

## Fuerzas de Coriolis en Mecánica Cuántica-

Consideremos un electrón sobre una estructura “clásica” que rota con velocidad angular uniforme. Esto puede corresponder a una molécula o un cúmulo de átomos, que trataremos clásicamente, y por ende las posiciones relativas de los átomos estarán fijas, y la molécula o cúmulo atómico puede visualizarse como un sistema “rígido”. Lo anterior se describe con el Hamiltoniano

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(\vec{r}, t) \quad (1)$$

con

$$V(\vec{r}, t) = V[x \cos(\omega t) + y \sin(\omega t), y \cos(\omega t) - x \sin(\omega t), z] \quad (2)$$

Acá  $V(\vec{r}, t=0) \equiv V(\vec{r})$  es el potencial que se observa desde un sistema de coordenadas giratorio, solidario con la molécula rotando. En este Hamiltoniano estamos ignorando que la molécula giratoria puede producir un campo magnético, debido a que ella posee una determinada distribución de cargas, que se transforman en corrientes al girar. Pero tal efecto es más bien pequeño, incluso inferior a la interacción spin-órbita, pues la velocidad promedio de un electrón es bastante mayor que la velocidad de los iones para los primeros modos rotacionales de una molécula. En cualquier caso, nuestro análisis se hará sobre el Hamiltoniano de Rels. (1) y (2), sin incluir estas pequeñas correcciones.

Podemos pasar desde el sistema inercial al sistema rotatorio mediante una transformación unitaria,

$$V(\vec{r}, t) = \tilde{U} V[x, y, z] \tilde{U}^{-1} \quad (3)_a$$

con  $\tilde{U} = \text{Exp}[-i \omega t L_z]$  (3)\_b

y  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} / \hbar$  Momento angular orbital  
adimensional (3)\_c

No sólo el vector posición, sino que también el momento lineal transforma como vector ante la operación unitaria  $\tilde{U}$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{U} [P_x, P_y, P_z] \tilde{U}^{-1} = \\ = [P_x \cos(\omega t) + P_y \sin(\omega t), P_y \cos(\omega t) - P_x \sin(\omega t), P_z] \end{aligned} \quad (4)$$

Esto implica que la energía cinética es invariante ante  $\tilde{U}$ ; esto último, en combinación con la relación (3)<sub>a</sub> nos permite escribir el Hamiltoniano como

$$\tilde{H}(t) = \tilde{U} \tilde{H}_0 \tilde{U}^{-1} \quad \text{a)} \quad \text{con} \quad \tilde{H}_0 = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(\vec{r}) \quad \text{b)} \quad (5)$$

Hamiltoniano tiempo-independiente

Nos interesa obtener la evolución temporal del Sistema, descrita por la función de estado  $\Psi(t)$ . Ella cumple la tradicional ecuación

$$i \hbar \frac{d}{dt} \Psi(t) = \tilde{H}(t) \Psi(t) \quad (6)$$

Al usar Rel. (5)<sub>a</sub> en el miembro derecho de esta expresión tenemos

$$\tilde{H}(t) \Psi(t) = \tilde{U}(t) \tilde{H}_0 \tilde{\Psi}(t) \quad (7)_a$$

$$\text{con} \quad \tilde{\Psi}(t) = \tilde{U}(-t) \Psi(t) \quad \text{b)} \quad \Psi(t) = \tilde{U}(t) \tilde{\Psi}(t) \quad \text{c)} \quad (7)_{b,c}$$

Derivamos Rel. (7)<sub>c</sub> y usamos (3)<sub>c</sub>:  $\frac{d}{dt} \tilde{U} = -i \omega L_z \tilde{U}$   
para concluir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Psi(t) &= \left\{ \frac{d}{dt} \tilde{U} \right\} \tilde{\Psi}(t) + \tilde{U} \left\{ \frac{d}{dt} \tilde{\Psi}(t) \right\} = \\ &= \tilde{U} \left\{ -i \omega L_z \tilde{\Psi}(t) + \frac{d}{dt} \tilde{\Psi}(t) \right\} \end{aligned} \quad (8)$$

Substituyendo esta expresión en la ecuación de evolución temporal, Rel. (6), obtenemos finalmente

$$i \hbar \frac{d}{dt} \tilde{\Psi}(t) = \tilde{H}_c \tilde{\Psi}(t) \quad (9)_a$$

con  $\tilde{H}_c = \tilde{H}_0 - \hbar \omega L_z$  Hamiltoniano efectivo,  
con término de coriolis (9)\_b

Lo relevante de estos desarrollos es que hemos obtenido una ecuación de evolución temporal con un Hamiltoniano efectivo tiempo-independiente, Rel.(9), lo que facilita su análisis.

Al considerar el momento angular  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ , sin el factor  $1/\hbar$ , entonces

$$\tilde{H}_c = \tilde{H}_0 - \omega L_z$$
Hamiltoniano efectivo,  
con término de coriolis
(10)

El término de coriolis tiene un efecto análogo a un “campo magnético efectivo”, reteniendo sólo la contribución paramagnética.

Los presentes desarrollos son una adaptación del método usado por Isaac Rabi para su análisis de la “Resonancia Paramagnética” en dicho análisis el término de coriolis tiende a cancelar el campo magnético estático actuando sobre el spin. Para la condición de resonancia, la cancelación es total, persistiendo sólo el campo de radio-frecuencia con polarización circular. Pero ahora dicho campo (observado desde sistema giratorio) se ve como tiempo-independiente.

El análisis anterior persiste válido al considerar el caso de varios electrones, donde el Hamiltoniano toma la forma:

$$\tilde{H}(t) = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m} \vec{p}_i^2 + V(\vec{r}_i, t) \right\} + \sum_{i < j}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (11)$$

Acá  $V(\vec{r}_i, t)$  tiene la forma descrita en Rel.(2).

Podemos repetir los mismos desarrollos anteriores, sólo que ahora debemos rotar todos los electrones por igual (como si se tratase de un rígido). Para ello debemos considerar el operador unitario  $\tilde{U}(t)$  asociado al momento angular total

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{L}_i$$
Momento angular total, generador infinitesimal de  
rotaciones de todos los electrones por igual, como  
en un sólido rígido
(12)

Así pues, ahora la rotación  $\check{U}(t)$  es

$$\check{U} = \text{Exp}[-i \omega t L_z] \quad \text{con} \quad L_z = \sum_{i=1}^N L_{iz} \quad (13)$$

Acorde a la discusión última, el Hamiltoniano efectivo (visto desde sistema giratorio) toma la forma

$$\check{H}_c = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2m} \vec{p}_i^2 + V(\vec{r}_i) - \omega L_{iz} \right\} + \sum_{i < j}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (14)$$