

Ha de ser Ψ uniavaluada? Condicions de contorn periòdiques i les d'un anell, espinors i rotacions dobles

Josep Planelles
Dept. Química-Física i Analítica
Universitat Jaume I

31 de desembre de 2021

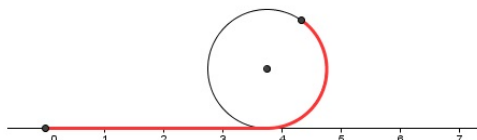
1 Introducció

El requeriment que les funcions d'ona en mecànica quàntica no relativista siguin uniavaluades se presenta de vegades com una de les condicions que cal exigir a una funció d'ona, és a dir com un postulat (veure e.g. McWeeny[1]). Tanmateix, atès que la funció d'ona no és un observable, i l'observable és el quadrat del seu mòdul, sembla immediat exigir caràcter uniavaluat a $|\Psi|^2$ i no a Ψ .

De fet, les condicions de contorn en el càlcul de bandes de sistemes periòdics deriven d'assumir que no hi ha cap diferència observable si l'electró està ubicat en la posició x o en la posició $x+a$, on a és la constant de cel·la, atès que el cristall és invariant sota translacions, i.e., les observacions del sistema abans i després d'efectuada una translació de pas a són indistingibles (cas contrari la translació no seria una operació de simetria!). Per tant, des de $|\Psi(x)|^2 = |\Psi(x+a)|^2$ concloem que $\Psi(x+a) = e^{i\phi}\Psi(x)$. És a dir, les funcions són iguals excepte una fase. Aleshores resollem l'equació de Schrödinger per a cada valor diferent de la fase $e^{i\phi}$, $\phi \in [-\pi, \pi]$ i quan representem les energies obtingudes vs. ϕ observem les bandes d'energia contínua (separades per gaps prohibits originats per la difracció de Bragg quan la longitud d'ona λ de la partícula i la constant a de la xarxa del cristall són commensurables $2a = n\lambda$, $n = 1, 2, \dots$).

De manera semblant, quan una partícula viatja lliure en una anell de radi R i està en una posició definida per un angle θ , una rotació completa fins a $\theta + 2\pi$ porta el sistema a una nova posició però no hi ha cap canvi observable. Aleshores, de manera anàloga al cristall periòdic en que $x \equiv x + na$, al cas de l'anell $\theta \equiv \theta + 2\pi n$. Aleshores, fent com en translacions diríem $|\Psi(\theta)|^2 = |\Psi(\theta + 2\pi)|^2$, i.e., $\Psi(\theta + 2\pi) = e^{i\phi}\Psi(\theta)$ i procediríem a resoldre l'equació de Schrödinger per a cada condició frontera $\{e^{i\phi}, \phi \in [-\pi, \pi]\}$ amb la qual cosa trobaríem un continu d'energia en lloc de la coneguda quantificació del moment angular.

Quina diferència hi ha entre els casos? Sens dubte a nivell local la partícula troba entorns equivalents en la recta i l'anell, i.e., $\mathbb{R}$ i S^1 són iguals localment: una circumferència S^1 de radi unitat la podem pensar com l'interval $[0, 2\pi]$ de $\mathbb{R}$ on hem identificat els extrems i on podem enrotllar tota la recta real $\mathbb{R}$ (vegeu figura), de manera que translacions en la recta queden identificades amb rotacions als llarg d'aquesta circumferència.



Ara bé, si considerem recta i anell immersos en $\mathbb{R}^2$ trobem diferències *globals*, com ara que en la circumferència podem definir interior i exterior, mentre que en la recta no, cosa que dota S^1 d'una topologia

diferent a $\mathbb{R}$. Les diferències són més evidents si considerem una cinta infinita amb espessor en lloc de la recta i un petit cilindre fofo en lloc de l'anell: la cinta és simplement connexa mentre que l'anell és doblement connex. Si considerem l'anell i el cristall periòdic immersos en $\mathbb{R}^3$ trobem que a l'anell θ i $\theta + 2\pi$ *etiqueten* el mateix punt d' $\mathbb{R}^3$ mentre que en la recta x i $x + a$ no. Diferències més essencials entre rotacions i translacions deriven del fet que els itineraris sobre un plànol són commutatius mentre que els itineraris sobre una esfera no ho són. La commutativitat translacional va lligada a la commutativitat de les components del moment lineal (que són els generadors de translacions) mentre que la no commutativitat en rotacions és reflex de la no commutativitat de les components del moment angular (que són les generadores de rotacions).

En resum, x i $x + a$ són equivalents però no són el mateix punt, per això diem $|\Psi(x)|^2 = |\Psi(x + a)|^2$, mentre que θ i $\theta + 2\pi$ sí que són el mateix punt i per això, amb l'objecte d'evitar tenir una funció multi-avaluada, diem $\Psi(\theta + 2\pi) = \Psi(\theta)$. La pregunta és si aquest requeriment d'uniavaluació és un postulat addicional de la mecànica quàntica o és conseqüència del propi formalisme. I també sorgeix una segona pregunta: que passa amb les funcions d'espín?

Si considerem mecànica quàntica no relativista sense espín, l'ús d'operadors de creació/anihilació (*ladder operators*), basats en les propietats de commutació de les components del moment angular, permeten trobar que el nombre quàntic ℓ pot ser enter o semi-enter. El càlcul analític de la determinació d'autofuncions del moment angular troba, per a valors enters d' ℓ , els harmònics esfèrics que són funcions uni-avaluades de la posició de la partícula. Els nombres quàntics fraccionaris fan que la funció d'ona canvie de signe si efectuem una rotació de l'angle axial des de ϕ a $\phi + 2\pi$, per tant ens trobaríem en front de funcions doble-avaluades. Com discutirem després amb més de detall, el harmònics esfèrics amb valors fraccionaris d' ℓ tenen propietats indesitjables i, de fet, no són base de cap representació del grup de simetria $SO(3)$ de les rotacions en tres dimensions. Com recorda Merzbacher,[2] Pauli suggeria substituir el postulat de funció uni-avaluada pel requeriment que les funcions siguin base de representacions del grup de simetria (veure apèndix). Podem trobar un raonament semblant en Le Bellac.[3] Per la seua banda, Riess evidencia que no fa falta introduir el caràcter uni-avaluat en les funcions d'ona de partícules no relativistes sense espín, atès que mostra que és conseqüència del caràcter el·líptic[5] de l'equació de Schrödinger.[4] De qualsevol manera, com indica Merzbacher,[2] la condició de funció uni-avaluada deriva dels fonaments de la mecànica quàntica i no és descabellat, com fa McWeeny,[1] simplificar la discussió i incloure'l com un postulat addicional.

Les funcions d'espín però escapen a aquestes consideracions, atès que *no són funció de les coordenades espacials* i per tant cal contextualitzar bé el significat de la frase *cal una doble rotació (4π radians) per recuperar la posició inicial*, que suggereix pensar que l'espín *viu* a una cinta de Möbius immersa en $\mathbb{R}^3$. De fet Ho i Morgan[6] mostren que el moment angular orbital pot adoptar valors semi-enters (i, per tant, podria haver una identificació amb l'espín) en espai topològics múltiples connexos de Kaluza-Klein. Parlem de l'espín en la següent secció.

2 Espín

L'experiment de Stern i Gerlach ens indica que l'electró té un moment angular intrínsec, que anomenem espín, amb mòdul $\frac{3}{4}\hbar$ i dues possibles orientacions $S_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$. Les equacions de valors propis del moment angular en coordenades esfèriques,

$$\hat{L}_z Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (1a)$$

$$\hat{L}^2 Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1)\hbar^2 Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (1b)$$

admeten la solució $\Psi = N \sin^{1/2} \theta e^{i\phi/2}$ que substituïda en l'eq. (1a) dóna lloc a $m = \frac{1}{2}$ i substituïda en (1b) dóna $\ell = \frac{1}{2}$. És a dir Ψ no és altra cosa que l'harmònic esfèric $Y_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$.

Una manera de trobar $Y_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}$ seria l'ús de l'operador *ladder down*[7] $\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$ que en coordenades esfèriques resulta:[8] $\hat{L}_- = \hbar e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right)$. Ara bé, en aplicar $\hat{L}_-$ a $Y_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}$ trobem $\Psi_2 = e^{-i\phi/2} \cot\theta \sqrt{\sin\theta}$, que no és una funció admissible per ser infinita en $\theta = 0$ i $\theta = \pi$, en lloc de trobar $\Psi_2 = N \sin^{1/2}\theta e^{-i\phi/2}$ que també és solució de les equacions (1) amb $\ell = \frac{1}{2}$, $m = -\frac{1}{2}$.

Una altra solució de les equacions (1) és $Y_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \sin^{1/2}\theta \cos\theta e^{i\phi/2}$, com se pot comprovar per substitució directa en les esmentades equacions. Doncs bé, si fem el càlcul de la integral $\langle Y_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} | \hat{L}_x | Y_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \rangle$ trobem que no és zero, cosa que vol dir que $\hat{L}_x$ mescla estats amb ℓ diferent, i, per tant, amb aquestes funcions $\hat{L}_x$ i $\hat{L}^2$ no commuten.

Cal afegir que les variables θ i ϕ en els paràgrafs anteriors són coordenades *internes* de l'electró, ja que de ser les mateixes que les coordenades del moment angular orbital, estariem identificant els operadors moment angular orbital i d'espín, cosa que entraria en contradicció amb commutadors que han de ser zero com ara $[\hat{L}_x, \hat{S}_y]$.

De totes formes el mal comportament dels harmònics esfèrics amb ℓ fraccionari exclou la possibilitat que $\hat{L}_i$ i $\hat{S}_i$ tinguin la mateixa forma però en coordenades diferents i independents. Per tant, hem de partir d'evidències sòlides per constuir el formalisme de les funcions d'espín com són que el mòdul d'aquest moment angular és $\frac{3}{4}\hbar^2$ i les components S_z són $\pm\frac{1}{2}\hbar$. En conseqüència, se segueix que tenim una base $\{\alpha, \beta\}$ bidimensional de funcions pròpies dels operadors $\hat{S}^2, \hat{S}_z$ amb $s = \frac{1}{2}, m_s = \pm\frac{1}{2}$, que no sabem de moment com són però que podem representar pels vectors columna $\alpha \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ i $\beta \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Aquest dos vectors generen un espai de vectors $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ que assumirem normalitzats, i.e., $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Tanmateix, $\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \beta | \beta \rangle = 1, \langle \alpha | \beta \rangle = 0$.

No sabem tampoc la forma dels operadors d'espín, però és immediat escriure la representació matricial de $\hat{S}_z$ en aquesta base de funcions pròpies: ha de ser diagonal i els elements de la diagonal han de ser els valors propis:

$$\mathbb{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (2)$$

Podem ara fer ús dels operadors creació aniquilació: $\hat{S}_{\pm} |s, m_s\rangle = \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} \hbar |s, m_s \pm 1\rangle$ i trobem que $\hat{S}_+ \alpha = \hat{S}_- \beta = 0$, $\hat{S}_+ \beta = \alpha$, $\hat{S}_- \alpha = \beta$, cosa que permet escriure la seua representació matricial:

$$\mathbb{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbb{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

Finalment,

$$\mathbb{S}_x = \frac{1}{2}(\mathbb{S}_+ + \mathbb{S}_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_x \quad \mathbb{S}_y = \frac{1}{2i}(\mathbb{S}_+ - \mathbb{S}_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_y \quad (4)$$

És immediat e.g. comprovar la correcta commutació $[\mathbb{S}_x, \mathbb{S}_y] = i\hbar \mathbb{S}_z$.

Una característica de la funció $Y_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = N \sin^{1/2}\theta e^{i\phi/2}$ és els seu caràcter doble-avaluat, i.e., $Y_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}(\theta, \phi) \neq Y_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}(\theta, \phi + 2\pi)$ i per tant cal efectuar dues voltes completes per retornar al punt inicial. Ens preguntem si aquesta és una característica d'aquestes funcions no acceptables o si realment les funcions d'espín són multi-avaluades.

Les rotacions de les funcions en l'espai ordinari estan generades pel moment angular: $R_{\mathbf{u}}(\theta) = e^{i \frac{\theta}{\hbar} \mathbf{L} \cdot \mathbf{u}}$. Aquest moment angular no actua sobre les funcions d'espín. Per tant, és d'esperar que les rotacions de les funcions d'espín les genere el moment angular d'espín. Escrivim cada component:

$$\begin{aligned} R_z(\theta) &= e^{i \frac{\theta}{\hbar} S_z} = e^{i \frac{\theta}{2} \sigma_z} ; \text{ amb } \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ R_x(\theta) &= e^{i \frac{\theta}{\hbar} S_x} = e^{i \frac{\theta}{2} \sigma_x} ; \text{ amb } \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ R_y(\theta) &= e^{i \frac{\theta}{\hbar} S_y} = e^{i \frac{\theta}{2} \sigma_y} ; \text{ amb } \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5)$$

L'aparició d'angles meitat en els operadors de rotació, que deriven del valor fraccionari del nombre quàntic d'espín $s = \frac{1}{2}$ implica la necessitat d'una rotació 4π per recuperar la matriu identitat. En aquest sentit, les funcions d'espín, que anomenem *espinors*, han de fer una rotació 4π per recuperar la posició inicial. Sembla que un espinor és com un vector sobre una cinta de Möbius, on cal rodar dues voltes la cinta per retornar al punt inicial. Estudiem en la secció següent els espinors amb un poc més de detall.

3 Espinors

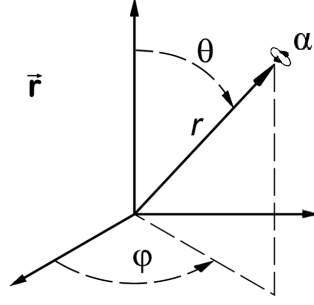
Sabem que la massa i la càrrega elèctrica són escalars, és a dir són invariants sota qualsevol rotació. El moment lineal no ho és i se transforma amb les rotacions d'una manera característica que anomenem vectorial. Diem que el moment lineal és un vector de tres coordenades. Les transformacions sota rotacions del moment quadrupolar o el tensor d'inèrcia suggereixen una generalització del concepte de vector. Diem que són tensors de segon ordre i se representen per una matriu simètrica 3×3 amb sis coordenades independents. El moment angular o el camp magnètic, que representem generalment com un vector de tres coordenades, se comporten sota rotacions com el moment lineal i en eixe sentit semblen un vector, però se transformen de manera diferent sota reflexions. I se diu que són vectors axials, que és una manera d'amagar el seu caràcter de tensor asimètricament de traça nul·la que també té tres coordenades independents.¹ Per tal d'acomodar e.g. el moment octupolar elèctric o altres magnituds físiques podem definir tensors de rang superior. En resum, la massa seria un tensor de rang zero, el moment lineal un tensor de rang 1, el moment d'inèrcia un tensor de rang 2, etc. La funció d'espín però no encaixa en la definició de tensor. Cal generalitzar aquest concepte per acomodar l'espín. A l'espinor li passa alguna cosa semblant al que li passa al camp magnètic: sembla un vector, però sota rotacions se comporta de manera diferent. Aleshores haurem de generalitzar el concepte de vector d'alguna manera que done cabuda a l'espín i l'anomenarem espinor de rang 1 o simplement espinor. Una volta definit l'espinor de rang 1 podem definir espinors de rang superior seguint el mateix procediment amb el que construïm tensors de rang superior a partir del tensor de rang 1 o vector.

Podem visualitzar un espinor (vegeu figura) com l'estat posicional d'una trompa en rotació: els angles θ i ϕ fixen l'eix de rotació, la longitud r d'un vector al llarg d'aquest eix determina la velocitat de rotació i α representa l'angle de rotació, i cal afegir un signe que represente el sentit de la rotació. Per tant, a banda del signe, que considerarem positiu mentre no diguem el contrari, podem representar un espinor mitjançant 4 números reals.²

¹El plànol de reflexió σ_{xy} , que representem amb la matriu $\sigma_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, actua sobre un vector de $\mathbb{R}^3$ canviant-li el signe de la tercera component. Per tant, si representem el camp magnètic amb un vector d' $\mathbb{R}^3$ i li apliquem σ_{xy} la cosa no funciona, però si el representem pel tensor antisimètric $\mathbb{B} = \begin{pmatrix} 0 & z & y \\ -z & 0 & x \\ -y & -x & 0 \end{pmatrix}$, la corresponent transformació,

$\mathbb{B}' = \sigma_{xy}^t \mathbb{B} \sigma_{xy} = \mathbb{B}$, se comporta correctament.

²De fet, una manera equivalent de definir spinors és considerar-lo un objecte de l'espai-temps tetradimensional que se transforma d'acord amb transformades de Lorentz.[9]



Alternativament, atès que havíem representat les funcions α, β d'espín per matrius columna de dos files, podem representar l'espín mitjançant dos nombres complexos $z_1 = r_1 e^{i\theta_1}$, $z_2 = r_2 e^{i\theta_2}$. A partir d'aquests dos nombres complexos podem extraure quatre nombres reals de la següent manera:

$$\begin{aligned} p_1 &= |z_1|^2 + |z_2|^2 = r_1^2 + r_2^2 \\ p_2 &= |z_1|^2 - |z_2|^2 = r_1^2 - r_2^2 \\ p_3 &= z_1 z_2^* + z_1^* z_2 = r_1 r_2 \left(e^{i(\theta_1 - \theta_2)} + e^{-i(\theta_1 - \theta_2)} \right) = r_1 r_2 2 \cos \Delta\theta \\ p_4 &= i(z_1 z_2^* - z_1^* z_2) = i r_1 r_2 \left(e^{i(\theta_1 - \theta_2)} - e^{-i(\theta_1 - \theta_2)} \right) = r_1 r_2 (-2) \sin \Delta\theta \end{aligned}$$

Podem identificar aquests nombres reals amb el mòdul i les components del vector $\mathbf{r}$ que descriu l'eix de rotació i velocitat de gir si fem que $r_1 = \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2}$ i $r_2 = \sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2}$. Aleshores trobem que $p_1 = r_1^2 + r_2^2 = r$ i $p_2 = r_1^2 - r_2^2 = r(\cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2}) = r \cos \theta = r_z$. Tanmateix, $r_1 r_2 = r \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} r \sin \theta$. Aleshores, podem identificar $p_3 = r_1 r_2 2 \cos \Delta\theta = r \sin \theta \cos \Delta\theta$ amb r_x i $p_4 = r_1 r_2 (-2) \sin \Delta\theta = r \sin \theta (-\sin \Delta\theta)$ amb r_y si anomenem $\Delta\theta = -\phi$, que ho podem aconseguir fent que $\theta_1 = -\frac{\alpha+\phi}{2}$ i $\theta_2 = \frac{\alpha-\phi}{2}$.

Amb aquestes identifikacions podem escriure $z_1 = \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\alpha+\phi)/2}$ i $z_2 = \sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i(\alpha-\phi)/2}$ i expressar l'espín mitjançant el vector complex:

$$|s\rangle = \sqrt{r} e^{-i\alpha/2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \quad (6)$$

En particular, $r = 1, \alpha = 0, \theta = 0, \phi = 0$ dóna lloc a l'espín $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, mentre que $r = 1, \alpha = 0, \theta = \pi, \phi = 0$ dóna lloc a l'espín $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Les components r_x, r_y, r_z del vector $\mathbf{r}$ també se poden calcular a partir de $|s\rangle$ amb el concurs de les matrius de Pauli:

$$r_x = \langle s | \sigma_x | s \rangle \quad r_y = \langle s | \sigma_y | s \rangle \quad r_z = \langle s | \sigma_z | s \rangle \quad (7)$$

Comprovem-ne un cas (anàlogament es poden comprovar els altres dos):

$$\begin{aligned} r_x &= \sqrt{r} e^{i\alpha/2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} & \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sqrt{r} e^{-i\alpha/2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \\ &= r \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} & \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \end{pmatrix} \\ &= r \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) = r \sin \theta \cos \phi. \end{aligned}$$

4 Transformacions d'espínors

Atès que representem un espínor per un vector complex de dos dimensions, les transformacions que conserven la longitud d'aquest vector són les transformacions unitàries 2×2 de determinant unitat (aquestes matrius conformen conjuntament l'anomenat grup $SU(2)$ de Lie). En efecte, de la definició de matriu unitària, $\mathbb{U}^\dagger \mathbb{U} = \mathbb{U} \mathbb{U}^\dagger = \mathbb{1}$, podem escriure $\mathbb{U}$ com l'exponencial d'una matriu hermítica $\mathbb{A}$ (i.e. $\mathbb{A} = \mathbb{A}^\dagger$). Tenim doncs $\mathbb{U} = e^{i\mathbb{A}}$, $\mathbb{U}^\dagger = e^{-i\mathbb{A}}$ i per tant $\mathbb{U} \mathbb{U}^\dagger = e^{i\mathbb{A}} e^{-i\mathbb{A}} = \mathbb{1}$.

Per una altra banda, com $\mathbb{U} \mathbb{U}^\dagger = \mathbb{1}$, tenim que $\det(\mathbb{U}) \det(\mathbb{U}^\dagger) = \det(\mathbb{U}) \det(\mathbb{U})^* = 1$. Per tant, $\det(\mathbb{U})$ ha de ser un nombre complex de mòdul unitat $e^{i\phi}$. També, des de la propietat general dels determinants, que diu que el determinant de l'exponencial d'una matriu és l'exponencial de la seua traça: $\det(e^{\mathbb{A}}) = e^{\text{tr}(\mathbb{A})}$, concloem que cal que la matriu hermítica $\mathbb{A}$ tinga traça zero per tal que la matriu unitària $\mathbb{U} = e^{i\mathbb{A}}$ tinga determinant unitat.

Podem escriure de manera completament general una matriu hermítica de traça zero en la forma:

$$\begin{pmatrix} a & b - ic \\ b + ic & -a \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = a\sigma_z + b\sigma_x + c\sigma_y \quad (8)$$

on, de nou, σ_i són les matrius de Pauli. Per tant les matrius de Pauli constitueixen l'àlgebra de generadors de les transformacions unitàries de determinant unitat en dos dimensions, grup $SU(2)$: $\mathbb{U} = e^{i\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}}$, on $\mathbf{n} = |n\rangle$ és el vector unitat en la direcció del vector de coordenades a, b, c i θ la seua norma. Podem interpretar $\mathbb{U}$ com una rotació en l'espai complex bidimensional, fent un paral·lelisme amb les rotacions en espais tridimensionals reals, que són generades pel moment angular: $\mathbb{R}(\theta) = e^{i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}}$.

4.1 Rotacions d'espínors i vectors

En una secció anterior hem establert la correspondència entre l'espínor $|s\rangle = \sqrt{r} e^{-i\alpha/2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{pmatrix}$ i el vector polar $\mathbf{r}$ de coordenades cartesianes (r_x, r_y, r_z) i coordenades esfèriques (r, θ, ϕ) . En particular hem vist, eq. (7), que $r_i = \langle s | \sigma_i | s \rangle$ i acabem de demostrar que les transformacions unitàries podien ser escrites en la forma $\mathbb{U} = e^{i\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}}$ i, per analogia amb les rotacions de vector en $\mathbb{R}^3$, considerem les tres components $\mathbb{U}_i = e^{i\theta \sigma_i}$ amb $i = x, y, z$. Tot seguit estudiarem com les transformacions de l'espínor se tradueixen en transformacions del vector 3D associat. Amb aquesta finalitat comencem escrivint algunes identitats que se poden comprovar per substitució directa dels símbols per les matrius: $\sigma_z^2 = \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \mathbb{1}$. Aleshores,

$$e^{i\theta \sigma_i} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^n}{n!} \sigma_i^n = \left(\sum_{n=0,2,4,\dots} \frac{(i\theta)^n}{n!} \right) \mathbb{1} + \left(\sum_{n=1,3,\dots} \frac{(i\theta)^n}{n!} \right) \sigma_i = \cos \theta \mathbb{1} + i \sin \theta \sigma_i \quad (9)$$

perquè el primer parèntesi és l'expansió en sèrie Taylor de $\cos \theta$ i el segon la de $\sin \theta$ multiplicada pel nombre imaginari i .

Amb aquest fonament considerem la transformació $\mathbb{U}_z$ de l'espínor $|s\rangle$: $|s'\rangle = \mathbb{U}_z |s\rangle = e^{i\theta \sigma_z} |s\rangle$. Calculem la transformació del vector associat $|r'\rangle = \langle s' | \boldsymbol{\sigma} | s' \rangle$, component a component:

$$\begin{aligned} z' &= \langle s' | \sigma_z | s' \rangle = \langle s | e^{-i\theta \sigma_z} \sigma_z e^{i\theta \sigma_z} | s \rangle = \langle s | \sigma_z e^{-i\theta \sigma_z} e^{i\theta \sigma_z} | s \rangle = \langle s | \sigma_z | s \rangle = z \\ x' &= \langle s' | \sigma_x | s' \rangle = \langle s | (\cos \theta \mathbb{1} - i \sin \theta \sigma_z) \sigma_x (\cos \theta \mathbb{1} + i \sin \theta \sigma_z) | s \rangle \end{aligned}$$

En aplegar a aquest punt recordem algunes identitats que se poden comprovar per substitució directa dels símbols per les matrius: $\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z$, $\sigma_y \sigma_x = -i \sigma_z$ i permutacions cícliques. Per tant, $\sigma_z \sigma_x \sigma_z = -\sigma_x$, amb la qual cosa,

$$\begin{aligned} x' &= \langle s | (\cos^2 \theta \sigma_x + \sin^2 \theta \sigma_z \sigma_x \sigma_z + i \cos \theta \sin \theta \sigma_x \sigma_z - i \sin \theta \cos \theta \sigma_z \sigma_x) | s \rangle \\ &= \langle s | \sigma_x | s \rangle (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + \langle s | \sigma_y | s \rangle 2 \sin \theta \cos \theta = x \cos 2\theta + y \sin 2\theta \end{aligned}$$

Anàlogament $y' = -x \sin 2\theta + y \cos 2\theta$. Per tant, observem que una rotació θ de l'espínor se tradueix en una rotació 2θ del vector associat. En altres paraules, una rotació 2π del vector equival a una rotació π de l'espínor. Tanmateix, des de $\mathbb{U}_i(\theta) = e^{i\theta\sigma_i} = \cos\theta \mathbb{1} + i \sin\theta \sigma_i$, tenim que $\mathbb{U}_i(\pi) = -\mathbb{1}$, cosa que canvia el signe de l'espínor sobre qui actua.

Cal una rotació 4π (efectuar dues voltes) del vector perquè l'espínor recupere el punt inicial. Per tal d'assignar el mateix valor de l'angle a la rotació 3D real i la 2D complexa se sol escriure $\mathbb{U}_j(\theta) = e^{i\frac{\theta}{2}\sigma_j}$, cosa que tenint en compte que les matrius d'espín són la meitat que les de Pauli, permet escriure (en a.u.) que: $\mathbb{U}_j(\theta) = e^{i\theta\hat{S}_j}$, amb la qual cosa l'equivalència amb les rotacions generades pel moment angular orbital i d'espín és completa.

Una conclusió del doblat de l'angle en rotacions 3D (grups $SO(3)$ de rotacions) respecte de les rotacions complexes 2D (grups $SU(2)$ unitari) és que a cada dos elements de $SU(2)$ li'n correspon un de $SO(3)$: la correspondència $SU(2) - SO(3)$ és homomorfa però no isomorfa. Podem expressa açò mateix dient que les funcions d'espín són base d'una representació *projectiva* d' $SO(3)$, entenent per projectiva que si $R_3 = R_1 R_2$ la representació $D(R_3) = \epsilon D(R_1) D(R_2)$ amb $\epsilon \neq 1$ (en les representacions ordinàries, també anomenades vectorials, $\epsilon = 1$).

4.2 Espínors de rang superior

Mostrarem breument la construcció de tensors T_{xy} de rang 2 a partir de dos tensors de rang 1 o vectors $|r_1\rangle, |r_2\rangle$. Definim $T_{xy} = |r_1\rangle\langle r_2|$. En notació matricial:

$$T_{xy} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 & y_2 & z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 x_2 & x_1 y_2 & x_1 z_2 \\ y_1 x_2 & y_1 y_2 & y_1 z_2 \\ z_1 x_2 & z_1 y_2 & z_1 z_2 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Fem notar que si $|r_1\rangle = |r_2\rangle$ el tensor resultant és simètric. A partir d'un tensor general de rang 2 podem extreure un tensor simètric sense traça, un antisimètric i un escalar de la següent manera:

$$\begin{aligned} \mathbb{T} &= \begin{bmatrix} x_1 x_2 & x_1 y_2 & x_1 z_2 \\ y_1 x_2 & y_1 y_2 & y_1 z_2 \\ z_1 x_2 & z_1 y_2 & z_1 z_2 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{3} \text{Tr}(\mathbb{T}) \mathbb{1} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & x_1 y_2 - y_1 x_2 & x_1 z_2 - z_1 x_2 \\ y_1 x_2 - x_1 y_2 & 0 & y_1 z_2 - z_1 y_2 \\ z_1 x_2 - x_1 z_2 & z_1 y_2 - y_1 z_2 & 0 \end{bmatrix} \\ &\quad + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} x_1 x_2 + x_2 x_1 - \frac{2}{3} \text{Tr}(\mathbb{T}) & x_1 y_2 + y_1 x_2 & x_1 z_2 + z_1 x_2 \\ y_1 x_2 + x_1 y_2 & y_1 y_2 + y_2 y_1 - \frac{2}{3} \text{Tr}(\mathbb{T}) & y_1 z_2 + z_1 y_2 \\ z_1 x_2 + x_1 z_2 & z_1 y_2 - y_1 z_2 & z_1 z_2 + z_2 z_1 - \frac{2}{3} \text{Tr}(\mathbb{T}) \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{3} \text{Tr}(\mathbb{T}) \mathbb{1} + \begin{bmatrix} 0 & c & b \\ -c & 0 & a \\ -b & -a & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D_1 & A & B \\ A & D_2 & C \\ B & C & D_3 \end{bmatrix} \quad (11) \end{aligned}$$

with $D_1 + D_2 + D_3 = 0$.

Ara, anem a veure com es transformen els tensors. Amb aquesta finalitat considerem $|r'\rangle = M|r\rangle$ la transformació de $|r\rangle$ per M . La transformació del dual serà $\langle r'| = \langle r|M^\dagger$ i, en conseqüència, la del tensor serà: $T'_{xy} = |r'\rangle\langle r'| = M|r\rangle\langle r|M^\dagger = MT_{xy}M^\dagger$. Per això mentre que la transformació de les coordenades d'un vector se calculen:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = (M) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

les d'un tensor de rang 2 se calculen:

$$\begin{pmatrix} x'_1 x'_2 & x'_1 y'_2 & x'_1 z'_2 \\ y'_1 x'_2 & y'_1 y'_2 & y'_1 z'_2 \\ z'_1 x'_2 & z'_1 y'_2 & z'_1 z'_2 \end{pmatrix} = (\mathbb{M}) \begin{pmatrix} x_1 x_2 & x_1 y_2 & x_1 z_2 \\ y_1 x_2 & y_1 y_2 & y_1 z_2 \\ z_1 x_2 & z_1 y_2 & z_1 z_2 \end{pmatrix} (\mathbb{M}^\dagger)$$

De la mateixa manera, si anomenem $|s\rangle = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$ un espinor arbitrari que se transforma segons $|s'\rangle = U|s\rangle$, podem formar un espinor hermític fent el producte $|s\rangle\langle s| = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1^* & z_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |z_1|^2 & z_1 z_2^* \\ z_1^* z_2 & |z_2|^2 \end{pmatrix}$ que se transformarà segons: $|s'\rangle\langle s'| = U|s\rangle\langle s|U^\dagger$.

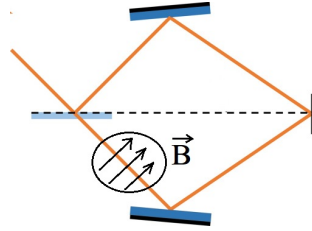
Com $|z_1|^2, |z_2|^2 \in \mathbb{R}$ i $(z_1^* z_2)^* = z_1 z_2^*$, poden escriure $|z_1|^2 = t + z$, $|z_2|^2 = t - z$, $z_1^* z_2 = x - iy$, $z_1 z_2^* = x + iy$, amb $x, y, z, t \in \mathbb{R}$, de manera que:

$$|s\rangle\langle s| = \begin{pmatrix} t + z & x - iy \\ x + iy & t - z \end{pmatrix} = t\mathbb{1} + x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z$$

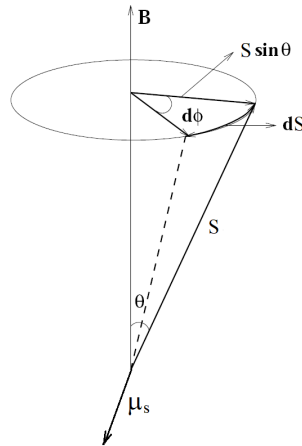
Un espinor hermític de rang 2 pot representar-se per una matriu hermítica 2D, no necessàriament de traça zero (serà de traça zero si $t=0$), i pot sempre expressar-se en termes de la matriu identitat i les matrius de Pauli (unicament en termes de les matrius de Pauli si la traça és zero).

5 L'experiment

Hem dit que una rotació 2π canvia el signe de la funció d'espín. Ara bé, les fases de les funcions d'ona no són directament observables. L'única manera de poder detectar-les és efectuant una comparació entre un estat rotat i un no rotat, a través d'interferències.



Dividim un feix de neutrons (d'espín $1/2$) en dos i fem seguir els dos feixos camins equivalents, excepte que un dels camins travessa una regió on hi ha aplicat un camp magnètic uniform, després espills estratègicament situats faran confluir els dos feixos en el mateix punt sobre una pantalla on enregistrar el senyal.



El neutró té un moment magnètic $|\mu_s\rangle$ associat amb el moment angular d'espín: $|\mu_s\rangle = \beta|S\rangle$, amb $\beta = \frac{e}{m}$. L'acció del camp sobre el dipol és la d'un parell de forces que fa rotar el vector $|S\rangle$ en el plànol definit pel camp $|B\rangle$ i el propi vector $|S\rangle$, cosa que genera un increment $d|S\rangle$ de moment angular *perpendicular* a aquest plànol. El moment del parell de forces és $M = |\mu_s\rangle \times |B\rangle = \frac{d|S\rangle}{dt}$. Per tant, $\frac{d|S\rangle}{dt} = \beta|S\rangle \times |B\rangle$.

De la figura, $d|S\rangle = |S| \sin \theta d\phi |u\rangle$, on $|u\rangle$ és un vector unitari en la direcció de $d|S\rangle$. Per tant, tenim $|S| \sin \theta \frac{d\phi}{dt} = \beta|S||B| \sin \theta \rightarrow \omega \equiv \frac{d\phi}{dt} = \beta B$, on ω és la velocitat angular de precessió.

El neutró que travessa el camp tindrà un espín amb la fase canviada. Si anomenem $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$ al període de precessió, resulta que el període de canvi de fase serà el doble $\tau_f = \frac{4\pi}{\omega}$. En conseqüència, si els neutrons tarden un temps T en travessar el camp magnètic, la fase de la seua funció canviarà en $e^{i\omega T/2}$.

En funció de la intensitat de camp $|B|$, i per tant del valor de la freqüència ω de precessió, hi haurà un tipus d'interferència amb l'altre feix. Podem calcular la diferència de camps que produeixen dos màxims d'interferència consecutius en el patró d'interferències. Per exemple, si un del màxims està a $B = \omega = 0$, l'altre estarà a $\omega = 4\pi$. Doncs bé, en 1975, dos grups van publicar aquesta observació experimental![10, 11]

Ara podem entendre millor la frase en el llibre de Le Bellac[3] (pag. 234) on diu que la rotació identitat real d'un objecte *en relació al seu voltant* no és una rotació 2π sinó una 4π . La no equivalència entre una rotació 2π i una 4π pot visualitzar-se efectuant les rotacions en un objecte unit a un extrem d'una cinta que té fix l'altre extrem (*Dirac's belt*). Si rotem l'objecte un angle de 2π produïm un torçament en la cinta que no hi ha manera de desfer sense fer rotar de nou l'objecte. Ara bé, si continuem rotant en la mateixa direcció fins a 4π produïm una torcedura afegida a la cinta. Però si movem l'objecte cap a l'extrem fix de la cinta i el passem *sense rotar-lo!* de la dreta a l'esquerra per davall la cinta i després estirem, aleshores el nus s'esvaeix i tornem a la posició original (veure e.g. Staley[12]). La no equivalència d'una rotació 2π i una 4π està lligada al fet que el grup $SO(3)$ de rotacions en 3D és doblement connex (mentre que el seu grup cobertor, *covering group*, $SU(2)$ és simplement connex).

5.1 La connexió de $SU(2)$ i $SO(3)$

5.1.1 La connexió de $SU(2)$

Els elements de $SU(2)$ són matrius 2×2 unitàries unimodulars $\mathbb{U} = \begin{pmatrix} z_1 & -z_2^* \\ z_2 & z_1^* \end{pmatrix}$:

$$\mathbb{U}^\dagger = \begin{pmatrix} z_1 & -z_2^* \\ z_2 & z_1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1^* & -z_2^* \\ -z_2 & z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |z_1|^2 + |z_2|^2 & z_1 z_2^* - z_2^* z_1 \\ z_2 z_1^* - z_1^* z_2 & |z_1|^2 + |z_2|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\det \mathbb{U} = |z_1|^2 + |z_2|^2 = 1$$

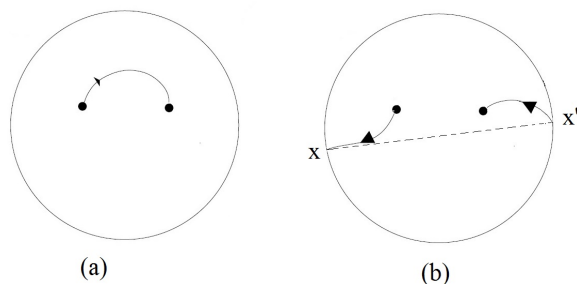
Si escrivim $z_1 = x_1 + ix_2$, $z_2 = x_3 + ix_4$, la condició $|z_1|^2 + |z_2|^2 = 1$ se tradueix en $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = 1$ que és l'equació d'una 3-esfera de radi unitat immersa en $\mathbb{R}^4$. Per tant podem establir un isomorfisme diferenciable (difeomorfisme) $SU(2) \leftrightarrow S^3 \subset \mathbb{R}^4$, i com les esferes són simplement connexes, també ho és $SU(2)$.

5.1.2 La doble connexió de $SO(3)$

Qualsevol rotació pot definir-se mitjançant un vector de longitud igual a l'angle de rotació i direcció (θ, ϕ) la de l'eix de rotació: $R_{\mathbf{n}}(\psi) = R(\psi, \theta, \phi)$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$ i com $R_{-\mathbf{n}}(\psi) = R_{\mathbf{n}}(\psi)$ podem restringir ψ : $0 \leq \psi \leq \pi$.

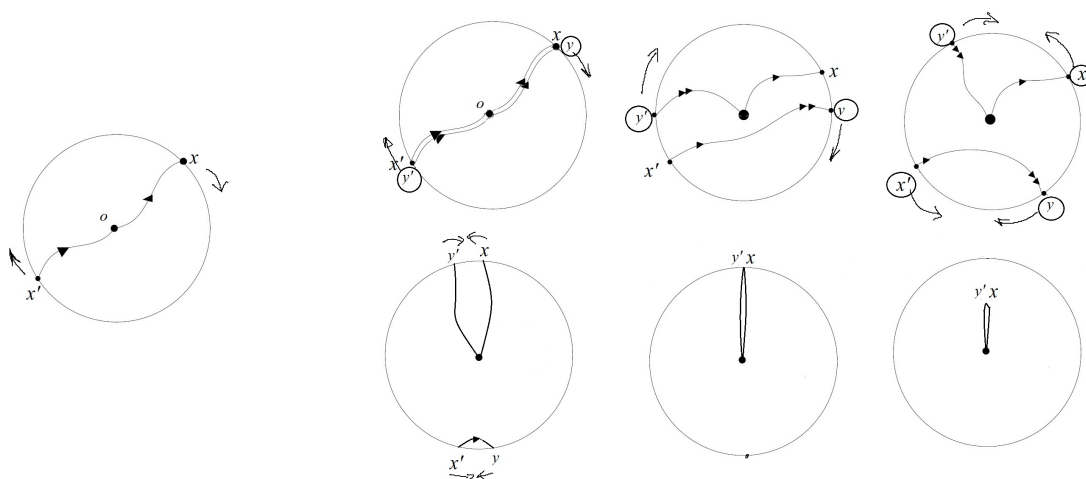
Podem representar els paràmetres de la rotació R mitjançant els punts d'una esfera de radi π amb la redundància que dos punts antipodals (dos punts de la superfície que siguen extrem d'un diàmetre) són el mateix punt, atès que les rotacions π i $-\pi$ sobre un eix són la mateixa rotació.[13] Aquesta identitat

fa que les imatges de dos rotacions R_1 i R_2 en l'espai de paràmetres puguin ser unides per dos camins no equivalents (vegeu figura).

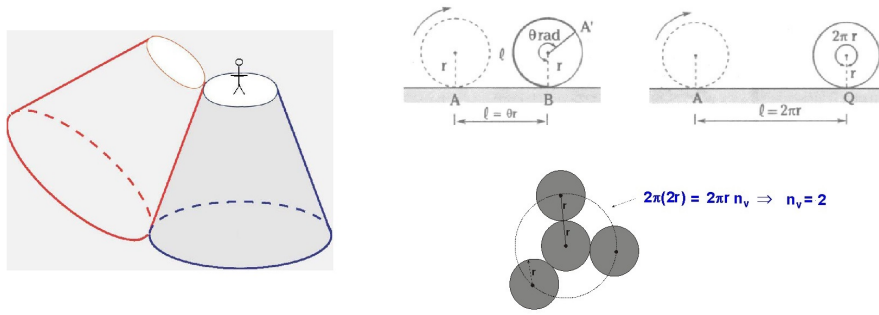


El camí (b) no podem deformar-lo contínuament i convertir-lo en el camí (a), perquè si movem x sobre la superfície, automàticament x' es mou per ficar-se antipodal i mai aplegaríem a trobar el camí (a). Tanmateix, si separem x de la superfície, aleshores, el camí se trenca en dos camins separats.

Aquesta doble connexió també és responsable del següent: si partim d'una rotació zero (punt central de l'esfera) i rotem 2π al voltant de l'eix e.g. vertical (partim del centre, anem al pol nord, botem al pol sud i tornem al centre) el camí no pot deformar-se fins convertir-se en el punt central.... però si rotem 4π si que podem! (vegeu figura).



Aleshores, si mantenim còpia d'un vector (o d'un objecte) i l'unim a una cinta (que acumula la rotació en forma de torcedura) amb la imatge després de rotar-lo 2π , i aleshores mantenim fixos els vectors original i copia rotada, no hi ha manera de desfer les rotacions intermèdies que deixen torçada la cinta. En canvi, si la rotació és 4π si que hi ha manera de desfer les rotacions intermèdies i allisar la cinta mantenint fixos vectors original i copia rotada. Cosa que harmonitza amb el concepte de rotació *en relació als voltants* del llibre de Le Bellac.[3] En el cas $SU(2)$ en ser un grup de transformacions simplement connex, les transformacions i els paràmetres que les etiqueten tenen una absoluta identificació.



Hi ha una altra enganyifa, anomenada del doble conus de Weyl, que exemplifica encara millor el concepte de rotació *en relació als voltants*. L'enganyifa de Weyl, que és la mateixa que la de la rotació d'una moneda al voltant d'un altra idèntica (vegeu figura), mostra que cal efectuar dues voltes completes de la moneda que roda per tornar al punt inicial, atès que quan una moneda efectua una volta completa, el seu centre se desplaça una distància $2\pi R$, amb R el radi de la moneda, radi que coincideix amb el radi de rotació. Mentre que el radi de rotació és $2R$ (suma dels radis de les dos monedes) quan una moneda roda al voltant d'una altra, i per això ens cal efectuar dues rotacions $2 \times 2\pi R$ per a avançar la longitud $2\pi(2R)$. Tanmateix, s'evidencia que si fem rodar una moneda al voltant d'una altra de radi $2R$, aleshores, el radi de rotació és $3R$, cosa que vol dir que cal fer tres voltes completes. Tanmateix, si el radi de la moneda fixa és $1.75R$, el radi de rotació és $2.75R$ i cal voltar 4 voltes completes la moneda central (mentre la moneda mòbil roda 11 vegades al voltant del seu centre) per tornar a la posició inicial. Per tant, si bé el *Dirac's belt* i els conus de Weyl són exemples enginyosos, cal no considerar-los cap demostració concreta de les propietats del les funcions d'espín.

6 Apèndix: El requeriment de Pauli (les funcions d'ona ha de constituir bases de les representacions del grup de simetria de l'Hamiltonià)

Incloem aquí un argument elemental que recolza el suggeriment de Pauli sobre el requisit que el conjunt de funcions pròpies haurien de ser base de les representacions del grup de simetria. Amb aquesta finalitat anomenem R_k a una transformació qualsevol que deixa invariant l'Hamiltonià $\hat{H}$: $R_k \hat{H} R_k^{-1} = \hat{H}$, i anomenem Ψ_i , E_i a una funció pròpia d'aquest Hamiltonià i a l'autovalor associat. Definim $\Phi_k = R_k \Psi_i$. És senzill demostrar que Φ_k és una funció pròpia de $\hat{H}$ associada amb mateix valor propi E_i :

$$\hat{H} \Phi_k = R_k \hat{H} R_k^{-1} \Phi_k = R_k \hat{H} R_k^{-1} R_k \Psi_i = R_k \hat{H} \Psi_i = R_k E_i \Psi_i = E_i R_k \Psi_i = E_i \Phi_k$$

Aquest resultat és vàlid per a tots i cadascun dels elements R_k del grup de transformacions G que deixa invariant l'Hamiltonià. El conjunt de funcions pròpies degenerades $W = \{\Phi_k = R_k \Psi_i, \forall k\}$ expandeix un espai lineal estable sota G , és a dir, l'actuació de qualsevol $R_k \in G$ sobre una funció d'aquest espai genera una altra funció d'aquest espai, és a dir, una funció pròpia d' $\hat{H}$ associada al valor propi E_i . Diem llavors que W forma base d'una representació del grup G . És aquesta una representació irreductible? La resposta és que sí. Hom pot tractar de contraposar un contra-exemple, com ara el de l'àtom d'hidrogen i el grup de rotació en tres dimensions $O(3)$, on l'orbital $2s$ no pertany a la mateixa representació irreductible que els tres orbitals $2p$ amb els que està degenerat. Arabé, $O(3)$ no és el grup de transformacions G que deixa invariant l'Hamiltonià de l'àtom d'hidrogen sinó només el seu subgrup de simetria espacial o geomètrica. A més de les transformacions geomètriques, l'Hamiltonià de l'àtom d'hidrogen també és invariant sota transformacions que impliquen simultàniament coordenades i moments. El conjunt de totes les transformacions que deixen invariant l'Hamiltonià de l'àtom d'hidrogen forma (o és isomòrf a) el grup de simetria dinàmica de l'àtom d'hidrogen $O(4)$. [13]

Referències

- [1] R. McWeeny, *Quantum Mechanics: principles and formalism*, Pergamon Press, Oxford 1972.

- [2] E. Merzbacher, Am. J. Phys. 30 (1962) 237.
- [3] M. Le Bellac, *Quantum Physics*, Cambridge University Press, 2006.
- [4] J. Riess, Helv. Phys. Acta 45 (1972) 1066.
- [5] https://en.wikipedia.org/wiki/Elliptic_partial_differential_equation
- [6] V.B. Ho and M.J. Morgan, J. Phys. A: Math and Gen. 29 (1996)1497.
- [7] veure pag. 201 en J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* Addison-Wesley 1994.
- [8] veure pag. 138 en Frank F. Pilar, *Elementary Quantum Chemistry*, McGraw-Hill, NY 1968.
- [9] A. M. Steane, arXiv 1312.3824 (2013) (<http://arxiv.org/abs/1312.3824v1>)
- [10] H. Rauch, A. Zeilinger, G. Badurek, A. Wilfing, W. Bauspiess and U. Bonse, Phys. Lett. A 54 (1975) 425
- [11] S. A. Werner, R. Colella, A. W. Overhauser, and C. F. Eagen, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 1053.
- [12] M. Staley, Eur. J. Phys. 31 (2010) 467.
- [13] A. W. Joshi, *Elements of Group Theory for Physicists*, Wiley Eastern, New Delhi 1982.