varphi) = \hbar^2 \lambda \psi(\theta, \varphi)$$

$$\hat{L}_z \psi(\theta, \varphi) = \hbar m \psi(\theta, \varphi)$$

→ (*)

los eigenvalores de $\hat{L}^2$ y m son adimensionales.

Tomando el cuadrado de $\hat{L}$, → (8)

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\hat{\varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \hat{\varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\hat{\theta}}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - \frac{\hat{\theta}}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\hat{\theta}}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\hat{\theta}}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right]$$

Los vectores cartesianos $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, $\hat{r}, \hat{\theta}$ y $\hat{\varphi}$ en términos de los vectores

$$\hat{r} = \hat{x} \sin \theta \cos \varphi + \hat{y} \sin \theta \sin \varphi + \hat{z} \cos \theta$$

$$\hat{\theta} = \hat{x} \cos \theta \cos \varphi + \hat{y} \cos \theta \sin \varphi - \hat{z} \sin \theta$$

$$\hat{\varphi} = -\hat{x} \sin \varphi + \hat{y} \cos \varphi$$

$$\frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \varphi} = -\hat{r} \sin \theta - \hat{\theta} \cos \theta$$

$$\frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \theta} = 0$$

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \varphi} = \hat{\varphi} \cos \theta$$

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\hat{r}$$

y

al insertarlos en la ecuación (8),

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

o finalmente,

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \rightarrow (9)$$

Para construir el operador $\hat{L}_z$ basta proyectar el $\hat{L}$ dado en la ecuación (3) en la dirección $\hat{z}$,

$$\hat{L}_z = -i\hbar \hat{z} \cdot \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\hat{\theta}}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

considerando $\hat{z} \cdot \hat{\varphi} = 0$, $\hat{z} \cdot \hat{\theta} = -\sin \theta$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \rightarrow (10)$$

Se obtiene

Al insertar las ecuaciones (9) y (10), las ecuaciones de eigenvalores (*) toman la forma,

$$\frac{\partial^2 \psi(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} = -im \psi(\theta, \varphi) \quad \text{y} \quad \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} = -\lambda \psi$$

La solución de la eq), $\psi(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) e^{im\varphi}$

Para que sea solución univaluada se requiere $\varphi \neq \varphi + 2\pi$
 tomen el mismo valor
 $e^{im\varphi} = e^{im(\varphi + 2\pi)} \Rightarrow e^{i2\pi m} = 1$

lo que exige que $|m| = 0, 1, 2, \dots$
 Al sustituir el valor de $\psi(\theta, \varphi)$,

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta(\theta) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta(\theta) + \lambda \Theta(\theta) = 0$$

Esta es la ecuación diferencial de Legendre, la que tiene soluciones regulares en $(0, \pi)$ para $m \geq 0$ si y sólo si $\lambda = l(l+1)$, $\lambda \geq |m|$ donde l es un número entero

Las soluciones de esta ecuación son las llamadas funciones asociadas de Legendre $\Theta(\theta) = P_l^m(x)$, $x = \cos \theta$

$$P_l^m(x) = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l$$

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^m(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'}$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \sim P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

$$\hat{L}^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m$$

$$\hat{L}_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m, \quad |m| = 0, 1, 2, \dots, \quad l \geq |m|$$

(11)

Representación matricial del momento angular

Nos hemos concretado a estudiar el momento angular asociado al movimiento orbital de las partículas. Sin embargo, es un hecho que las partículas elementales (electrones, protones, neutrones, etc...) poseen entre sus atributos intrínsecos, además de masa y carga, otras propiedades asociadas a números cuánticos, entre los que sobresale el espín o momento angular intrínseco.

El momento angular total $\vec{J}$ (lo llamaremos momento angular), se define como la suma de las contribuciones orbital $\vec{L}$ y espín $\vec{S}$,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (12)$$

Se puede generalizar,

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0$$

Las condiciones de eigenvalores las describimos como,
 λ es un eigenvalor reducido a $\lambda = l(l+1)$ cuando $\hat{J}$ se reduce a $\hat{J}$ (es decir, espín nulo)

$$\hat{J}^2 |jm\rangle = \hbar^2 \lambda |jm\rangle$$

$$\hat{J}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle$$

Como todo operador es diagonal en su propia representación, las matrices $\hat{J}^2$ y $\hat{J}_z$ son diagonales en la representación $|jm\rangle$.
Los elementos matriciales los podemos calcular como,

$$\langle j' m' | \hat{J}^2 | jm \rangle = \hbar^2 \lambda \langle j' m' | jm \rangle = \hbar^2 \lambda \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

$$\langle j' m' | \hat{J}_z | jm \rangle = \hbar m \langle j' m' | jm \rangle = \hbar m \delta_{jj'} \delta_{mm'}$$

Operadores de ascenso $\hat{J}_+$ y descenso $\hat{J}_-$ definidos como,

$$\hat{J}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{J}_x \pm i \hat{J}_y) \quad (13)$$

Matrices de Pauli
Las matrices de Pauli $\hat{\sigma}_i$ son

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

y $\hat{J} = \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}$ $\left\{ S_x = \frac{1}{2} \hbar \sigma_x, S_y = \frac{1}{2} \hbar \sigma_y, S_z = \frac{1}{2} \hbar \sigma_z \right\}$

Obtenemos las reglas de conmutación de las matrices de Pauli

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k \quad (14)$$

$$\hat{\sigma}_i^2 = \mathbb{I} \quad (\text{identidad})$$

Esas las conmutaciones se pueden resumir en la siguiente propiedad,

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \mathbb{I} \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k \quad (15)$$