1 Tensors i operadors tensorials esfèrics

Allò que de manera essencial caracteritza una magnitud física (i el seu operador mecanoquàntic associat) és la forma en que aquesta es veu afectada per les transformacions de simetria de l'espai coordenat. Podem afirmar que *el caràcter d'una magnitud física ve determinat per les seues propietats en front de rotacions*, incloent-hi les rotacions pròpies, representades per matrius amb determinant +1, i les impropies, com ara la inversió o els planols de simetria, representades per matrius amb determinant -1.

Circumscrivim-nos ara per ara al grup de les rotacions pròpies en una esfera, que s'anomena grup K o $SO(3)$. Els generadors d'aquest grup són els operadors de moment angular $\{\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\}$, de manera que qualsevol rotació d'angle ϕ al voltant de qualsevol vector unitari $\mathbf{u}$ la podem escriure en funció d'aquests generadors en la forma $R_{\mathbf{u}}(\phi) = \exp[-i\,\phi\,(\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{u})/\hbar]$. Doncs be, és immediat adonar-se que si l'operador associat a una magnitud física commuta amb $\{\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\}$, aquesta magnitud física és invariant en front de rotacions.

Aleshores, definim *escalar* i *operador escalar* com aquella magnitud que és invariant sota totes les rotacions i que, en conseqüència, serà base de la representació D_0 del grup de l'esfera. Són exemples de mangnituds escalars, la massa, la longitud, l'energia i qualsevol magnitud definida com el producte escalar de dos *vectors polars*.

Cal definir doncs que és un *vector polar*. El vector polar $\mathbf{V}$ i l'*operador vectorial* $\hat{\mathbf{V}}$ associat presenten magnitud o mòdul i direcció, i les seues tres components tenen les mateixes propietats de transformació sota les rotacions que el vector de posició $\mathbf{r}$. En conseqüència, aquestes tres components formen conjuntament base de le la representació D_1 del grup $SO(3)$. Són exemples de magnituds vectorials, la velocitat, el moment dipolar, la força, etc.

Podem usar les components cartesianes (V_x, V_y, V_z) o les components *esfèriques* (V_1, V_0, V_{-1}) del vector, entenent per components esfèriques aquelles que, individualment, són invariants sota les rotacions definides pel generador associat (cosa que implica: $[J_z, V_0] = [J_+, V_{+1}] = [J_-, V_{-1}] = 0$). La relació entre unes components i altres són:

$$V_1 = -\frac{V_x + i\,V_y}{\sqrt{2}}, \quad V_0 = V_z, \quad V_{-1} = \frac{V_x - i\,V_y}{\sqrt{2}}.$$

Si considerem el grup complet de l'esfera (rotacions més centre d'inversió, és a dir, rotacions pròpies i impròpies) trobem que hi ha dues irreps, $\{D_{Jg}, D_{Ju}\}$, per cada irrep D_J del grup de rotacions pròpies. Els *escalars* són base de D_{0g} i els *vectors* de D_{1u}.

Hi ha magnituds que presenten mòdul i direcció, com ara el camp magnètic o el moment angular, que no canvien de signe sota la inversió com fa el vector de posició $\mathbf{r}$ (i per tant tots els *vectors*), tot i que es comporten igual que $\mathbf{r}$ sota les rotacions pròpies. En conseqüència, les seues components formen base de la representació D_{1g} del grup de l'esfera. A aquestes magnituds les denominem vectors o tensors *axils* o axials. Definim doncs vector *axil* com aquella magnitud que presenta mòdul i direcció, que és invariant sota rotacion pròpies i canvia de signe sota les impròpies. Podem contemplar els vectors axils com el resultat del producte vectorial de dos vectors polars. Per exemple, $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Realment, els vectors axils són tensors antisimètrics de segon ordre amb traça nula, com veurem més endavant.

Anàlogament, hi ha magnituds que no tenen components i que són invariants sota rotacions però que canvien de signe sota la inversió i que, per tant, formen base de la representació D_{0u} del grup de l'esfera. Aquestes magnituds s'anomenen *pseudoescalars*. Un exemple ben conegut de magnitud pseudoescalar és el flux magnètic $\Phi = \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$, producte escalar d'un vector axil (el camp magnètic $\mathbf{B}$), invariant sota l'inversió $\hat{\imath}$ i un vector polar (el vector superfície $\mathbf{S}$) que varia sota $\hat{\imath}$. El flux, que és el producte escalar de tots dos, canvia de signe sota la inversió: $\hat{\imath}(\Phi) = \hat{\imath}(\mathbf{BS}) = \hat{\imath}(\mathbf{B})\hat{\imath}(\mathbf{S}) = -\mathbf{BS} = -\Phi$. En general, podem contemplar el pseudoescalar com el producte escalar d'un vector polar i un vector axil.

En general, un *tensor esfèric* de $2\omega+1$ components, és aquella magnitud física que és base de la representació D_ω del grup $SO(3)$ de rotacions pròpies, de manera que la rotació d'una de les seues components la transforma en una combinació lineal d'ella mateix i de les altres components:[1]

$$\mathcal{R}T_\mu^{(\omega)}\mathcal{R}^{-1} = \sum_\nu T_\nu^{(\omega)} D(R)_{\nu\mu}^{[\omega]}.$$

De la mateixa forma que en el cas de vectors i operadors vectorials, estudiarem tot seguit la relació entre les components T_{xy} cartesianes i T_m esfèriques en el cas de tensors de segon ordre. La component cartesiana T_{xy} es transforma com el polinomi xy:

$$\mathcal{R}T_{xy}\mathcal{R}^{-1} = \sum_{i,j} T_{ij}\, D(R)_{x,i}\, D(R)_{y,j} \equiv \sum_\alpha T_\alpha\, D(R)_{\beta,\alpha} \tag{1}$$

on $D = D_{1u} \otimes D_{1u} = D_{0g} \oplus D_{1g} \oplus D_{2g}$. Podem doncs descomposar aquest tensor cartesià com la suma de tres tensors esfèrics.[2]

$$\begin{aligned}
\mathbb{T} &= \begin{bmatrix} x_1x_2 & x_1y_2 & x_1z_2 \\ y_1x_2 & y_1y_2 & y_1z_2 \\ z_1x_2 & z_1y_2 & z_1z_2 \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{3}Tr(\mathbb{T})\mathbb{I} + \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & x_1y_2 - y_1x_2 & x_1z_2 - z_1x_2 \\ y_1x_2 - x_1y_2 & 0 & y_1z_2 - z_1y_2 \\ z_1x_2 - x_1z_2 & z_1y_2 - y_1z_2 & 0 \end{bmatrix} \\
&\quad + \frac{1}{2}\begin{bmatrix} x_1x_2 + x_2x_1 - \frac{2}{3}Tr(\mathbb{T}) & x_1y_2 + y_1x_2 & x_1z_2 + z_1x_2 \\ y_1x_2 + x_1y_2 & y_1y_2 + y_2y_1 - \frac{2}{3}Tr(\mathbb{T}) & y_1z_2 + z_1y_2 \\ z_1x_2 + x_1z_2 & z_1y_2 - y_1z_2 & z_1z_2 + z_2z_1 - \frac{2}{3}Tr(\mathbb{T}) \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{3}Tr(\mathbb{T})\mathbb{I} + \begin{bmatrix} 0 & c & b \\ -c & 0 & a \\ -b & -a & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D_1 & A & B \\ A & D_2 & C \\ B & C & D_3 \end{bmatrix} \qquad (2)
\end{aligned}$$

Trobem per una banda la traça $Tr(T) = T_{xx} + T_{yy} + T_{zz}$ que és un escalar, invariant sota canvis de coordenades i base de D_0. Escrivim $\mathbb{T}^{(0)} = Tr(\mathbb{T})$.

En segon lloc trobem un *tensor antisimètric* de traça nula amb tres components linealment independents que etiquetem com $A_x = \frac{1}{2}(T_{yz} - T_{zy})$, $A_y = \frac{1}{2}(T_{zx} - T_{xz})$, $A_z = \frac{1}{2}(T_{xy} - T_{yx})$, les quals se comporten com un vector axil, i per tant formen una base de D_{1g}. Escrivim $\mathbb{T}^{(1)} = \{A_x, A_y, A_z\} = \{a, b, c\}$.

Finalment, trobem un *tensor simètric* de traça nula, les cinc components $S_{ij} = \frac{1}{2}(T_{ij} + T_{ji}) - \frac{1}{3}Tr(T)$ del qual formen base de D_{2g}. Tenim, $\mathbb{T}^{(2)} = \{A, B, C, D_1, D_2\}$.

En lloc d'aquestes component del tensor simètric, podríem igualment haver triat la següent base (més usual) per a D_{2g}:

$$\{S_{xy}, S_{yz}, S_{zx}, S_{xx} - S_{yy}, 2S_{zz} - S_{xx} - S_{yy}\} \tag{3}$$

[1] La condició $\mathcal{R}T_\mu^{(\omega)}\mathcal{R}^{-1} = \sum_\nu T_\nu^{(\omega)} D(R)_{\nu\mu}^{[\omega]}$ equival a les condicions:

$$[\hat{J}_z, T_\mu^{(\omega)}] = \mu\, T_\mu^{(\omega)}; \quad [\hat{J}_\pm, T_\mu^{(\omega)}] = \sqrt{\omega(\omega+1) - \mu(\mu \pm 1)}\; T_{\mu\pm1}^{(\omega)}.$$

Si $T_\mu^{(\omega)}$ representa el μ-èssim harmònic esfèric corresponent a $J = \omega$, la comprovació és immediata. La generalització a altres tensors està relacionada amb el fet que el conjunt $\{\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\}$ són els generadors de qualsevol rotació $\mathcal{R}$. Ometem entrar en els details de la demostració.

[2] En la deducció següent cal adonar-se que $x_1x_2 = x_2x_1$, $y_1y_2 = y_2y_1$ i $z_1z_2 = z_2z_1$. Per això, la segona matriu en la descomposició presenta zeros en la diagonal (perquè e.g. $x_1x_2 - x_2x_1 = 0$) i en la tercera matriu escrivim per exemple $x_1x_2 + x_2x_1$ en lloc de $2x_1x_2$, per tal d'explicitar la simetria d'aquest tensor.

Ara procedirem a constuir l'escalar, el vector axil i el tensor simètric de segon ordre, a partir de les components esfèriques $V_{0,\pm 1}$ i $U_{0,\pm 1}$ de dos tensors de primer ordre (vectors):

$$T_0 = \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \, V_{\mu} U_{\mu}^* = \sum_{\mu} (-1)^{\mu} \, V_{\mu} U_{-\mu} \tag{4}$$

$$\begin{aligned} T_{\pm 1}^{[1]} &= V_{\pm 1} U_0 - V_0 U_{\pm 1} \\ T_0^{[1]} &= V_1 U_{-1} - V_{-1} U_1 \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} T_{\pm 2}^{[2]} &= V_{\pm 1} U_{\pm 1} \\ T_{\pm 1}^{[2]} &= V_{\pm 1} U_0 + V_0 U_{\pm 1} \\ T_0^{[2]} &= 2 V_0 U_0 + V_1 U_{-1} + V_{-1} U_1 \end{aligned} \tag{6}$$

Fixem-nos que $T_0^{[2]}$ equival a la component cartesiana $2S_{zz} - S_{xx} - S_{yy}$.

1.1 Exemple 1 d'aplicació eqs. 4-6

Escrivim en primer lloc els hamònics esferics per a $\ell = 0, 1, 2$ que podem considerar escalar, vector polar i tensor simètric de segon ordre de traça nula.

$$\begin{array}{ll} Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} & Y_{20} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left[\frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right] \\ Y_{10} = (\frac{3}{4\pi})^{1/2} \cos\theta & Y_{2\pm 1} = \mp (\frac{15}{8\pi})^{1/2} \sin\theta \, \cos\theta \, e^{\pm i\phi} \\ Y_{1\pm 1} = \mp (\frac{3}{8\pi})^{1/2} \sin\theta \, e^{\pm i\phi} & Y_{2\pm 2} = (\frac{15}{32\pi})^{1/2} \sin^2\theta \, e^{\pm 2i\phi} \end{array} \tag{7}$$

Partirem del vector Y_{1m}, amb $m = -1, 0, 1$ i construirem l'escalar, el vector axil i el tensor simètric de segon ordre, respectivament, mitjançant l'aplicació de les fórmules (4-6):

$$\begin{aligned} T_0 &= (-1)^0 Y_{10} Y_{10}^* + (-1)^{\pm 1} (Y_{11} Y_{1-1}^* + Y_{1-1} Y_{11}^*) \\ &= \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta + 2 \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta = \frac{3}{4\pi} \end{aligned} \tag{8}$$

Comprovem que hem obtingut un escalar, $\frac{3}{4\pi}$, base per tant de D_{0g}, i que, excepte la normalització, coincideix amb Y_{00}. Ara obtenim el vector axil, base de D_{1g}:

$$\begin{aligned} \mathbf{U} \wedge \mathbf{V} &= \begin{bmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ U_0 & U_+ & U_- \\ V_0 & V_+ & V_- \end{bmatrix} = \mathbf{i}(U_+ V_- - U_- V_+) + \mathbf{j}(U_0 V_- - U_- V_0) + \mathbf{k}(U_0 V_+ - U_+ V_0) \\ &= T_0^{[1]} \, \mathbf{i} + T_{-1}^{[1]} \, \mathbf{j} + T_1^{[1]} \, \mathbf{k} \end{aligned} \tag{9}$$

En aquest cas, com el producte vectorial d'un vector per si mateix és zero, hem hagut d'usar dos vectors diferents: U representa la partícula 1 i V la partícula 2. Finalment, apliquem les equacions (6):

$$T_{\pm 2}^{[2]} = V_{\pm 1} U_{\pm 1} = Y_{1\pm 1}^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi} \tag{10}$$

$$T_{\pm 1}^{[2]} = V_{\pm 1} U_0 + V_0 U_{\pm 1} = Y_{1\pm 1} Y_{10} = \mp \frac{3}{4\pi\sqrt{2}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} T_0^{[2]} &= 2 V_0 U_0 + V_1 U_{-1} + V_{-1} U_1 = 2 Y_{10}^2 + 2 Y_{11} Y_{1\,-1} = 2 \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta - 2 \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta \\ &= \frac{6}{4\pi} (\frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2}) \end{aligned} \tag{12}$$

Comprovem que hem obtingut, excepte normalització, els harmònics esfèrics Y_{2m}, base de D_{2g}.

1.2 Exemple 2 d'aplicació eqs. 4-6

Considerem les components esfèriques $\{r_+, r_-, r_0\} = \{-\frac{x+iy}{\sqrt{2}}, \frac{x-iy}{\sqrt{2}}, z\}$ del vector de posició. [3] Construirem l'escalar:

$$
\begin{aligned}
T_0^{(0)} &= z^2 + (-1)(-\frac{1}{2})[(x+i\,y)^2 + (x+i\,y)^2] \\
&= z^2 + x^2 + y^2 = r^2
\end{aligned}
$$

El tensor simètric de segon ordre és:

$$
\begin{aligned}
T_{\pm 2}^{(2)} &= \frac{(x \pm i\,y)^2}{2} = \frac{1}{2} r^2\, e^{\pm 2\,i\,\phi} \\
T_{\pm 1}^{(2)} &= 2\frac{(x \pm i\,y)^2}{\sqrt{2}}\, z = \sqrt{2}\, r\, z\, e^{\pm i\,\phi} \\
T_0^{(2)} &= z^2 + \frac{1}{2}\,(x+i\,y)(x-i\,y)\cdot 2 = r^2
\end{aligned}
$$

Respecte del vector axil, cal usar les coordenades de dos partícules (el producte vectorial d'un vector per si mateix és zero):

$$
\begin{aligned}
\mathbf{r}(1) \times \mathbf{r}(2) &= \begin{bmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ r_0(1) & r_+(1) & r_-(1) \\ r_0(2) & r_+(2) & r_-(2) \end{bmatrix} \\
&= [r_+(1)r_-(2) - r_-(1)r_+(2)]\,\mathbf{i} \\
&\quad +[r_0(1)r_-(2) - r_-(1)r_0(2)]\,\mathbf{j} \\
&\quad +[r_0(1)r_+(2) - r_+(1)r_0(2)]\,\mathbf{k}
\end{aligned}
$$

[3] Fixem-nos el factor $\sqrt{2}$ en les dues primeres coordenades és necessari per a que $\mathbf{r}^\dagger \mathbf{r} = |\mathbf{r}|^2 = \frac{1}{2}(x^2+y^2) + \frac{1}{2}(x^2+y^2) + z^2 = x^2+y^2+z^2$. Tanmateix, el signe negatiu en la primera component és acorde amb la fase usada en els operadors $\hat{L}_\pm$: $\hat{L}_\pm|\ell m\rangle = \sqrt{\ell(\ell+1)+m(m\pm 1)}|\ell m \pm 1\rangle$.