
CURSO BÁSICO DE FÍSICA TEÓRICA

Volumen 3: Física Teórica 2 [Mecánica Cuántica]

E.F. Lavia

versión 0.1

19 de abril 2017

Contenidos

1	Introducción	1
1.1	El experimento de Stern-Gerlach	1
1.2	Algebra?	3
1.2.1	Propiedades	4
1.2.2	Operadores	4
1.2.3	sandwichs	5
1.2.4	Producto externo	5
1.3	Bases	6
1.3.1	Autokets y autovalores	7
1.3.2	Operadores y matrices	8
1.3.3	Combinación lineal de autoestados	9
1.3.4	Cambio de base	9
1.3.5	Representación diagonal	9
1.3.6	Representaciones canónicas	10
1.4	Sistemas de spín 1/2	11
1.4.1	Cambio de base	11
1.4.2	Mediciones y probabilidades	12
1.4.3	Valor de expectación	13
1.4.4	Conmutadores	13
1.4.5	Degeneración	14
1.4.6	Postulados de la mecánica cuántica	15
1.4.7	Operador de dispersión	15
1.4.8	Espectro continuo	16
1.4.9	La función de onda	16
1.4.10	Operador de traslación	17
1.4.11	\mathbf{p} en la representación \mathbf{x}	19
1.4.12	Cambio entre representaciones \mathbf{x} y \mathbf{p}	20
1.4.13	Corchetes de Poisson versus conmutadores	20
2	Dinámica cuántica	21
2.1	Dinámica cuántica	22

2.1.1	Casos de solución de $U(t, t_o)$	22
2.1.2	Soluciones útiles	24
2.1.3	Evolución de valores de expectación	24
2.1.4	Relaciones de conmutación	25
2.1.5	La ecuación de Schrödinger	25
2.1.6	Representación de Heisenberg	25
2.1.7	Teorema de Ehrenfest	28
3	El oscilador armónico	30
3.0.8	El estado fundamental $\langle 0 \rangle$	31
3.0.9	Función de onda	32
3.0.10	Interferencia en experimento de Young	33
3.0.11	Cambio de cero del potencial	34
3.1	El propagador	35
3.1.1	El propagador de la partícula libre	36
3.2	Integrales de camino de Feynmann	37
4	Introducción al momento angular (rotaciones)	40
4.0.1	No conmutatividad de las rotaciones clásicas	41
4.1	Rotaciones cuánticas	42
4.1.1	Ángulos de Euler	43
4.1.2	Autoestados y autovalores de J	44
4.1.3	La normalización de J_{\pm}	46
4.1.4	Elementos de matriz de J^2, J_z, J_{\pm}	47
4.1.5	Elementos de matriz de $\mathcal{D}(R)$	47
4.1.6	Forma explícita del operador $\mathcal{D}(R)$	48
4.2	Formalismo de spinores de Pauli	48
4.2.1	Aplicación a las rotaciones	49
4.2.2	Ejemplo	50
4.2.3	Rotaciones en sistemas con $j = 1$	50
4.3	Momento angular orbital	51
5	Armónicos esféricos como matrices de rotación	55
5.1	Suma de momentos angulares	56
5.1.1	Dos momentos de spin $1/2$	56
5.1.2	Cambio entre bases	57
5.2	Teoría formal de suma de momentos angulares	58
5.2.1	Restricciones para la no nulidad de los coeficientes	59
5.2.2	Relación de recurrencia	60
5.2.3	Suma de \mathbf{L} y \mathbf{S}	61
5.3	Operadores vectoriales	61
5.4	Operadores tensoriales	62

6	Teorema de Wigner-Eckart	64
6.0.1	Reglas de selección	65
6.1	Ejemplos de elementos matriciales de tensores	65
6.1.1	Teorema de proyección	66
6.1.2	Aplicación del teorema de proyección	66
7	Simetrías en mecánica cuántica	67
7.0.3	Simetría de paridad	68
7.0.4	Función de onda bajo paridad	69
7.0.5	Teorema	70
7.0.6	Reglas de selección de paridad Π	71
7.1	Inversión temporal (reversión de movimiento)	71
7.1.1	Operadores ante $\hat{\Theta}$	73
7.1.2	Función de onda	75
7.1.3	Reversión de movimiento sobre \mathbf{J}	76
7.1.4	Reversión para sistemas de spin $1/2$	76
7.1.5	Teorema	77
8	Métodos perturbativos	78
8.1	Resolución	79
8.1.1	Caso degenerado	82
8.2	Efecto Stark	82
8.2.1	Corrimiento de la energía a orden 2 (con degeneración)	84
8.3	Estructura fina del átomo de hidrógeno	84
9	Partículas idénticas	87
9.0.1	Permutación	88
9.1	Postulado de simetrización	90
9.1.1	Principio de exclusión de Pauli	90
9.1.2	Sistema de dos electrones de spin $1/2$	90
9.2	El átomo de helio	92
10	Picture de interacción y perturbación dependiente del tiempo	94
10.0.1	Evolución de los coeficientes	96
10.0.2	Método perturbativo (dependiente del tiempo)	96
10.0.3	Transiciones entre autoestados del hamiltoniano H_0	97
10.0.4	Ejemplo: potencial constante encendido abruptamente	98
10.1	Scattering: orden 1	99
10.2	El método variacional	100
10.2.1	Scattering a orden dos y OFPT	100
10.2.2	Perturbación armónica	101
10.3	Desplazamiento de estados iniciales	102

10.3.1	Scattering sección eficaz	103
--------	-------------------------------------	-----

11	Introducción a la mecánica cuántica relativista	106
-----------	--	------------

11.0.2	La ecuación de Klein-Gordon	107
11.0.3	La ecuación de Dirac	108
11.0.4	Ejemplo: partícula libre quieta	109
11.0.5	Energías negativas	110

Introducción

1.1 El experimento de Stern-Gerlach

Un horno emite átomos de plata (Ag) neutros con un electrón e en la última órbita que le da el spín al átomo como un todo. Al salir del horno los átomos tienen su spín orientado en cualquier dirección. Ver figura. El momento magnético del átomo que sale del horno es

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{m_e c} \mathbf{S}$$

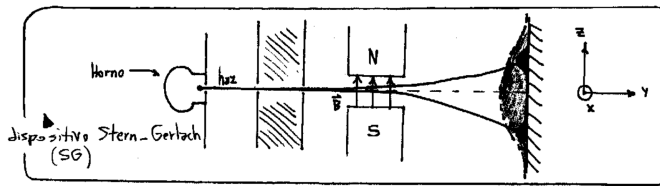


Figura 1.1

La fuerza f_z que le ejerce el campo \mathbf{B} a estos átomos es

$$f_z \propto -\mu_z$$

de modo que el dispositivo SG mide y filtra por $S_z(\mu_z)$. Si el spín es un ente clásico es de esperar un patrón como el sombreado en azul, pero se obtienen dos manchas; con la correspondencia mostrada bajo estas líneas

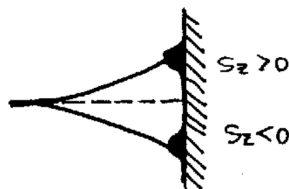


Figura 1.2

Entonces el espín no es un ente *continuo*: está cuantizado y sólo puede tomar dos valores. Llamamos a estos estados

$$(S_z, +) \quad (S_z, -)$$

Luego, un aparato de SG filtra o selecciona ciertos átomos. Podemos combinarlos.

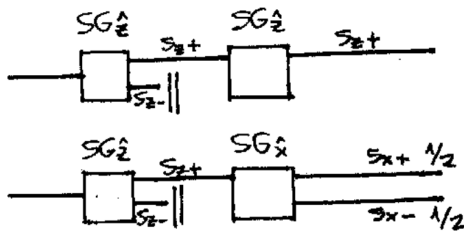


Figura 1.3

Con el dispositivo segundo orientado en \hat{x} obtenemos mitad de átomos en $(S_z, +)$ y mitad en $(S_z, -)$. La única es que en realidad lo que sucede es que $(S_z, +)$ se compone de $(S_x, +)$ y $(S_x, -)$.

Acá abajo sale $(S_z, -)$ pero para que ello sea posible $(S_x, +)$ se debe componer de $(S_z, +)$ y $(S_z, -)$. Pero esto no es posible porque al segundo aparato no entró jamás $(S_z, -)$. Se filtró antes.

Los spines en S_x, S_z son incompatibles. Al seleccionar $(S_z, +)$ en el segundo SG se destruye la información previa sobre S_z . No podemos ya garantizar que S_z sea nula. El tercer experimento da al traste con la idea de que podamos pensar en espín como un ente vectorial en 3D. Mediante una analogía con polarización de luz vemos que es necesario meter al espín en un espacio vectorial de dimensión 2 pero con coeficientes complejos.

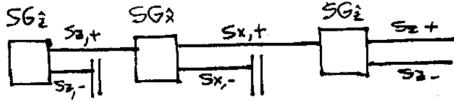


Figura 1.4

1.2 Álgebra?

El ket contiene toda la información cuántica del estado. Da el estado físico del sistema.

- $|\alpha\rangle + |\beta\rangle$ la suma de kets es un ket
- $c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$ con $c \in \mathbb{C}$
- $c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle = |\gamma\rangle$ con $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$
- $c|\alpha\rangle, |\alpha\rangle$ representan el mismo estado cuántico

Se define un espacio de *Bra* dual al de "kets" al que se va mediante "dual conjugado"

$$|a\rangle, |a'\rangle \Leftrightarrow \langle a|, \langle a'|$$

$$|a\rangle + |b\rangle \Leftrightarrow \langle a| + \langle b| \quad c|a\rangle \Leftrightarrow c^* \langle a|$$

Se define también un producto interno según

$$(\langle\alpha|)(|\beta\rangle) \equiv \langle\alpha|\beta\rangle$$

que no es otra cosa que un número complejo. Se puede hacer entonces una equivalencia con los vectores estándar del álgebra del siguiente modo

$$\text{ket} \sim \text{vector columna} \quad |x\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{bra} \sim \text{vector fila} \quad \langle x| = (1 \ 0)$$

y habiendo definido esta base escribimos, por ejemplo

$$|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |y\rangle$$

$$\langle a|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

y del mismo modo

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle x| + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle y| \right) (|x\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

1.2.1 Propiedades

1. $\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$ luego $\langle \alpha | \alpha \rangle \in \mathbb{R}$
2. $\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$ métrica definida positiva
3. $\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle = 0 \Leftrightarrow |\alpha\rangle \perp |\beta\rangle$
4. $\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = 1$ con $|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} |\alpha\rangle$ todo ket no nulo es normalizable

1.2.2 Operadores

A cada observable lo representaremos por un operador. hay operadores que no vienen de observables.

$$\hat{A}|\alpha\rangle = |\gamma\rangle \quad \langle \alpha | \hat{A} = \langle \gamma |$$

un operador sobre un ket da otro ket y sobre un bra da otro bra. Notemos que en este último caso opera a izquierda. La transformación entre operadores se da con

$$\hat{X}|a\rangle \Leftrightarrow \langle a | \hat{X}^\dagger$$

donde \dagger (daga) significa el traspuesto conjugado; cambia el sentido hacia donde actúa el operador y conjuga. Se da que si

$$\hat{X} = \hat{X}^\dagger \Rightarrow \hat{X} \text{ es hermítico}$$

Se dan

- $\hat{X}\hat{Y} \neq \hat{Y}\hat{X}$ no conmutativo
- $\hat{X}(\hat{Y}\hat{Z}) = (\hat{X}\hat{Y})\hat{Z} = \hat{X}\hat{Y}\hat{Z}$ asociativo
- $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$
- $\hat{0}|\alpha\rangle = 0 \quad \forall |\alpha\rangle ; \hat{0} \equiv \text{operador nulo}$
- $\hat{X}(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1\hat{X}|\alpha\rangle + c_2\hat{X}|\beta\rangle$

de modo que en cuántica los observables se representan mediante operadores hermíticos.

1.2.3 sandwiches

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \beta |)(X | \alpha \rangle) = \langle \beta | \gamma \rangle = \langle \gamma | \beta \rangle^* = (\langle \alpha | X | \beta \rangle)^*$$

donde usamos que $|\gamma\rangle$ es un ket y por dual conjugado $\langle \gamma | = \langle \alpha | \hat{X}^\dagger$ y extraemos como conclusión

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \alpha | X | \beta \rangle)^*$$

y de manera equivalente

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \beta | X^\dagger)(|\alpha\rangle) = \langle \Gamma | \alpha \rangle = \langle \alpha | \Gamma \rangle^* = (\langle \alpha | X^\dagger | \beta \rangle)^*$$

donde usamos que $\langle \Gamma |$ es un bra y por dual conjugado $|\Gamma\rangle = \hat{X} |\beta\rangle$. El formalismo parece ser consistente. El operador opera sobre un ket/bra y multiplica al otro.

1.2.4 Producto externo

$$|\beta\rangle \langle \alpha| \equiv (|\beta\rangle)(\langle \alpha|)$$

$$(|\beta\rangle \langle \alpha|) |\gamma\rangle = |\beta\rangle \langle \alpha | \gamma \rangle = \langle \alpha | \gamma \rangle |\beta\rangle,$$

de modo que es un operador pues al aplicar sobre un ket obtengo otro ket (notemos que $\langle \alpha | \gamma \rangle$ es un escalar). Podemos pensar en que

$$\Lambda_\alpha \equiv |\alpha\rangle \langle \alpha|$$

es el proyector, que actúa rotando un $|\gamma\rangle$ en la dirección de $|\beta\rangle$. Notemos

$$\Lambda_\alpha^2 = |\alpha\rangle \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \alpha | = |\alpha\rangle \langle \alpha | = \Lambda_\alpha$$

puesto que $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$. El proyector Λ_α sobre un ket $|\beta\rangle$ selecciona la parte de $|\beta\rangle$ en la dirección de $|\alpha\rangle$. Nos dice cuanto de $|\beta\rangle$ está en la dirección de $|\alpha\rangle$. Luego,

$$\sum_i^N \Lambda_i = \sum_i^N |i\rangle \langle i| = \mathbb{1}$$

la suma de todos los proyectores del espacio en el que estamos es la identidad de ese espacio. Decimos que $|i\rangle$ es un conjunto completo. Se verifica además

$$(|\beta\rangle \langle \alpha|)^\dagger = |\alpha\rangle \langle \beta|$$

Algunas cuentitas de ejemplo en dos dimensiones,

$$\begin{aligned}\hat{X} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \hat{Y} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \hat{X}^\dagger &= (1 \ 0) & \hat{Y}^\dagger &= (0 \ 1) \\ \hat{X}^\dagger \hat{X} &= (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 & \hat{X} \hat{X}^\dagger &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

donde instamos al lector a que note la diferencia de dimensión en los resultados.

Los kets $|\alpha\rangle$ *viven* en un espacio vectorial de Hilbert con dimensión N , donde N lo dicta el número de posibles estados de cada sistema físico. Una partícula de spin $1/2$ sólo tiene dos estados: up y down. Hay otro producto más, que se llama producto tensorial y se representa como

$$|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$$

que es un producto entre kets de espacios de Hilbert diferentes.

$$\langle\alpha|\beta\rangle^* \equiv DC\{|\beta\rangle\}DC\{\langle\alpha|\}$$

1.3 Bases

Dado un sistema físico representado por un espacio vectorial \mathcal{H} de dimensión N existirá una base (también de dimensión N) que será un conjunto de estados tal que cualquier estado de ese sistema físico puede representarse como combinación lineal de ese conjunto,

$$\{|i\rangle\} \text{ base} \Rightarrow |\alpha\rangle = \sum_i^N c_i |i\rangle$$

siendo $|\alpha\rangle$ un estado cualquiera. Es práctico utilizar bases ortonormales,

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

que es la delta de Kronecker.

Así, los kets se definen normalizados.

$$|\psi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle + c|3\rangle + d|4\rangle \quad |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 = 1$$

sea $|\phi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle$, $\langle\phi| = a^*\langle 1| + b^*\langle 2|$ entonces

$$\langle\phi|\phi\rangle = (a^*\langle 1| + b^*\langle 2|)(a|1\rangle + b|2\rangle) = a^*a\langle 1|1\rangle + b^*a\langle 2|1\rangle + a^*b\langle 1|2\rangle + b^*b\langle 2|2\rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1$$

1.3.1 Autokets y autovalores

Si $\hat{A}|a\rangle = c|a\rangle$ entonces $|a\rangle$ es autoket de \hat{A} con autovalor c . Se suelen etiquetar los autoestados $|a'\rangle, |a''\rangle$ de modo que

$$\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle$$

lo cual lleva al problema espectral

$$(\hat{A} - a'\mathbb{1})|a'\rangle = 0$$

entonces los operadores tendrán representación matricial, que cambiará según la base utilizada. Vemos viendo que en general sólo se sabe cómo opera un operador sobre kets. La operación sobre los bras la obtenemos usando dual conjugado.

Deducimos entonces que

1. Los autovalores de un operador hermítico son reales y los autokets correspondientes a diferentes autovalores son ortogonales.
2. Los autokets de un operador son base completa del espacio de kets.

Como ejemplo de A citemos

$$a'|a'\rangle = A|a'\rangle \quad \text{DC} \quad \langle a'|A^\dagger = \langle a'|A = \langle a'|a'^*$$

de manera que

$$\begin{aligned} \langle a'|A|a'\rangle &= (\langle a'|)(A|a'\rangle) = a' \\ (\langle a'|A|a'\rangle)^* &= (\langle a'|)(A|a'\rangle)^* = (\langle a'|A^\dagger)(|a'\rangle) \\ &= \langle a'|A|a'\rangle = a' \quad \Rightarrow \quad a' = a'^* \end{aligned}$$

Para el caso de B se postula así. Si esto vale entonces

$$|\alpha\rangle = \sum_i^N |a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle = \sum_i^N c_i |a_i\rangle = \mathbb{1}|\alpha\rangle$$

pues

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = \sum_{i,j}^N \langle a_j|c_j^*c_i|a_i\rangle = \sum_i^N |c_i|^2 = 1$$

y además

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \quad A|a''\rangle = a''|a''\rangle \Rightarrow A(|a'\rangle - |a''\rangle) = a'|a'\rangle - a''|a''\rangle$$

$$\langle a'' | A | a' \rangle = a' \langle a'' | a' \rangle \quad \langle a' | A | a'' \rangle = a'' \langle a' | a'' \rangle$$

y ahora conjugando

$$\langle a'' | A | a' \rangle^* = a' \langle a'' | a' \rangle^* \quad \langle a'' | A | a' \rangle = a'' \langle a'' | a' \rangle$$

donde usamos que $a''^* = a''$ y restando

$$(a' - a'') \langle a'' | a' \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle a'' | a' \rangle = 0 \quad \text{si} \quad a' \neq a''$$

Si la base es completa entonces es $\sum \Lambda = 1$.

1.3.2 Operadores y matrices

Un operador se puede representar matricialmente como

$$X = \sum_{a'}^N \sum_{a''}^N |a''\rangle \langle a'' | X | a'\rangle \langle a' | = \sum_{a'}^N \sum_{a''}^N (\langle a'' | X | a'\rangle) |a''\rangle \langle a' |$$

donde hemos explotado el hecho de que en el medio aparece un escalar (?), siendo

$$X_{ij} = \langle a_i | X | a_j \rangle$$

un elemento de matriz. Y notemos que $|a''\rangle \langle a' |$ es un ente de $N \times N$. Si la base es de dimensión 3 se tendrá por ejemplo,

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{pmatrix}$$

de manera que existe una identificación entre cosas del álgebra básica y este mundo de operadores y estados. Si X es hermítico por ejemplo, entonces su matriz es simétrica conjugada.

$$\langle a_i | X | a_j \rangle^* = (\langle a_j | X^\dagger | a_i \rangle) = \langle a_j | X | a_i \rangle$$

y entonces

$$\langle a_j | X | a_i \rangle^* = \langle a_i | X | a_j \rangle$$

de modo que

$$X_{ji}^* = X_{ij} \quad X_{ij}^{t*} = X_{ij} \quad X_{ij}^\dagger = X_{ij}$$

y vemos bien el significado de *daguear*. En este caso la matriz tiene traza real y seis elementos independientes

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{12}^* & X_{22} & X_{23} \\ X_{13}^* & X_{23}^* & X_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{21} & X_{22} & X_{23} \\ X_{31} & X_{32} & X_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{11}^* & X_{21}^* & X_{31}^* \\ X_{12}^* & X_{22}^* & X_{32}^* \\ X_{13}^* & X_{23}^* & X_{33}^* \end{pmatrix}$$

1.3.3 Combinación lineal de autoestados

Un estado $|\alpha\rangle$ se puede escribir en función de la base $|a_i\rangle$ de esta forma

$$|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i | \alpha \rangle = \sum_{i=1}^N (\langle a_i | \alpha \rangle) |a_i\rangle$$

y entonces

$$\langle a_i | \alpha \rangle = \sum_{j=1}^N c_j \underbrace{\langle a_i | a_j \rangle}_{\delta_{ij}} = c_i$$

1.3.4 Cambio de base

Para cambiar de base metemos un uno ($\mathbb{1}$) escrito como suma de proyectores,

$$X |b_j\rangle = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i | X |b_j\rangle = \sum_{i=1}^N C_{ij} |a_i\rangle$$

siendo C_{ij} la matriz del cambio de base. Se puede escribir

$$|b_j\rangle = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i | b_j \rangle$$

y se ve que $\langle a_i | b_j \rangle$ son los elementos de la matriz que cambia de base.

1.3.5 Representación diagonal

Un operador tiene representación diagonal cuando está representado en la base de sus autokets

$$A = \sum_i^N \sum_j^N |a_i\rangle \langle a_i | A | a_j \rangle \langle a_j | = \sum_i^N \sum_j^N a_j |a_i\rangle \langle a_i | a_j \rangle \langle a_j | = \sum_{i,j}^N \delta_{ij} a_j |a_i\rangle \langle a_j | = \sum_i^N a_i \mathbb{1}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & a_n \end{pmatrix}$$

y a_1, a_2, \dots, a_n son sus autovalores. Es destacable que es conveniente utilizar como bases los autoestados de ciertos operadores.

1.3.6 Representaciones canónicas

Podemos representar una base como vectores canónicos

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ N \end{pmatrix} \quad |a_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ N \end{pmatrix} \quad |a_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

luego

$$|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i | \alpha \rangle = \langle a_1 | \alpha \rangle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ N \end{pmatrix} + \langle a_2 | \alpha \rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ N \end{pmatrix} + \dots + \langle a_n | \alpha \rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \langle a_1 | \alpha \rangle \\ \langle a_2 | \alpha \rangle \\ \vdots \\ \langle a_n | \alpha \rangle \end{pmatrix}$$

y por DC se tiene

$$\langle \alpha | = (\langle \alpha | a_1 \rangle \langle \alpha | a_2 \rangle \dots \langle \alpha | a_n \rangle)$$

y

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 = \left(\overbrace{\quad}^{1 \times N} \right) \left(\overbrace{\quad}^{N \times 1} \right) = \square$$

que es un escalar.

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \beta | a_i \rangle \langle a_i | \alpha \rangle = \sum_i^N \langle \beta | \underbrace{|a_i\rangle \langle a_i|}_{\Lambda_{a_i}} | \alpha \rangle = \square$$

otra vez un escalar.

$$\langle a_i | \gamma \rangle = \langle a_i | X | \alpha \rangle = \sum_{a_j} \langle a_i | X | a_j \rangle \langle a_j | \alpha \rangle$$

$$\begin{pmatrix} \langle a_1 | \gamma \rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \dots \\ X_{21} & X_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle a_1 | \alpha \rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$X = \sum_i^N \sum_j^N |a_i\rangle \langle a_i| X |a_j\rangle \langle a_j| = \sum_i^N \sum_j^N \langle a_i| X |a_j\rangle |a_i\rangle \langle a_j|$$

y esto último es una matriz. Aquí el \hat{X} es una matriz y $\langle a_i | \hat{X} | a_j \rangle \equiv X_{ij}$ son sus elementillos (escalares).

1.4 Sistemas de spin 1/2

Hay dos estados posibles de spin ($|+\rangle, |-\rangle$) entonces dimensión del espacio vectorial es 2. De manera que

$$\mathbb{1} = |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|$$

$$|S_z; +\rangle = |S_z = \hbar/2\rangle \equiv |+\rangle$$

$$|S_z; -\rangle = |S_z = -\hbar/2\rangle \equiv |-\rangle$$

Acá hay que diseñar unos $+$, $-$ que habiten dentro de los brackets pues estos se ven feo.

Tenemos operadores de subida y de bajada,

$$S_+ = \hbar |+\rangle \langle -| \quad S_- = \hbar |-\rangle \langle +|$$

que actúan subiendo el spin o dando el ket nulo,

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 1) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

o bien bajando el spin o dando el ket nulo,

$$S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

1.4.1 Cambio de base

Dados dos conjuntos base ortonormales y completos existe un \hat{U} unitario tal que

$$U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1} \quad |b_i\rangle = U |a_i\rangle$$

Este operador de cambio de base será

$$U = \sum_\ell |b_\ell\rangle \langle a_\ell|$$

$$U |a_i\rangle = \sum_\ell |b_\ell\rangle \langle a_\ell | a_i \rangle = |b_i\rangle$$

que tiene por función pasar

$$\underbrace{|a_\ell\rangle}_{\text{vieja base}} \longrightarrow \underbrace{|b_\ell\rangle}_{\text{nueva base}}$$

$$\langle b_k | \alpha \rangle = \sum_\ell \langle b_k | a_\ell \rangle \langle a_\ell | \alpha \rangle = \sum_\ell \langle a_k | U^\dagger | a_\ell \rangle \langle a_\ell | \alpha \rangle = \langle a_k | U^\dagger | \alpha \rangle$$

Entonces

$$|\text{nueva base}\rangle = U |\text{vieja base}\rangle$$

$$\langle b_i | x | b_j \rangle = \sum_{\ell, m} \langle b_i | a_\ell \rangle \langle a_\ell | x | a_m \rangle \langle a_m | b_j \rangle$$

$$\langle b_i | x | b_j \rangle = \sum_{\ell, m} \langle a_i | U^\dagger | a_\ell \rangle \langle a_\ell | x | a_m \rangle \langle a_m | U | a_j \rangle$$

$$X_{|b\rangle} = U^\dagger X_{|a\rangle} U,$$

que es una transformación de similaridad.

1.4.2 Mediciones y probabilidades

En mecánica cuántica medir es filtrar. La medición perturba al sistema. Se miden variables dinámicas asociadas a observables. Como los autoestados de un observable \hat{A} son una base completa $\{|a_i\rangle\}$ entonces un sistema se hallará en una combinación lineal de autoestados de \hat{A} , o al menos eso puede pensarse.

antes de medir		luego de medir
sistema en CL de autestados de \hat{A}	Medición de \hat{A}	Salta a un autoestado de \hat{A}
sistema en autoestado de \hat{A}		Continúa en autoestado de \hat{A}

Puede verse pictóricamente la medición así:

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |a'\rangle$$

el proceso de medición hace saltar hacia $|a'\rangle$ siendo el resultado de la medida el autovalor a' . Luego,

$$\text{Prob}_{|a'\rangle} \equiv |\langle a' | \alpha \rangle|^2$$

Antes de medir no puedo saber a qué estado saltará y tampoco en qué estado se hallaba. Si $P = 1$ se halla en $|a'\rangle$ antes de saltar, si $P = 0$ no se halla en $|a'\rangle$ antes de saltar.

1.4.3 Valor de expectación

$$\langle \widehat{A} \rangle \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle$$

c el valor de expectación siempre se refiere a un estado en particular.

$$\langle A \rangle = \sum_{a', a''} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | A | a'' \rangle \langle a'' | \alpha \rangle$$

$$\langle A \rangle = \sum_{a', a''} \langle \alpha | a' \rangle a'' \delta_{a' a''} \langle a'' | \alpha \rangle = \sum_{a''} a'' |\langle \alpha | a'' \rangle|^2$$

$$\langle A \rangle = \sum_{a', a''} = a'' \text{Prob}_{|\alpha\rangle}$$

Esto último tiene el sentido de una especie de promedio ponderado.

1.4.4 Conmutadores

Se definen, el conmutador

$$[A, B] \equiv AB - BA,$$

y el anticonmutador

$$\{A, B\} \equiv AB + BA,$$

y se dice que dos observables conmutan si $[A, B] = 0$. Se dice que son compatibles si $[A, B] = 0$ y anticompatibles si se da la contrario, $[A, B] \neq 0$.

TEOREMA:

Sean dos observables compatibles y no degenerados, entonces los autoestados $\{|a'\rangle\}$ de A lo son también de B . Es decir que A y B tienen base de autoestados en común.

demostración:

$$\langle a' | AB - BA | a'' \rangle = 0$$

$$a' \langle a' | B | a'' \rangle - \langle a' | B | a'' \rangle a'' = (a' - a'') \langle a' | B | a'' \rangle = 0$$

entonces

$$\langle a' | B | a'' \rangle = 0$$

y B es diagonal en $\{|a'\rangle\}$.

Los autoestados son iguales pero no los autovalores; con lo cual se utilizará la notación $|a', b'\rangle$ donde

$$A |a', b'\rangle = a' |a', b'\rangle \quad B |a', b'\rangle = b' |a', b'\rangle$$

1.4.5 Degeneración

Puede darse que haya varios g autoestados correspondientes a un mismo autovalor a' ; entonces se dice que hay degeneración de orden g para el autoestado $|a'\rangle$

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \quad ; i = 1, 2, \dots, g$$

y A tendrá una matriz de $m \times n$ bloques. En este caso no se puede decir que la base de A diagonalice a B .

Mejorar la matriz que está un asco

$$A = \begin{pmatrix} a' \mathbb{1} & 0 & & \\ 0 & a'' \mathbb{1} & & \\ & & a''' & \\ & & & a^IV \\ \dots & & & & \end{pmatrix}$$

Los $|a'_i\rangle$ no dan información sobre los bloques correspondientes en la matriz de B . Necesito un conjunto de operadores que haga romper la degeneración para expresar unívocamente el estado del sistema. Se llama CCOC. Necesito que conmuten entre sí para que las mediciones tengan sentido.

Si no conmutan entonces son incompatibles; la medición de uno hace saltar al sistema a un autoestado del otro y como no son comunes pierde sentido el concepto de medir. No tiene sentido la medición de algo si por el hecho de medir cambiamos lo que queremos medir. Al ser incompatibles sus mediciones de afectan mutuamente.

Los autovalores de algunos operadores podrán tener degeneración pero una combinación de los autovalores del CCOC, $|a'b'c' \dots\rangle$, determina el estado de forma única.

Dado un set CCOC, $\{A, B, C, D\}$, se etiquetarán $|K'\rangle \equiv |a'b'c'd'\rangle$ los autoestados. Las únicas cosas que tiene sentido medir en MC son las variables asociadas a operadores en un CCOC.

Sean A, B compatibles sin degeneración

$$|\alpha\rangle \xrightarrow[a']{\text{Mido A}} |a'b'\rangle \xrightarrow[b']{\text{Mido B}} |a'b'\rangle \xrightarrow[a']{\text{Mido A}} |a'b'\rangle$$

En cambio si A, B son compatibles pero con degeneración

$$|\alpha\rangle \xrightarrow[a']{\text{Mido A}} \sum_{i=1}^g C_{a'}^{(i)} |a'b'(i)\rangle \xrightarrow[b'(j)]{\text{Mido B}} C_{a'}^{(j)} |a'b'(j)\rangle \xrightarrow[a'(j)]{\text{Mido A}} C_{a'}^{(j)} |a'b'(j)\rangle$$

Al medir A y obtener a' no tengo determinado el estado del sistema. Me hallaré en una CL de autoestados correspondientes al autovalor degenerado a' .

Al medir luego B selecciono uno de los $|a'b'\rangle$ degenerados, el correspondiente a $b'(j)$ pues B no está degenerado. Puedo volver a medir A pues el autoestado en que ha caído el sistema permanece incólume.

1.4.6 Postulados de la mecánica cuántica

1. El estado de un sistema lo definimos con un ket $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ y con $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$
2. Asociamos a propiedades físicas (observables) operadores hermíticos \hat{A} que operan sobre los kets. Los autokets $|a\rangle$ verifican :

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle,$$

y $\{|a\rangle\}$ es base del espacio de kets.

3. Al medir una cantidad física representada por el observable \hat{A} obtenemos un autovalor a' . Luego de medir, el estado del sistema es $|a'\rangle$.

$$|\Psi\rangle \xrightarrow[\alpha']{\text{Mido A}} |\Psi'\rangle = |a\rangle \langle a|\Psi\rangle = (\langle a|\Psi\rangle) |a\rangle$$

hecho al sistema a un autoestado de \hat{A} . Quizás deba ahora normalizar. $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ El esquema de arriba representa la frase “proyectar sobre la base de autoestados”.

4. Las transformaciones espaciales se generan por \mathbf{p}

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

5. La evolución temporal la realiza H (el hamiltoniano).

Extrañamente el punto 4 estaba vacío. Raro.

1.4.7 Operador de dispersión

$$\Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \langle A \rangle \mathbb{1}$$

la dispersión será nula en un autoestados del operador \hat{A} . Luego la dispersión cualitativamente nos dice “qué tan lejos” del autoestado nos hallamos.

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle(\hat{A} - \langle A \rangle \mathbb{1})^2\rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2\rangle = \langle A^2 \rangle - 2A\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

y la relación de dispersión generalizada

$$\langle(\Delta A)^2\rangle \langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4} |\langle[A, B]\rangle|^2$$

1.4.8 Espectro continuo

Hay observables con espectro de autovalores continuo. Nos podemos construir la siguiente tabla para comparar ambos escenarios.

Espectro discreto	Espectro continuo
$A a'\rangle = a' a'\rangle$	$Y y'\rangle = y' y'\rangle$
$\mathbb{1} = \sum_{a'}^N a'\rangle \langle a' $	$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} y'\rangle \langle y' dy'$
$\langle a' a'' \rangle = \delta_{a' a''}$	$\langle y' y'' \rangle = \delta(y' - y'')$
$\sum_{a'}^N \langle a' a'' \rangle \langle a'' = \langle a' $	$\int_{-\infty}^{\infty} dy'' \langle y' y'' \rangle \langle y'' = \langle y' $
$\sum_{a'}^N a'\rangle \langle a' \alpha \rangle = \alpha\rangle$	$\int_{-\infty}^{\infty} dy' y'\rangle \langle y' \alpha \rangle = \alpha\rangle$
$\sum_{a'}^N \langle a' \alpha \rangle ^2 = 1$	$\int_{-\infty}^{\infty} dy' \langle y' \alpha \rangle ^2 = 1$
$\langle \beta \alpha \rangle = \sum_{a'}^N \langle \beta a' \rangle \langle a' \alpha \rangle$	$\langle \beta \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy' \langle \beta y' \rangle \langle y' \alpha \rangle$

1.4.9 La función de onda

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle$$

donde

$$\langle x' | \alpha \rangle dx'$$

es la densidad de probabilidad y

$$|\langle x' | \alpha \rangle|^2$$

es la amplitud de probabilidad. La densidad de probabilidad, en el formalismo de Schrödinger, es la función de onda

$$\Psi_{\alpha}(x) = \langle x | \alpha \rangle$$

siendo este el vínculo entre la representación de Dirac y la función de onda,

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \int dx' \langle \beta | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = \int dx' \Psi_{\beta}^*(x) \Psi_{\alpha}(x)$$

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \int \int dx' dx'' \langle \beta | x'' \rangle \langle x'' | A | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle$$

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \int \int dx' dx'' \Psi_{\beta}^*(x'') \langle x'' | A | x' \rangle \Psi_{\alpha}(x')$$

y si $A = f(\hat{x})$ entonces $f(\hat{x}) | x' \rangle = f(x') | x' \rangle$ y

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \int \int dx' dx'' \Psi_{\beta}^*(x'') f(x') \delta(x'' - x') \Psi_{\alpha}(x')$$

y entonces

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \int dx' \Psi_{\beta}^*(x') f(x') \Psi_{\alpha}(x').$$

En forma análoga tenemos la representación de momento;

$$\hat{p} | p' \rangle = p' | p' \rangle \quad \langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p'') \quad | \alpha \rangle = \int dp' | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle$$

$$\Phi_{\alpha}(p') = \langle p' | \alpha \rangle.$$

1.4.10 Operador de traslación

Se le pedirá

$$T_{(dx')} | x' \rangle = | x' + dx' \rangle$$

siendo este requerimiento intuitivamente adecuado para una traslación. Nótese que dx' no es un operador, es el parámetro de la traslación.

Cumplirá las propiedades

- Unitariedad:

$$T^{\dagger} T = T T^{\dagger} = \mathbb{1}$$

para que no varíe la probabilidad ante un cambio de coordenadas.

- Aditividad:

$$T_{(dx')} T_{(dx'')} = T_{(dx' + dx'')}$$

porque vale en mecánica clásica.

- Existencia de inverso:

$$T_{(dx')}^{-1} = T_{(-dx')}$$

- Límite a $\mathbb{1}$

$$T_{(dx')} \rightarrow \mathbb{1} \quad \text{si} \quad dx' \rightarrow 0$$

Se propone un

$$T_{(dx')} = \mathbb{1} - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'$$

con \mathbf{K} hermitico (notemos que τ no es hermitico). Comparando con mecánica clásica vemos que \mathbf{p} origina las traslaciones, entonces identificamos K con p .

Hay que ver el carácter vectorial de estas cosas.

Entonces pedimos que \mathbf{p} cuántico origine las traslaciones

$$\mathbf{K} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \quad T_{(dx')} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'$$

y así

$$T_{(dx')} |p'\rangle = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}' \right) |p'\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} p' dx \right) |p'\rangle$$

el autovalor no es real, pues T no es hermitico.

Partiendo del conmutador

$$xT_{(dx')} - T_{(dx')}x = dxT_{(dx')}$$

entonces

$$[x, T_{(dx')}] = dxT$$

y con $dx \sim 0$ a orden uno (esto significa que tiramos los términos cuadráticos en dx)

$$[x, p_x] = i\hbar$$

se llega a la incompatibilidad de posición y momento, generalizando

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

Pero las traslaciones en diferentes direcciones conmutan

$$[T_{(d\mathbf{x}'), T_{(d\mathbf{x}'')}] = 0 \quad [p_i, p_j] = 0$$

Sumando infinitas traslaciones infinitesimales tenemos una traslación finita,

$$T_{(\Delta x')} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} p \frac{\Delta x'}{N} \right)^N = e^{-i/\hbar p \Delta x'}$$

y entonces

$$T_{(\Delta x')} = e^{-i/\hbar \mathbf{p} \cdot \Delta \mathbf{x}'}$$

1.4.11 p en la representación x

$$T_{(\Delta x)}|\alpha\rangle = \int dt' T|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \int dt' |x' + \Delta x\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \int dt' |x'\rangle \langle x' - \Delta x|\alpha\rangle$$

pero

$$\frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \approx \frac{-\langle x' - \Delta x|\alpha\rangle + \langle x'|\alpha\rangle}{\Delta x}$$

y entonces

$$-\frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \Delta x + \langle x'|\alpha\rangle = \langle x' - \Delta x|\alpha\rangle$$

$$T|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \left(\langle x'|\alpha\rangle - \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \Delta x \right) = \int dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle - \int dx' |x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \Delta x$$

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} p \Delta x\right) |\alpha\rangle = |\alpha\rangle - \int dx' |x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \Delta x$$

$$\frac{i}{\hbar} p \Delta x |\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle \Delta x$$

y así

$$p|\alpha\rangle = -i\hbar \int dx' |x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle$$

de modo que usádo este resultado se tienen

$$\langle x''|p|\alpha\rangle = -i\hbar \int dx' \langle x''|x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle$$

$$\langle x''|p|\alpha\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x''|\alpha\rangle$$

$$\langle \beta|p|\alpha\rangle = \int dx' \langle \beta|x'\rangle (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'|\alpha\rangle$$

$$\langle \beta|p|\alpha\rangle = \int dx' \Psi_{\beta}^*(x') (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x'} \Psi_{\alpha}(x')$$

de lo que se deduce

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

que es el resultado más importante de la sección.

1.4.12 Cambio entre representaciones x y p

$$\langle x' | \hat{p} | p' \rangle = -i\hbar \int dx' \langle x' | x' \rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle$$

y entonces,

$$p' \langle x' | p' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle,$$

que es una ecuación diferencial para $\langle x' | p' \rangle$. Luego

$$\int \frac{1}{\langle x' | p' \rangle} \partial \langle x' | p' \rangle = \int \frac{ip'}{\hbar} dx'$$

$$\log \langle x' | p' \rangle = \frac{ip'x'}{\hbar} + Cte.$$

$$\int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | x'' \rangle = \langle x' | x'' \rangle = \delta(x - x')$$

$$\int dp' e^{ip'x'/\hbar} |N|^2 = \delta(x - x')$$

$$|N| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

$$\langle x' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar}$$

Con este escalar podemos cambiar entre representaciones. Usando esto podemos ver que $\Psi_\alpha(x')$ y $\Phi_\alpha(p')$ son transformadas de Fourier la una de la otra.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{iap(x-x')} = \frac{2\pi}{a} \delta(x - x')$$

1.4.13 Corchetes de Poisson versus conmutadores

Hay una equivalencia entre corchetes de Poisson y conmutadores, a saber:

$$[A, B]_{\text{classic}} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [A, B]$$

o

$$[A, B]_{\text{classic}} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

Capítulo 2

Dinámica cuántica

Queremos ver la evolución temporal de los kets

$$|\alpha, t_0, t\rangle,$$

notación que refiere al estado α que partió en t_0 al tiempo t . Pictóricamente

$$|\alpha, t_0\rangle \xrightarrow[\text{evoluciona}]{} |\alpha, t_0, t\rangle$$

Emplearemos para ello un operador de evolución temporal $U_{(t, t_0)}$ al cual le pediremos

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U |\alpha, t_0\rangle$$

con las propiedades

- Unitariedad

$$\langle \alpha, t_0, t | \alpha, t_0, t \rangle = 1 \forall t$$

$$\langle \alpha, t_0 | U^\dagger U | \alpha, t_0 \rangle = 1 \Rightarrow U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1}$$

para conservación de la probabilidad.

- Linealidad

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) \quad t_2 > t_1 > t_0$$

- Límite a $\mathbb{1}$

$$U_{(t, t_0)} \rightarrow \mathbb{1} \quad \text{si} \quad t \rightarrow t_0$$

o bien

$$U_{(t_0+dt, t_0)} \rightarrow \mathbb{1} \quad \text{si} \quad dt \rightarrow 0$$

Se propone entonces un

$$U_{(t+dt,t)} = \mathbb{1} - i\Omega dt$$

con Ω hermitico. Comparando con clásica vemos que H origina la evolución temporal, entonces identificamos Ω con H , del modo $\Omega = H/\hbar$ así que

$$U_{(t+dt,t)} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt.$$

De esta forma

$$U_{(t+dt,t_0)} = U_{(t+dt,t)} U_{(t,t_0)} = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) U_{(t,t_0)}$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{U_{(t+dt,t_0)} - U_{(t,t_0)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H U_{(t,t_0)}$$

y entonces

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = H U$$

que es la ecuación para $U_{(t,t_0)}$.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_{(t,t_0)} |\alpha, t_0\rangle = H U_{(t,t_0)} |\alpha, t_0\rangle$$

y arribamo a la ecuación de Schrödinger para kets

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle = H |\alpha, t_0, t\rangle$$

donde el inconveniente es que $H = H(t)$.

El concepto se ilustra en la figura siguiente

2.1 Dinámica cuántica

2.1.1 Casos de solución de $U(t, t_0)$

- Supongamos $H \neq H(t)$, entonces

$$U(t, t_0) = e^{-i/\hbar H(t-t_0)}$$

- Sea $H = H(t)$, entonces

$$U(t, t_0) = e^{-i/\hbar \int_{t_0}^t H(t') dt'}$$

y la integral puede hacerse una vez conocida la expresión de $H(t)$.

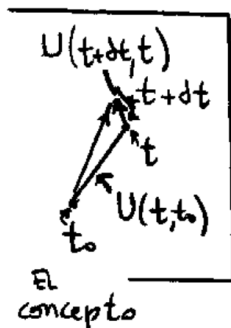


Figura 0.1

- Sea $H = H(t)$ con $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$ entonces

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \dots \times \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n)$$

y esta es la serie de Dyson (del físico Freeman Dyson.)

El problema que suscita es debido a que si H a diferentes tiempos no conmuta no podemos poner la exponencial en serie de potencias. En realidad $\exp(\square)$ tiene sentido sólo si la serie

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \square^n$$

tiene sentido; es decir, si no surgen ambigüedades al tomar la potencia n -ésima del operador \square .

Para el caso 1 es simplemente

$$a$$

pero para el caso 3 es

$$a$$

puesto que al operar es

$$a$$

pues $[H(t'), H(t'')] \neq 0$. En el caso 2 $(\int_{t_0}^t H(t') dt')^n$ no tiene problemas puesto que está provista la conmutatividad.

El operador \square no se deja poner sombreros, quiere andar con la cabeza descubierta

2.1.2 Soluciones útiles

Primeramente conseguimos un \hat{A} tal que $[A, H] = 0$ y entonces (estoy considerando $H \neq H(t)$)

$$a,$$

luego

$$a$$

con \hat{H} y \hat{A} conmutan se tiene

$$a$$

Entonces operamos con el H para

$$a$$

y así

$$a$$

de manera que comparando con

$$a$$

El coeficiente es el mismo pero le hemos sumado una fase $\exp(-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar)$ que no es global.

2.1.3 Evolución de valores de expectación

Recordemos primeramente que los autoestados no evolucionan. Luego

$$a$$

La fase es global es considerar una autoestado. La podemos descartar (setear igual a uno)

$$a$$

El valor de expectacion de un operador respecto a un autoestado no varía.

$$a$$

$$a$$

$$a$$

El valor de expectación de un operador respecto a un estado general tiene una fase no global que produce términos de interferencia.

2.1.4 Relaciones de conmutación

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$$

$$[A, B] = -[B, A]$$

$$[A, B \cdot C] = B[A, C] + [A, B]C$$

Acá no es baca + caballo puesto que no conmutan.

$$i\hbar[A, B]_{\text{classic}} = [A, B]$$

donde $[\cdot, \cdot]_{\text{classic}}$ es el corchete de Poisson. Las relaciones de conmutación fundamentales son

$$[x_i, x_j] = 0 \quad [p_i, p_j] = 0 \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

a las que podemos sumar

$$[x, f(p)] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial p} \quad [p, G(x)] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial x}$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$$

2.1.5 La ecuación de Schrödinger

$$\text{acon} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

Puedo meter un bra $\langle x' |$ que no depende del tiempo y entonces

$$a$$

$$a$$

de manera que resulta la ecuación de Schrödinger

$$a.$$

2.1.6 Representación de Heisenberg

Los kets y los operadores no tienen sentido físico, pero sí los valores de expectación : toda física podrá modificar los primeros pero debe conservar los valores de expectación. Así tenemos dos representaciones posibles:

Schrödinger	Heisenberg
$ \alpha\rangle \rightarrow U \alpha\rangle$	$ \alpha\rangle \rightarrow \alpha\rangle$
$A \rightarrow A$	$A \rightarrow U^\dagger A U$
$ a'\rangle \rightarrow a'\rangle$	$ a'\rangle \rightarrow U^\dagger a'\rangle$

Así vemos que en Schrödinger los kets evolucionan y los operadores permanecen fijos; al igual que los autoestados. En cambio en Heisenberg los kets no evolucionan pero sí lo hacen los operadores y los autoestados.

Deben notar que:

1. Los productos internos no cambian con el tiempo

a

2. Los valores de expectacion son los mismos en ambos esquemas

a

$\langle A \rangle^{(S)} = \langle A \rangle^{(H)} \qquad A(t)^H = U(t)^\dagger A^S U(t)$

El operador \hat{A} en Schrödinger no depende explícitamente del tiempo. La idea es que le “pegamos” a los operadores la evolución temporal de los kets.

a

pero a $t = t_0$ las representaciones coinciden,

a

La ecuación de Heisenberg

a

\Rightarrow

a

a

a

y llegamos a la ecuación de Heisenberg

$$\frac{\partial A^{(H)}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, H^{(H)}]$$

si $A^{(H)}$ conmuta con el $H^{(H)}$, entonces $A^{(H)}$ es una cantidad conservada (una constante de movimiento). En ese caso el operador no depende del tiempo y entonces $A^{(H)} = A^{(S)}$.

Evolución de autoestados

$$a,$$

aplico un U^\dagger a ambos lados y entonces

$$a$$

los a' no dependen de la representación porque tienen significado físico. Entonces los $|a'\rangle$ evolucionan

$$a$$

$$a$$

$$a$$

puesto que recordemos, nota importante,

$$a$$

entonces H es el mismo en ambas puesto que $\hat{U} = \hat{U}(\hat{H})$ y $[U, H] = 0$.
De esta forma los autoestados evolucionan al revés

$$a$$

Podemos ver de otro modo la equivalencia

$$a$$

pero

$$a$$

$$a$$

Coefficientes

Los coeficientes en Schrödinger y en Heisenberg son

$$a$$

Entonces en Schrödinger es

$$a$$

mientras que en Heisenberg es

$$a$$

Los coeficientes en las expresiones son iguales como corresponde a toda magnitud que tiene sentido físico, pues $|c_a(t)|^2$ es la probabilidad.

2.1.7 Teorema de Ehrenfest

Para una partícula libre, donde $p(t) = p(0)$ es constante de movimiento,

$$x^{(H)} = x(0) + \frac{p(0)}{m}t$$

y se tiene

$$[x(t), x(0)] = -\frac{i\hbar}{m}t$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p, H] = \frac{1}{i\hbar}[p, V(x)] = \frac{1}{i\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \right),$$

de modo que

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad \longrightarrow \quad m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$p = m \frac{dx}{dt} \quad \frac{dp}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

donde estamos usando

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H]$$

Es necesario remarcar que relaciones como $[x, p] = i\hbar$ son para operadores en la picture de Schrödinger, donde los operadores no cambian en el tiempo. Estamos en efecto haciendo $[x(0), p(0)] = i\hbar$

$$\left\langle \alpha, t_0 \left| m \frac{d^2x}{dt^2} \right| \alpha, t_0 \right\rangle = - \left\langle \alpha, t_0 \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \alpha, t_0 \right\rangle$$

$$m \frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle \alpha, t_0 | x^H | \alpha, t_0 \rangle = - \left\langle \alpha, t_0 \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \alpha, t_0 \right\rangle$$

y entonces el teorema de Ehrenfest es

$$m \frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle x^{(s)} \rangle = - \left\langle \frac{\partial V^{(s)}}{\partial x} \right\rangle$$

los valores de expectación son iguales en ambas representaciones.

Capítulo 3

El oscilador armónico

Para el oscilador armónico 1D el hamiltoniano y energía eran

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

pero este problema puede resolverse usando un nuevo operador \hat{a}

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + i \frac{p}{m\omega} \right) \quad \text{con} \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - i \frac{p}{m\omega} \right)$$

que es suma de \hat{x}, \hat{p} pero que no es hermitico. Cumple que

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad aa^\dagger = \frac{H}{\hbar\omega} - 1 \quad H = \hbar\omega \left(aa^\dagger + \frac{1}{2} \right),$$

donde se define el operador número $\hat{N} \equiv a^\dagger a$ que al verificar $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$ tienen base de autoestados en común $\{|n\rangle\}$. En efecto

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle \quad \hat{H} |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$$

siendo n el número de cuantos de energía. Se cumplen además

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = -[a, a^\dagger a] = -(a^\dagger [a, a] + [a, a^\dagger] a) = -a$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = -[a^\dagger, a^\dagger a] = -(a^\dagger [a^\dagger, a] + [a^\dagger, a] a^\dagger) = a^\dagger$$

Queremos ver que le hace a^\dagger a un autoestado $|n\rangle$ y luego a sobre el mismo.

$$Na^\dagger |n\rangle = ([N, a^\dagger] + a^\dagger N) |n\rangle = a^\dagger |n\rangle + a^\dagger n |n\rangle$$

$$\hat{N}(a^\dagger |n\rangle) = (n+1)(a^\dagger |n\rangle)$$

Entonces, como no hay degeneración y tenemos $N|n'\rangle = n'|n'\rangle$ entonces

$$a^\dagger |n\rangle = c_1 |n+1\rangle,$$

y procediendo de modo idem para $a|n\rangle$ será

$$a|n\rangle = c_2 |n-1\rangle$$

Luego,

$$a^\dagger |n\rangle = c_1 |n+1\rangle \xrightarrow{DC} \langle n+1|c_1^* = \langle n|a$$

$$a|n\rangle = c_2 |n-1\rangle \xrightarrow{DC} \langle n-1|c_2^* = \langle n|a^\dagger$$

y entonces

$$\langle n|N|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n-1|c_2^* c_2|n-1\rangle = |c_2|^2 \langle n-1|n-1\rangle$$

$$n = \langle n|aa^\dagger - 1|n\rangle = -1 + \langle n|aa^\dagger|n\rangle = -1 + \langle n+1|c_1^* c_1|n+1\rangle = -1 + |c_1|^2 \langle n+1|n+1\rangle$$

siendo

$$|c_2| = \sqrt{n} \quad |c_1| = \sqrt{n+1}$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

y entonces de esta forma \hat{a}^\dagger es el operador de creación de cuantos y \hat{a} el de aniquilación.

3.0.8 El estado fundamental $\langle 0 \rangle$

$$a|n\rangle \xrightarrow{DC} \langle n|a^\dagger$$

y desde el postulado para productos internos,

$$(\langle n|a^\dagger)(a|n\rangle) \geq 0 \quad n\langle n|n\rangle \geq 0 \Rightarrow n \geq 0$$

entonces n cabalga por los naturales. Si hacemos

$$a|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad a^2|n\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1} |n-2\rangle \dots$$

en algún momento se llega a $|n=0\rangle$, entonces $E_0 = \hbar\omega/2$ y

$$|0\rangle \equiv \text{El fundamental}$$

y no se puede bajar más,

$$\hat{a}|0\rangle = 0.$$

Por otra parte, con el \hat{a}^\dagger se puede llegar a cualquier estado

$$a^\dagger|0\rangle = \sqrt{1}|1\rangle, \quad a^{\dagger 2}|0\rangle = \sqrt{1}\sqrt{2}|2\rangle = \sqrt{1}\sqrt{2}\sqrt{3}|3\rangle$$

$$\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = |n\rangle$$

Las matrices de \hat{a} , \hat{a}^\dagger sólo tienen una diagonal corrida de elementoss

$$\langle n' | a | n \rangle = \sqrt{n} \langle n' | n-1 \rangle = \sqrt{n} \delta_{n', n-1}$$

$$\langle n' | a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} \langle n' | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}$$

También puede verse que

$$\langle n | x | n \rangle = 0 \quad \langle n | p | n \rangle = 0$$

y por ello

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_{|0\rangle} \langle (\Delta p)^2 \rangle_{|0\rangle} = \frac{\hbar^2}{4}$$

el estado fundamental es el de incerteza mínima.

3.0.9 Función de onda

Siendo $\Psi_n(x') = \langle x' | n \rangle$ quiero evaluar $\Psi_0(x') = \langle x' | 0 \rangle$ y ver que como

$$\langle x' | a | 0 \rangle = 0$$

tengo

$$0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left\langle x' \left| x + \frac{ip}{m\omega} \right| 0 \right\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left[x' \langle x' | 0 \rangle + \frac{i}{m\omega} \langle x' | p | 0 \rangle \right]$$

$$x' \langle x' | 0 \rangle + \frac{i}{m\omega} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \langle x' | 0 \rangle = 0$$

entonces

$$x' \langle x' | 0 \rangle = -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | 0 \rangle$$

$$-\int \frac{m\omega}{\hbar} x' dx' = \int \frac{d \langle x' | 0 \rangle}{\langle x' | 0 \rangle} \Rightarrow \langle x' | 0 \rangle = \kappa e^{-m\omega x'^2/(2\hbar)}$$

y entonces

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | x' \rangle \langle x' | 0 \rangle dx' = \int_{-\infty}^{\infty} |\kappa|^2 e^{-m\omega x'^2/\hbar} dx' = |\kappa|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

$$|\kappa| = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{1/4}}$$

donde usamos el conocido resultado $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\pi/a}$, llegamos al llamado pack gaussiano.

$$\langle x' | 0 \rangle = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(x'/x_0)^2}$$

El estado fundamental tiene incerteza mínima y debe corresponder a un paquete gaussiano.

Notemos que \hat{a}^\dagger crea sobre ket y aniquila sobre bra, mientras que \hat{a} aniquila sobre ket y crea sobre bra,

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \Rightarrow \langle n| a = \langle n+1| \sqrt{n+1}$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \Rightarrow \langle n| a^\dagger = \langle n-1| \sqrt{n}$$

3.0.10 Interferencia en experimento de Young

Consideremos la situación depicted en la figura bajo estas líneas

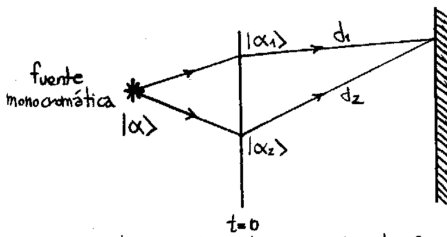


Figura 0.1

Uso \hat{H} de partículas libres.

$$\frac{1}{2} |\alpha\rangle = |\alpha_1\rangle = |\alpha_2\rangle$$

para $t > 0$ se tiene

$$|\tilde{\alpha}_1\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\alpha_1\rangle = e^{-iE_\alpha t/\hbar} |\alpha_1\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}_2\rangle = e^{-iE_\alpha t/\hbar} |\alpha_2\rangle$$

En la pantalla debe verse la interferencia de los dos estados solapados.

$$|\tilde{\alpha}\rangle = |\tilde{\alpha}_1\rangle + |\tilde{\alpha}_2\rangle = e^{-iE_\alpha \frac{d_1}{v}/\hbar} |\alpha_1\rangle + e^{-iE_\alpha \frac{d_2}{v}/\hbar} |\alpha_2\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{2} e^{-iE_\alpha \frac{d_1}{v}/\hbar} [1 + e^{-iE_\alpha \frac{d_2-d_1}{v}/\hbar}] |\alpha_1\rangle$$

y si definimos

$$\beta = E_\alpha \frac{d_2 - d_1}{v} / \hbar,$$

resulta entonces

$$\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = \frac{1}{4} |1 + e^{-iE_\alpha \frac{d_2-d_1}{v}/\hbar}|^2 = \frac{1}{4} ((1 + \cos \beta)^2 + \sin^2 \beta) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(\beta).$$

Al partir el estado $|\alpha_1\rangle$ y volver a unirlos en $|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle$ vemos una intensidad que dependa de la diferencia de camino.

3.0.11 Cambio de cero del potencial

En mecánica clásica la física de un problema no se ve afectada por un cambio de gauge. Si movemos el cero de potencial, la situación física es la misma. Veamos qué sucede en mecánica cuántica.

$$|\alpha, t, t_0\rangle = e^{-i(p^2/2m + V(x))(t-t_0)/\hbar} |\alpha, t_0\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}, t, t_0\rangle = e^{-i(p^2/2m + V(x) + V_0)(t-t_0)/\hbar} |\alpha, t_0\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}, t, t_0\rangle = e^{-iV_0(t-t_0)/2} |\alpha, t, t_0\rangle$$

y entonces vemos que $|\tilde{\alpha}, t\rangle$ y $|\alpha, t\rangle$ difieren en una fase, de manera que los valores de expectación no cambian (con V_0 constante).

Este es un experimento ideal (pensado). Dentro de los cilindros hay campo nulo. Se varia el V abriendo y cerrando la llave a la entrada y a la salida. Se cambia la fase de las partículas inferiores respecto de las superiores, entonces habrá interferencia en O .

Clásicamente no hay variación,

$$\Delta \text{fase} = -\frac{i}{\hbar} e \int_{t_1}^{t_2} V_1(t) - V_2(t) dt = -\frac{i}{\hbar} e \Delta V$$

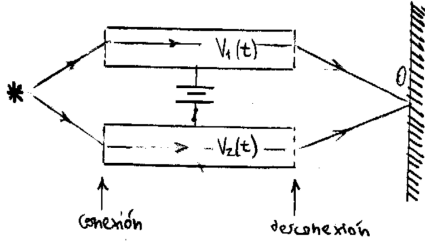


Figura 0.2

Lo que realmente cuenta es la diferencia de potencial ΔV , la cual sí tiene sentido físico porque es independiente de la medida y porque pueden escribirse los campos en función de aquella.

$$E = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 + e\phi$$

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x_i, H] = \frac{p_i e A_i}{m}$$

3.1 El propagador

Físicamente representa la probabilidad de transición entre autoestados por el paso del tiempo, $|x'\rangle_{t_0} \rightarrow |x''\rangle_t$

$$\langle x'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x' \rangle \equiv K(x'', t; x', t_0)$$

$$\langle x'' | \alpha, t_0, t \rangle = \langle x'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \alpha, t_0 \rangle$$

$$\langle x'' | \alpha, t_0, t \rangle = \int dx' \langle x'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x' \rangle \langle x' | \alpha, t_0 \rangle$$

$$\Psi_\alpha(x'', t) = \int dx' K(x'', t; x', t_0) \Psi_\alpha(x', t_0)$$

Podemos pensar que el propagador lleva la función de onda desde t_0 a t . Se puede escribir:

$$K(x'', t; x', t_0) = \sum_{a'} \langle x'' | a' \rangle \langle a' | x' \rangle e^{-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar}$$

y metemos un observable \hat{A} donde $[A, H] = 0$ y $A|a'\rangle = a|a'\rangle$.

El propagador depende del potencial, pero no de la función de onda inicial. Se debe cumplir que:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} K(x', t; x, t_0) = \delta^3(x'' - x')$$

$$K(x'', t; x, t_0) = \langle x'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | a' \rangle \langle a' | x' \rangle = \sum_{a'} \Psi_{|a'\rangle}(x'', t) \langle a' | x' \rangle$$

$$K(x'', t; x, t_0) = \sum_{a'} c_{a'}(x') \Psi_{|a'\rangle}(x'', t)$$

y entonces el propagador es una función de Green que satisface

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x'') - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) K(x', t; x, t_0) = -i\hbar \delta^3(x'' - x') \delta(t - t_0)$$

con $K(x'', t; x', t_0) = 0$ si $t < 0$ que es la condición de contorno.

3.1.1 El propagador de la partícula libre

$$\begin{aligned} K(x'', t; x, t_0) &= \int dp' \langle x'' | e^{-ip^2(t-t_0)/2m\hbar} | p' \rangle \langle p' | x' \rangle \\ &= \int dp' e^{-ip'^2(t-t_0)/2m\hbar} \langle x'' | p' \rangle \langle p' | x' \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' e^{-ip'^2(t-t_0)/2m\hbar} e^{-ip'(x'-x'')/\hbar} \end{aligned}$$

y entonces el propagador de una partícula libre es

$$K(x'', t; x, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar(t-t_0)}} e^{i\frac{m(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}}$$

También se puede escribir el propagador en la representación de Heisenberg,

$$\langle x'' | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x' \rangle = \langle x'' | e^{-iHt/\hbar} e^{iHt_0/\hbar} | x' \rangle = \langle x'', t | x', t_0 \rangle$$

$$K(x'', t; x', t_0) = \langle x'', t | x', t_0 \rangle.$$

El propagador cumple con la propiedad de composición (como el $U(t, t_0)$), es decir:

$$K(x'', t; x, t_0) = K(x'', t; x, t_1) K(x', t_1; x, t_0) \quad t > t_1 > t_0$$

3.2 Integrales de camino de Feynmann

Consideramos una partícula yendo de (x_1, t_1) a (x_N, t_N) . Dividimos el tiempo

$$\delta t = \frac{t_N - t_1}{(N-1)}$$

y queremos ver la amplitud de transición desde el estado 1 al N .

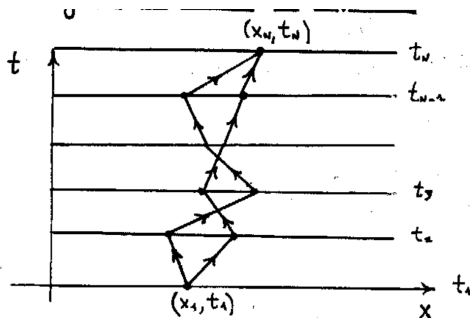


Figura 2.3

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \dots \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle$$

Se puede pensar como que estamos sumando sobre todos los posibles caminos entre (x_1, t_1) y (x_N, t_N) fijos. En mecánica clásica teníamos un solo camino, el que minimizaba la acción S

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} dt = \delta S = 0$$

pero en cambio en mecánica cuántica todos los caminos aportan. En un libro de Dirac, Feynmann lee

$$\langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \text{ corresponde a } e^{i \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L} / \hbar dt}$$

Definiremos

$$S_{(n, n-1)} \equiv \int_{t_{n-1}}^{t_n} \mathcal{L}(x, \dot{x}) dt$$

Luego para considerar la suma sobre todos los segmentillos a lo largo de un camino tendremos

$$\prod_{n=2}^N e^{i/\hbar S(n,n-1)} = e^{i/\hbar \prod_{n=2}^N S(n,n-1)} = e^{iS(N,1)/\hbar}$$

y hay que considerar TODOS los posibles caminos

$$\propto \sum_{\text{caminos}} e^{i/\hbar S(N,1)}$$

cuando $\hbar \rightarrow 0$ las trayectorias contribuyen con una cantidad que oscila loca y violentamente. Tienden a la cancelación para caminos aledaños. Por el $\hbar \sim 0$ la fase es grande y entonces se cancelan. Esto no ocurre cerca del camino (real) que cumple

$$\delta S(N,1) = 0$$

Para trayectorias cercanas la Δfase no es grande y hay interferencia constructiva. Para un δt infinitesimal es

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = N e^{iS(n,n-1)/\hbar}$$

$$S(n,n-1) = \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right) dt \approx \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{m}{2} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\delta t^2} - V\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}\right) \right) dt$$

donde la última expresión es a orden 1 (pues $\delta t \sim 0$).

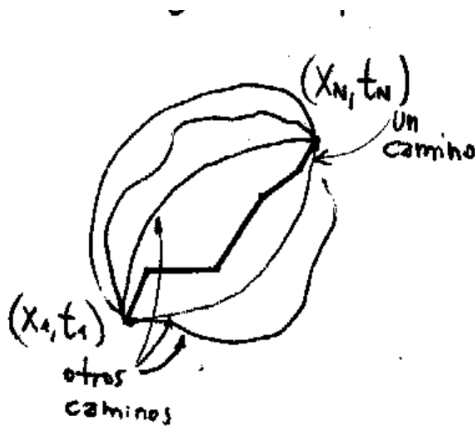


Figura 2.4

Consideremos, por ejemplo, una partícula libre, entonces $V = 0$ de modo que resolviendo

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = N e^{im(x_n - x_{n-1})/2\hbar\delta t}$$

Esto no es otra cosa que el propagador de una partícula libre. Para un Δt finito será

$$\langle x_n, t_n | x_1, t_1 \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\delta t} \right)^{(N-1)/2} \int dx_{n-1} \int dx_{n-2} \dots \int dx_2 \prod_{n=2}^N e^{iS(n, n-1)/\hbar}$$

$$\langle x_n, t_n | x_1, t_1 \rangle = \int_{x_1}^{x_n} D[x(t)] e^{i \int_{t_1}^{t_n} \mathcal{L}(x, \dot{x})/\hbar dt}$$

siendo esta última la integral de camino de Feynmann.

En base a éstas Feynman desarrolla una formulación equivalente de la mecánica cuántica que utiliza los conceptos de:

1. Superposición
2. Composición de la transición
3. Límite clásico con $\hbar \rightarrow 0$

Estas integrales contienen toda la información del sistema cuántico, aunque no sea sencillo extraerla.

Consideremos un propagador de $(x', 0) \rightarrow (x', t)$

$$G(t) = \int dx' K(x', t; x', 0) = \int dx' \langle x' | e^{-iHt/\hbar} | x' \rangle$$

$$G(t) = \sum_{a'} \int dx' \langle x' | e^{-iHt/\hbar} | a' \rangle \langle a' | x' \rangle = \sum_{a'} e^{-iE_{a'}t/\hbar} \int dx' \langle x' | a' \rangle \langle a' | x' \rangle$$

$$G(t) = \sum_{a'} e^{-iE_{a'}t/\hbar} \int dx' |\langle x' | a' \rangle|^2 = \sum_{a'} e^{-iE_{a'}t/\hbar}$$

que es reminiscencia de la función de partición de mecánica estadística. Tomando Laplace-Fourier

$$\tilde{G}(E) = -i \int dE \frac{G(t)}{\hbar} e^{iEt/\hbar} = \sum_{a'} \frac{1}{E - E_{a'}}$$

y el espectro de autoenergías son los polos de $\tilde{G}(E)$.

La expresión

$$\langle x, t | x_1, t_1 \rangle \equiv \text{Integral de camino de Feynmann}$$

satisface la ecuación de Schrödinger y es una alternativa a la formulación de la cuántica usual.

Introducción al momento angular (rotaciones)

El operador \hat{L} será el encargado de realizar las rotaciones. Por el álgebra visto en la mecánica clásica sabemos que, dado un vector \mathbf{v} y una matriz ortogonal R se tiene

$$\mathbf{v}' = R\mathbf{v} \quad \text{con} \quad |\mathbf{v}'| = |\mathbf{v}|$$

y

$$|\mathbf{v}|^2 = V^t V = (V^t R^t)(RV) \quad \text{pues} \quad R^t R = R R^t = \mathbb{1}$$

puesto que es una matriz ortogonal. Luego se cumplen

$$\text{clausura} \quad (R_1 R_2)(R_1 R_2)^t = R_1 R_2 R_2^t R_1^t = \mathbb{1}$$

el producto de dos matrices ortogonales es otra matriz ortogonal (aquella que cumple $R^t R = \mathbb{1}$)

$$\text{asociatividad} \quad R_1(R_2 R_3) = (R_1 R_2)R_3$$

$$\exists \text{ identidad} \quad R\mathbb{1} = \mathbb{1}R = R$$

$$\exists \text{ inversa} \quad R R^{-1} = R^{-1} R = \mathbb{1} \quad \text{con} \quad R^{-1} \equiv R^t$$

Esto define un grupo de matrices ortogonales que realiza rotaciones y se denomina $SO(3)$.

4.0.1 No conmutatividad de las rotaciones clásicas

Las rotaciones finitas no conmutan. Luego, el grupo de las rotaciones será un grupo abeliano

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R_x(\varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ 0 & \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix}$$

$$R_y(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & 0 & \sin(\varphi) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\varphi) & 0 & \cos(\varphi) \end{pmatrix}$$

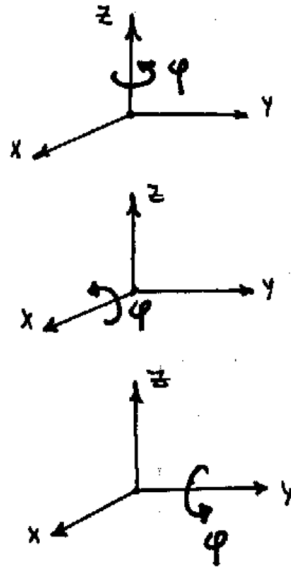


Figura 0.1

Si reemplazamos $\cos(\epsilon) \approx 1 - \epsilon^2/2$ y $\sin(\epsilon) \approx \epsilon$ hasta orden dos. Se puede ver que las rotaciones, en torno a ejes diferentes, sólo conmutan a orden uno

(ϵ) de manera que una rotación infinitesimal $d\varphi$ conmuta pero una rotación finita φ no lo hace.

4.1 Rotaciones cuánticas

Para las rotaciones cuánticas se pedirá

$$D(\hat{n}, d\phi) = \mathbb{1} - i \frac{\mathbf{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} d\phi,$$

rotación infinitesimal o bien

$$D(\hat{n}, \theta) = e^{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n} / \hbar \theta},$$

para rotación finita. Donde \hat{D} es el operador de las rotaciones y \hat{J} es un momento angular general. Se postula de esta forma para que \hat{D} cumpla las mismas propiedades que R y la relación de conmutación

$$R_x R_y - R_y R_x = R_z(\epsilon^2) - \mathbb{1}$$

$$D(\hat{x}, \epsilon) D(\hat{y}, \epsilon) - D(\hat{y}, \epsilon) D(\hat{x}, \epsilon) = D(\hat{z}, \epsilon^2) - D(\mathbb{1})$$

de modo que la cuenta lleva a

$$J_x J_y - J_y J_x = i\hbar J_z$$

la cual generalizando se llega a

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

que son las relaciones de conmutación generales para momento angular \hat{J} .

Para sistemas de espín 1/2 es

$$D(\hat{n}, \phi) \equiv e^{-i/\hbar \mathbf{S} \cdot \hat{n}}$$

Se puede ver que ante rotaciones cuánticas $D(\hat{n}, \phi)$ los valores de expectación transforman como vectores

$$\begin{pmatrix} \langle S'_x \rangle \\ \langle S'_y \rangle \\ \langle S'_z \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R(\hat{x}, \phi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle S_x \rangle \\ \langle S_y \rangle \\ \langle S_z \rangle \end{pmatrix}$$

En general $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ se transforma como vector y entonces \hat{J} es un operador vectorial. Para espín 1/2 es

$$|\alpha\rangle = \langle + | \alpha \rangle |+\rangle + \langle - | \alpha \rangle |-\rangle$$

$$D(\hat{z}, \phi) |\alpha\rangle = e^{-iS_z\phi/\hbar} \langle +|\alpha\rangle |+\rangle + e^{-iS_z\phi/\hbar} \langle -|\alpha\rangle |-\rangle$$

$$D(\hat{z}, \phi) |\alpha\rangle = \langle +|\alpha\rangle e^{-i\phi/2} |+\rangle + e^{i\phi/2} \langle -|\alpha\rangle |-\rangle$$

Si $\phi = 2\pi$ (cosa que debiera dejar al ket incólume) se tiene

$$D(\hat{z}, 2\pi) |\alpha\rangle = -\langle +|\alpha\rangle |+\rangle - \langle -|\alpha\rangle |-\rangle = -|\alpha\rangle$$

Luego, esto es una muestra del carácter no-clásico del spin; una vuelta completa le cambia el signo al ket pero notemos cuidadosamente que el valor de expectación – que es algo físico – no varía. Esto muestra que el ket no puede tener sentido físico.

4.1.1 Angulos de Euler

Se define una serie de rotaciones

$$1. R_z(\alpha) \quad 2. R_{y'}(\beta) \quad 3. R_{z'}(\gamma)$$

lo cual equivale a

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{z'}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha)$$

$$e^{-iJ_{z'}\gamma/\hbar} e^{-iJ_{y'}\beta/\hbar} e^{-iJ_z\alpha/\hbar} |\psi\rangle$$

Pero desconozco cómo operar en los ejes móviles z', y'

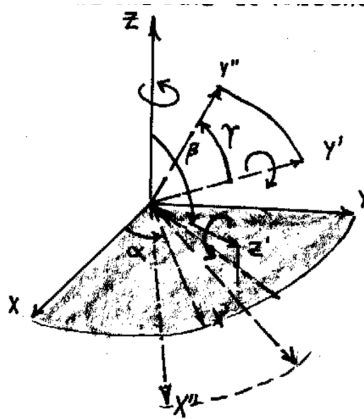


Figura 1.2 Los ángulos de Euler son una caracterización de una rotación general en 3D.

$$\begin{aligned}
R_{y'}(\beta) &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha) \\
R_{z'}(\gamma) &= R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}^{-1}(\beta) \\
R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)\underbrace{R_{y'}^{-1}(\beta)R_{y'}(\beta)}_{\mathbb{1}}R_z(\alpha) \\
R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)R_z(\gamma)R_z(\alpha) \\
R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)
\end{aligned}$$

Rotación equivalente a [1] pero para ejes fijos, puesto que en mecánica cuántica sabemos rotar en torno a ejes fijos.

Los ángulos de Euler son la caracterización de una rotación general en 3D. Entonces nuestra rotación en 3D cuántica será:

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = D_z(\alpha)D_y(\beta)D_z(\gamma) = e^{-iJ_z\alpha/\hbar}e^{-iJ_y\beta/\hbar}e^{-iJ_z\gamma/\hbar}$$

4.1.2 Autoestados y autovalores de J

Partimos de

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijR}J_R$$

y

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, \quad [J^2, J] = 0$$

siendo la última muy importante y probándose por evaluación directa. Lleva a

$$[J^2, J_i^n] = 0 \quad \text{con } i = x, y, z \quad n \in \mathbb{N}$$

Se eligen J^2, J_z como observables que conmutan

$$J^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle \quad J_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle$$

siendo a autovalor de J^2 y b de J_z .

Definiremos los operadores de subida y de bajada

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm J_y$$

que verifican

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad [J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm} \quad [J_{\pm}, J^2] = 0$$

Entonces se tiene

$$J^2(J_{\pm} |a, b\rangle) = J_{\pm} J^2 |a, b\rangle = a J_{\pm} |a, b\rangle \longrightarrow J_{\pm} |a, b\rangle = \square |a, b\rangle$$

$$(J_z J_{\pm} - J_{\pm} J_z) |a, b\rangle = \pm \hbar J_{\pm} |a, b\rangle$$

$$J_z (J_{\pm} |a, b\rangle) = (b \pm \hbar) (J_{\pm} |a, b\rangle) \longrightarrow J_{\pm} |a, b\rangle = \square |a, b \pm \hbar\rangle$$

$$J_{\pm} |a, b\rangle = c_{\pm} |a, b \pm \hbar\rangle$$

$$J_+ |a, b\rangle = c_+ |a, b + \hbar\rangle \quad J_- |a, b\rangle = c_- |a, b - \hbar\rangle$$

sube el J_z en una unidad de \hbar o bien baja el J_z en una unidad de \hbar .

$$J_+ J_- = J_x^2 + i J_y J_x - i J_x J_y + J_y^2, \quad J_- J_+ = J_x^2 - i J_y J_x + i J_x J_y + J_y^2$$

$$J^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+), \quad J^2 - J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+)$$

$$\langle a, b | J^2 - J_z^2 | a, b \rangle = 1/2 \langle a, b | J_+ J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+ | a, b \rangle$$

$$(a - b^2) \langle a, b | a, b \rangle = 1/2 [\langle a, b | J_+ J_+^\dagger | a, b \rangle + \langle a, b | J_+^\dagger J_+ | a, b \rangle]$$

$$(a - b^2) \langle a, b | a, b \rangle = |J_+^\dagger | a, b \rangle|^2 \geq 0, \quad \Rightarrow a \geq b^2$$

hay cota para b .

$$J_+ |a, b_M\rangle = 0$$

Como no puede seguir subiendo debe dar el ket nulo

$$J_- J_+ |a, b_M\rangle = 0$$

pero

$$J_- J_+ = J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y] = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

$$(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |a, b_M\rangle = 0$$

$$(a - b_M^2 - \hbar b_M) |a, b_M\rangle = 0$$

$$a = b_M(b_M - \hbar)$$

$$J_- |a, b_m\rangle = 0$$

y como no puede seguir bajando debe dar el ket nulo

$$J_+ J_- |a, b_m\rangle = 0$$

$$J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$$

$$(J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) |a, b_m\rangle = (a - b_m^2 + \hbar b_m) |a, b_m\rangle = 0$$

$$b_M(b_M + \hbar) = b_m(b_m - \hbar)$$

tiene solución $b_M - b_m = -\hbar$ si $b_M + b_m \neq 0$ pero esto es absurdo de manera que $b_M = b_m$. Entonces

$$-b_m = b_M \quad \Rightarrow \quad -b_M \leq b \leq b_M$$

Luego,

$$|a, b_m\rangle \longrightarrow |a, b_M\rangle$$

y como J_+ sube de a un \hbar será

$$b_M = b_m + n\hbar$$

y entonces

$$b_M = \frac{n\hbar}{2} = \frac{n}{2}\hbar = j\hbar$$

y se da que j es entero o semientero.

Definiremos

$$b_M \equiv j\hbar \quad a \equiv j(j+1)\hbar^2 \quad -j\hbar \leq b \leq j\hbar$$

pero como $b/\hbar = m$

$$b_M \equiv j\hbar \quad a \equiv j(j+1)\hbar^2 \quad -j \leq m \leq j$$

$$m = (-j, -j+1, -j+2, \dots, j-1, j) \quad 2j+1 \text{ valores de } m$$

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \quad J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$$

4.1.3 La normalización de J_{\pm}

$$J_+ |j, m\rangle = c_+ |j, m+1\rangle \quad J_-^\dagger = J_+$$

$$\langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle = \langle j, m | J_+^\dagger J_+ | j, m \rangle = |c_+|^2$$

$$\langle j, m | J^2 - J_z^2 - \hbar J_z | j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - \hbar^2 m = |c_+|^2$$

$$c_+ = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$\langle j, m | J_+ J_- | j, m \rangle = \langle j, m | J_-^\dagger J_- | j, m \rangle = |c_-|^2$$

$$= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2 = |c_-|^2$$

$$c_- = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

$$J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle \quad J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle$$

4.1.4 Elementos de matriz de J^2, J_z, J_+

Asumiendo normalización de $|j, m\rangle$ se tiene

$$\langle j', m' | J^2 | j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 \delta_{jj'} \delta_{m'm}$$

$$\langle j', m' | J_z | j, m \rangle = m\hbar \delta_{jj'} \delta_{m'm}$$

4.1.5 Elementos de matriz de $\mathcal{D}(R)$

Ahora queremos ver cual es la forma de los elementos de matriz de $\mathcal{D}(R)$

$$\mathcal{D}(R) = e^{i\mathbf{J} \cdot \vec{n} \phi / \hbar}$$

siendo que $\mathcal{D}(R)$ tiene por efecto rotar el sistema físico. Lo primero que hay que notar es que

$$\langle j', m' | \mathcal{D}(R) | j, m \rangle \propto \delta_{jj'}$$

porque $[J^2, J_i] = 0$ y entonces $[J^2, J_i^n] = 0$ y

$$\mathcal{D}(R) = f(J_i) \longrightarrow [J^2, \mathcal{D}(R)] = 0$$

y

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)} = \langle j, m' | e^{i\mathbf{J} \cdot \vec{n} \phi / \hbar} | j, m \rangle$$

es una matriz para cada j fijo con $\{(2j+1) \times (2j+1) = \text{dimensión}\}$

$$\mathcal{D}(R) | j, m \rangle = \sum_{m'} | j, m' \rangle \langle j, m' | e^{i\mathbf{J} \cdot \vec{n} \phi / \hbar} | j, m \rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) | j, m' \rangle$$

pero las rotaciones no cambian el j , $\mathcal{D}(R)$ conecta estados con la misma j y $\mathcal{D}(R) \in (2j+1) \times (2j+1)$

$$\mathcal{D}(R) | j, m \rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) | j, m' \rangle$$

La matriz de $\mathcal{D}(R)$ (no caracterizada por un único j) puede ponerse en forma diagonal por bloques:

$$\mathcal{D}(R) = \begin{pmatrix} \square & 0 & 0 \\ 0 & \square & 0 \\ 0 & 0 & \square \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{matrix} j' \\ j'' \\ j''' \\ \vdots \end{matrix}$$

con cada bloque de $(2j+1) \times (2j+1)$, pero siendo cada bloque irreducible. Las matrices de rotación con j fijo forman un grupo. $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ son los elementillos de la matriz.

$$|j, m\rangle \xrightarrow[\text{Rotación}]{} \mathcal{D}(R) |j, m\rangle = \sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) |j, m'\rangle$$

donde el $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ es la amplitud de hallar al $|j, m\rangle$ rotado en $|j, m'\rangle$

4.1.6 Forma explícita del operador $\mathcal{D}(R)$

Los ángulos de Euler permitieron caracterizar la rotación más general. Entonces

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)} &= \langle j, m' | e^{-iJ_z\alpha/\hbar} e^{-iJ_y\beta/\hbar} e^{-iJ_z\gamma/\hbar} | j, m \rangle \\ \mathcal{D}_{m'm}^{(j)} &= e^{-i(-m'\alpha+m\gamma)} \underbrace{\langle j, m' | e^{-iJ_y\beta/\hbar} | j, m \rangle}_{d_{m'm}^{(j)}} \end{aligned}$$

siendo el primer factor una fase. En los $d_{m'm}^{(j)}$ está la dificultad de la cuenta.

4.2 Formalismo de spinores de Pauli

Apropiado para trabajar con sistemas de espín 1/2. Estos sistemas son casos particulares de momento angular,

$$j = 1/2 \quad m = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

y se definen los spinores χ_{\pm} como

$$|+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+ \quad |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_-$$

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \langle + | \alpha \rangle \\ \langle - | \alpha \rangle \end{pmatrix}$$

$$\langle \alpha | = (\langle + | \alpha \rangle \quad \langle - | \alpha \rangle)$$

Para espín 1/2 podemos tomar $\mathbf{J} = \mathbf{S}$ por la analogía de las relaciones de conmutación. A su vez

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \text{con} \quad \vec{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

que es una especie de vector

$$\vec{\sigma} = \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right]$$

Luego esta equivalencia provee expresión de los operadores S_i en términos de matrices de 2×2 , así:

$$\frac{i}{2}[J_- - J_+] = J_y = S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$$

siendo que los J_y y S_y actúan sobre kets y el σ sobre spinores.

Las matrices de Pauli cumplen las propiedades básicas siguientes

$$\sigma_i^2 = \mathbb{1} \quad \sigma_i^\dagger = \sigma_i$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = i2\varepsilon_{ijR}\sigma_R \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = \delta_{ij}$$

$$\sigma_i^n = \begin{cases} \mathbb{1} & n \text{ par} \\ \sigma_i & n \text{ impar} \end{cases}$$

$$|+\rangle \equiv |j=1/2, m=1/2\rangle \quad |-\rangle \equiv |j=1/2, m=-1/2\rangle$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + i\vec{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$$

4.2.1 Aplicación a las rotaciones

$$\mathcal{D}(\hat{n}, \phi) = e^{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n} \phi / \hbar} = e^{-i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \phi / 2}$$

pero

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^n = \begin{cases} \vec{\sigma} \cdot \hat{n} & n \text{ impar} \\ \mathbb{1} & n \text{ par} \end{cases}$$

$$e^{-i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \phi / 2} = 1 - i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \frac{\phi}{2} - \frac{1}{2!}(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^2 \left(\frac{\phi}{2}\right)^2 + \frac{i}{3!}(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^3 \left(\frac{\phi}{2}\right)^3 - \dots$$

$$\mathcal{D}(\hat{n}, \phi) = e^{-i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \phi / 2} = \mathbb{1} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\vec{\sigma} \cdot \hat{n} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)$$

es el operador de rotación para sistemas de spin 1/2 (donde $\mathbb{1} \in 2 \times 2$). Con esta expresión podemos evaluar $d_{m'm}^{j=1/2}(\beta)$

$$d^{1/2}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix}$$

donde hemos usado los resultados

$$\cos(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x)^{2n+1}}{(2n+1)!} (-1)^n \quad \sin(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x)^{2n}}{(2n)!} (-1)^n$$

En el caso general el operador de rotación para sistemas de spin $1/2$ lucirá:

$$\begin{array}{cc} |+\rangle & |-\rangle \\ \mathcal{D}^{j=1/2}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ e^{-\frac{i}{2}(\gamma-\alpha)} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & e^{\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |+\rangle \\ |-\rangle \end{pmatrix} \end{array}$$

4.2.2 Ejemplo

$$d^{1/2}(\pi/2) = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$$

de manera que

$$d^{1/2}(\pi/2)\chi_+ = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$d^{1/2}(\pi/2)\chi_+ = \frac{\sqrt{2}}{2}(\chi_+ + \chi_-) = \frac{1}{2}(|+\rangle + |-\rangle)$$

$$d^{1/2}(\pi/2)\chi_+ = |S_x; +\rangle$$

Este resultado es intuitivamente lógico.

4.2.3 Rotaciones en sistemas con $j = 1$

Ahora tenemos

$$j = 1 \quad m = -1, 0, 1$$

recordando J_y en términos de escaleras

$$J_y = \frac{J_+ - J_-}{2i}$$

de modo que

$$\begin{array}{ccc} |1\ 1\rangle & |1\ 0\rangle & |1\ -1\rangle \\ J_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1\ 1\rangle \\ |1\ 0\rangle \\ |1\ -1\rangle \end{pmatrix} \end{array}$$

$$e^{-i \frac{J_y}{\hbar} \beta} = 1 - \frac{J_y}{\hbar} \beta + (-i)^2 \left(\frac{J_y}{\hbar} \beta \right)^2 \frac{1}{2!} + (-i)^3 \left(\frac{J_y}{\hbar} \beta \right)^3 \frac{1}{3!} + \dots$$

$$e^{-i \frac{J_y}{\hbar} \beta} = 1 - \frac{J_y}{\hbar} \beta - \frac{1}{2!} \left(\frac{J_y}{\hbar} \beta \right)^2 - \frac{i}{3!} \left(\frac{J_y}{\hbar} \beta \right)^3 + \dots$$

$$\left(\frac{J_y}{\hbar} \right)^n = \begin{cases} \left(\frac{J_y}{\hbar} \right) & n \text{ impar} \\ \left(\frac{J_y}{\hbar} \right)^2 & n \text{ par} \end{cases}$$

$$e^{-i \frac{J_y}{\hbar} \beta} = 1 - \left(\frac{J_y}{\hbar} \right)^2 (1 - \cos(\beta)) - i \left(\frac{J_y}{\hbar} \right) \sin(\beta) = d^{j=1}(\beta)$$

acá lo vemos como operador (es notación), $d_{m'm}^{j=1}(\beta)$ simboliza la matriz

$$\begin{array}{ccc} |1 \ 1\rangle & |1 \ 0\rangle & |1 \ -1\rangle \\ d^{j=1}(\beta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos(\beta)) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin(\beta) & \frac{1}{2}(1 - \cos(\beta)) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin(\beta) & \cos(\beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin(\beta) \\ \frac{1}{2}(1 - \cos(\beta)) & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin(\beta) & \frac{1}{2}(1 + \cos(\beta)) \end{pmatrix} \begin{array}{l} |1 \ 1\rangle \\ |1 \ 0\rangle \\ |1 \ -1\rangle \end{array} \end{array}$$

4.3 Momento angular orbital

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$$

verifica el álgebra de \mathbf{J} ,

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijR} L_R \quad L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k$$

$$L_z = x p_y - y p_x$$

Consideremos ahora una rotación en torno a z , en un $\delta\phi$,

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{i L_z \delta\phi}{\hbar} \right) |x', y', z'\rangle &= 1 - \frac{i P_y}{\hbar} (x \delta\phi) + \frac{i P_x}{\hbar} (y \delta\phi) |x', y', z'\rangle \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} (P_y x \delta\phi - P_x y \delta\phi) \right] |x', y', z'\rangle \end{aligned}$$

esto es una traslación en \hat{x}, \hat{y} ,

$$(1 - i \frac{L_z}{\hbar} \delta\phi) |x', y', z'\rangle = |x' - y' \delta\phi, y' + x' \delta\phi, z'\rangle$$

Esta traslación es debida a una rotación infinitesimal en $\delta\phi$ torno a z entonces genera las rotaciones clásicas en torno a z .

$$\Psi_\alpha(\mathbf{x}') = \langle x', y', z' | \alpha \rangle \xrightarrow{\text{Rotamos en } z} \left\langle x', y', z' \left| 1 - \frac{iL_z \delta\phi}{\hbar} \right| \alpha \right\rangle = \langle x' + y' \delta\phi, y' - x' \delta\phi, z' | \alpha \rangle$$

y en coordenadas esféricas,

$$\Psi_\alpha(\mathbf{x}') = \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle \xrightarrow{\text{Rotamos en } z} \langle r, \theta, \phi - \delta\phi | \alpha \rangle$$

Podemos hallar una expresión para L_z en esféricas:

$$\left\langle r, \theta, \phi \left| 1 - \frac{L_z \delta\phi}{\hbar} \right| \alpha \right\rangle \approx \langle \phi | \alpha \rangle - \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \phi | \alpha \rangle \delta\phi$$

identificamos

$$\left\langle \mathbf{r} \left| -\frac{iL_z}{\hbar} \right| \alpha \right\rangle = -\frac{\partial}{\partial \phi} \langle \mathbf{r} | \alpha \rangle$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

operador L_z en esféricas.

Esta construcción usa que

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \langle \phi | \alpha \rangle \approx \frac{\langle \phi + \delta\phi | \alpha \rangle - \langle \phi | \alpha \rangle}{\delta\phi} = \frac{\langle \phi | \alpha \rangle - \langle \phi - \delta\phi | \alpha \rangle}{\delta\phi}$$

y luego se despeja de la última $\langle \phi - \delta\phi | \alpha \rangle$.

Usando

$$L^2 = L_z^2 + \frac{1}{2} (L_+ L_- + L_- L_+)$$

se llega a

$$\langle r, \theta, \phi | L^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} [\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}] \right] \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle$$

$$L^2 = -\hbar^2 r^2 \nabla_{\theta, \phi}^2$$

donde $\nabla_{\theta, \phi}^2$ es la parte angular del laplaciano en coordenadas esféricas. Esto puede obtenerse también partiendo de

$$L^2 = \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}$$

Sea un H de partícula, sin spín, sujeta a potencial simétricamente esférico. Sabemos que la función de onda $\Psi_\alpha(\mathbf{r}')$ es separable en coordenadas esféricas, entonces:

$$\langle \mathbf{r} | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$\langle \mathbf{r} | n, l, m \rangle = (\langle r | \otimes \langle \theta, \phi |) (|n, l, m \rangle) = \langle r | n, l, m \rangle \langle \theta, \phi | l, m \rangle$$

Cuando el H es esféricamente simétrico (como en un potencial central) se tiene

$$[H, L_z] = [H, L^2] = 0$$

Trabajaremos solamente en la parte angular $|\theta, \varphi\rangle \equiv |\hat{n}\rangle$

$$\langle \hat{n} | \ell, m \rangle = Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\hat{n})$$

que es la amplitud de hallar $|\ell, m\rangle$ en la dirección \hat{n} .

Podemos vincular ahora los armónicos esféricos con los autoestados de L_z, L^2

$$L_z |\ell, m\rangle = m\hbar |\ell, m\rangle$$

de manera que

$$\langle \hat{n} | L_z | \ell, m \rangle = m\hbar \langle \hat{n} | \ell, m \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \hat{n} | \ell, m \rangle$$

y entonces

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto e^{im\phi}.$$

$$L^2 |\ell, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |\ell, m\rangle$$

y de modo ídem

$$\langle \hat{n} | L^2 | \ell, m \rangle = l(l+1)\hbar^2 \langle \hat{n} | \ell, m \rangle$$

$$(-\hbar^2 r^2 \nabla_{\theta, \phi}^2 + l(l+1)\hbar) \langle \hat{n} | \ell, m \rangle = 0$$

Entonces, con la ortogonalidad

$$\longrightarrow \langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

y con la completitud

$$\longrightarrow \int d\Omega |\hat{n}\rangle \langle \hat{n}| = 1$$

de manera que llegamos a

$$\int d\Omega \langle l', m' | \hat{n} \rangle \langle \hat{n} | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

Podemos hallar una expresión para

$$\langle \hat{n} | L_+ | l, l \rangle = 0$$

$$-i\hbar e^{i\phi} \left(i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \hat{n} | l, l \rangle = 0 \Rightarrow Y_l^m(\theta, \phi) = c_l e^{il\phi} \sin^l \theta$$

Luego usamos L_- para hallar sucesivamente los demás Y_ℓ^m

$$\frac{\langle \hat{n} | L_- | l, m \rangle}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} = \langle \hat{n} | l, m-1 \rangle$$

y por este camino se llega a

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos^{l-m} \theta)} (\sin \theta)^{2l}$$

con

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)(Y_l^m(\theta, \phi))^* \quad Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$$

En el caso de momento angular orbital ℓ no puede ser semientero porque entonces m sería semientero y en una vuelta de 2π

$$e^{im2\pi} = -1$$

entonces ψ no será univaluada

Además,

$$\langle \mathbf{x} | e^{-iL_z 2\pi/\hbar} | \alpha \rangle = \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle \quad (\text{no hay signo menos})$$

Armónicos esféricos como matrices de rotación

Se pueden hallar autoestados de dirección $|\hat{n}\rangle$ rotando el $|\hat{z}\rangle$,

$$\hat{n} = \mathcal{D}(R) |\hat{z}\rangle$$

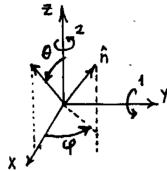


Figura 0.1

Necesitamos aplicar $\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(\alpha = \varphi, \beta = \theta, \gamma = 0)$

$$|\hat{n}\rangle = \sum_{m, \ell} \mathcal{D}(R) |\ell, m\rangle \langle \ell, m | \hat{z}\rangle$$

$$\langle \ell, m' | \hat{n}\rangle = \sum_{m, \ell} \langle \ell, m' | \mathcal{D}(R) | \ell, m\rangle \langle \ell, m | \hat{z}\rangle$$

pero como la $\mathcal{D}(R)$ no conecta ℓ diferentes, se tiene

$$\langle \ell, m' | \hat{n}\rangle = \sum_m \mathcal{D}_{m' m}^{\ell}(R) \langle \ell, m | \hat{z}\rangle$$

$$Y_\ell^{m'*}(\theta, \varphi) = \sum_m \mathcal{D}_{m'm}^\ell(R) Y_\ell^{m*}(\theta = 0, \varphi_{\text{indet}})$$

pero como $\theta = 0$, $Y_\ell^m = 0$ con $m \neq 0$ se tiene

$$\langle \ell, m | \hat{z} \rangle = Y_\ell^{m*}(\theta = 0, \varphi_{\text{indet}}) \delta_{m0}$$

$$\langle \ell, m | \hat{z} \rangle = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m0}$$

$$Y_\ell^{m'*}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \mathcal{D}_{m'0}^\ell(\alpha = \varphi, \beta = \theta, \gamma = 0)$$

la matriz de rotación en este caso es un armónico esférico.

La Ψ tiene la misma simetría que el potencial.

5.1 Suma de momentos angulares

5.1.1 Dos momentos de espín 1/2

Sean dos estados de espín 1/2

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \equiv \mathbf{S}_1 \otimes \mathbb{1}_2 + \mathbb{1}_1 \otimes \mathbf{S}_2$$

en cada espacio valen las relaciones usuales de conmutación

$$[S_{1/2i}, S_{1/2j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_{1/2k}, \quad [S_{1i}, S_{2j}] = 0$$

donde el último indica que operadores de espacios diferentes conmutan.

Un estado general es

$$|S_1, m_1\rangle \otimes |S_2, m_2\rangle \equiv |S_1, S_2; m_1, m_2\rangle$$

Hay cuatro estados

$$\begin{array}{cccc} S_1 & S_2 & m_1 & m_2 \\ |1/2, 1/2; 1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, 1/2; 1/2, -1/2\rangle \\ |1/2, 1/2; -1/2, -1/2\rangle \\ |1/2, 1/2; -1/2, 1/2\rangle \\ S_1 & S_2 & S_{1z} & S_{2z} \end{array}$$

que corresponden a los operadores $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ que conmutan (son un CCOC).

Podemos elegir otras base de operadores que conmutan que será: S_1^2, S_2^2, S, S_z , de modo que el estado general será

$$|S_1, S_2; S, m\rangle$$

Así tendremos

$$\begin{array}{c} S_1 \quad S_2 \quad S \quad m \\ \text{Triplete} \left\{ \begin{array}{l} |1/2, 1/2; 1, 1\rangle \\ |1/2, 1/2; 1, 0\rangle \\ |1/2, 1/2; 1, -1\rangle \end{array} \right. \\ \text{Singlete} \left\{ \begin{array}{l} |1/2, 1/2; 0, 0\rangle \end{array} \right. \\ S_1^2 \quad S_2^2 \quad S^2 \quad S_z \end{array}$$

y recordemos que $m_1 + m_2 = m$ y $s_1 + s_2 = s$

$$S^2 = (S_1 + S_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad S_z^2 = (S_{1z} + S_{2z})^2 = S_{1z}^2 + S_{2z}^2 + 2S_{1z} \cdot S_{2z}$$

Dada la repetición de S_1, D_2 se suelen identificar a las bases solamente

$$\left\{ \begin{array}{l} \{|m_1, m_2\rangle\} \\ \{|S, m\rangle\} \end{array} \right.$$

Además la base $\{|m_1, m_2\rangle\}$ se puede poner como

$$+ \equiv +1/2 \quad - \equiv -1/2$$

5.1.2 Cambio entre bases

Podemos hallar a ojo que

- $|++\rangle = |1, 1\rangle$
- $|--\rangle = |1, -1\rangle$

de manera que la única forma de tener $m = 1$ es con los dos spines up y la única forma de tener $m = -1$ es con los dos spines down.

Se hallan los otros con el operador de bajada

$$S_- \equiv S_{1-} + S_{2-}$$

y si descompongo S_- en S_{1-} y S_{2-} para operar en $\langle s, m \rangle$ se tiene

$$S_- |++\rangle = S_{1-} |++\rangle + S_{2-} |++\rangle = S_{1-} \otimes \mathbb{1}_2 |++\rangle + \mathbb{1}_1 \otimes S_{2-} |++\rangle = \hbar |+-\rangle + \hbar |+-\rangle$$

y ahora si opero con S_- ,

$$S_- |11\rangle = \sqrt{2}\hbar |10\rangle$$

$$\bullet |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-+\rangle + Ket+-)$$

Luego

$$|00\rangle = a|+-\rangle + b|-+\rangle$$

y puedo usar ortonormalidad

$$\langle 10 | 00 \rangle = 0 = \frac{a}{\sqrt{2}} + \frac{b}{\sqrt{2}} \quad \text{con } |a|^2 + |b|^2 = 1$$

$$\bullet |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

5.2 Teoría formal de suma de momentos angulares

Sea de sumar dos momentos angulares J_1, J_2 . Las relaciones de conmutación son

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_{1k} \quad [J_{2i}, J_{2j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_{2k} \quad [J_{1k}, J_{2l}] = 0$$

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbb{1}_2 + \mathbb{1}_1 \otimes \mathbf{J}_2 \equiv \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$$

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$$

El momento total \mathbf{J} cumple que

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_1J_2 \quad J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}$$

donde vemos que

$$[J_{1/2}^2, J^2] = 0 \quad [J_z, J^2] = 0 \quad [J_{1/2}^2, J_{1/2, z, +, -}] = 0$$

pero

$$[J^2, J_{1z}] \neq 0 \quad [J^2, J_{2z}] \neq 0$$

Esto deja dos opciones para elegir un CCOC

$J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}$	J_1^2, J_2^2, J^2, J_z
$ j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$	$ j_1, j_2; j, m\rangle$
base desacoplada	base acoplada

Se puede pasar de una base a otra con una identidad $\mathbb{1}$ apropiada

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle$$

$$1. |j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2}^j |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

con $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$ y $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \sum_{j, m} |j_1, j_2; j, m\rangle \langle j_1, j_2; j, m | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

$$2. |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \sum_{j, m} C_{m_1 m_2}^{j*} |j_1, j_2; j, m\rangle$$

con $-j \leq m \leq j$ y con $j \rightarrow \infty$.

Donde los $C_{m_1 m_2}^j$ son los coeficientes de Clebsch-Gordan. En 2 la \sum sería en $j \rightarrow \infty$, pero veamos la relación que hace algunos $C_{m_1 m_2}^j = 0$. Ante todo abreviaremos suprimiendo los índices j_1, j_2 con lo cual

$$C_{m_1 m_2}^j = \langle m_1, m_2 | j, m\rangle$$

5.2.1 Restricciones para la no nulidad de los coeficientes

$$(J_z - J_{1z} - J_{2z}) |j, m\rangle = (m\hbar - J_{1z} - J_{2z}) |j, m\rangle = 0$$

$$\langle m_1, m_2 | (J_z - J_{1z} - J_{2z}) |j, m\rangle = 0 \quad \hbar(m - m_1 - m_2) \langle m_1, m_2 | j, m\rangle = 0$$

entonces

$$\langle m_1, m_2 | j, m\rangle \neq 0 \iff m = m_1 + m_2$$

A su vez, en la suma de J_1 y J_2 resultan los j acotados por una desigualdad triangular

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

Asimismo los $C_{m_1 m_2}^j$ se toman reales, entonces

$$C_{m_1 m_2}^{j*} = C_{m_1 m_2}^j$$

y juntando todo se tiene

$$\langle m_1, m_2 | j, m\rangle \neq 0 \iff m = m_1 + m_2,$$

o lo que es equivalente

$$\langle j, m | m_1, m_2\rangle \iff |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

Ambas bases tienen la misma dimensión

$$\sum = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

Recordemos que cada j tiene $2j+1$ estados posibles (los m correspondientes a cada j) ($|m| \leq j$). Si sumamos $j_1 = 1, j_2 = 3/2$ tendremos

$$\dim = 2 \oplus 4 \oplus 6 = 3 \otimes 4 = 12$$

$$j = 1/2, 3/2, 5/2 \quad m_1 = -1, 0, 1$$

$$j = -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2 \quad m_2 = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$$

Podemos ver a ojo que

$$|j = 5/2, m = 5/2\rangle = |m_1 = 1, m_2 = 3/2\rangle$$

$$|j = 5/2, m = -5/2\rangle = |m_1 = -1, m_2 = -3/2\rangle$$

luego con el J_-, J_+ podemos construirnos los siguientes (utilizando ortonormalidad)

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm}$$

$$\sum_{m'_1, m'_2} \langle j', m' | m'_1, m'_2 \rangle \langle m'_1, m'_2 | j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm}$$

$$\sum_{m'_1, m'_2} \langle m'_1, m'_2 | j, m \rangle^2 = 1$$

siendo esto último la ortonormalidad.

5.2.2 Relación de recurrencia

$$J_{\pm} |j, m\rangle = (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m'_1, m'_2} |m'_1, m'_2\rangle \langle m'_1, m'_2 | j, m \rangle$$

$$\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle = \sum_{m'_1, m'_2} \langle m'_1, m'_2 | j, m \rangle (J_{1\pm} |m'_1, m'_2\rangle + J_{2\pm} |m'_1, m'_2\rangle)$$

y metiendo un bra $\langle m_1, m_2 |$ se llega a la relación de recurrencia

$$\begin{aligned} \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle m_1, m_2 | j, m \pm 1 \rangle &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle m_1 \mp 1, m_2 | j, m \rangle + \\ &\quad \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle m_1, m_2 \mp 1 | j, m \rangle \end{aligned}$$

5.2.3 Suma de \mathbf{L} y \mathbf{S}

Sea suma \mathbf{L} y \mathbf{S} , entonces

$$j_1 = l \quad j_2 = S = 1/2 \quad m_1 = m_l \quad m_2 = m_s = \pm 1/2$$

$$|l - 1/2| \leq j \leq l + 1/2 \quad j = \begin{cases} l - 1/2 \\ l + 1/2 \end{cases}$$

$$m = m_l \pm 1/2 \quad m_l = m + 1/2, m - 1/2 \quad m_s = 1/2, -1/2$$

y luego $\dim = (2l + 1) \otimes 2 = 4l + 2$. Habrá sólo cuatro $C_{m_1 m_2}^j$ no nulos, que serán

$$\langle m + 1/2, -1/2 | l - 1/2, m \rangle$$

$$\langle m + 1/2, -1/2 | l + 1/2, m \rangle$$

$$\langle m - 1/2, 1/2 | l - 1/2, m \rangle$$

$$\langle m - 1/2, 1/2 | l + 1/2, m \rangle$$

donde vemos que los coeficientes linkean sólo los estados con $j = \ell - 1/2$ y $j = \ell + 1/2$ y podemos construir una matriz de 2×2 para este caso.

Esto tórnase práctico para acoplamiento spin-órbita

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} |l, s; j, m\rangle &= \frac{1}{2} (j(j+1)\hbar^2 - l(l+1)\hbar^2 - s(s+1/2)\hbar^2) |l, s; j, m\rangle \\ &= \frac{1}{2} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4) \hbar^2 |l, s; j, m\rangle \end{aligned}$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} |l, s; j, m\rangle = \begin{cases} \frac{l\hbar^2}{2} |l, s; j, m\rangle & \text{si } j = l + 1/2 \\ -\frac{(l+1)\hbar^2}{2} |l, s; j, m\rangle & \text{si } j = l - 1/2 \end{cases}$$

5.3 Operadores vectoriales

Queremos analizar como transforma un operador vectorial \hat{v} bajo rotaciones en mecánica cuántica. En mecánica clásica,

$$V_i = R_{ij} V_j \quad \text{con } R \text{ matriz diagonal}$$

En mecánica cuántica tenemos que al rotar

$$|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}(R) |\alpha\rangle$$

Podremos entonces que $\langle V \rangle$ transforme como un vector y eso lleva a que

$$\langle \alpha | V_i | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | \mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) | \alpha \rangle = R_{ij} \langle \alpha | V_j | \alpha \rangle$$

$$\mathcal{D}(R)^\dagger V_i \mathcal{D}(R) = R_{ij} V_j \quad ()$$

y calculando la expresión anterior (1) llegamos a que debe valer

$$[V_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijR} V_R$$

que es la manera de transformar de un operador vectorial. Podemos probar un caso simple de una rotación infinitesimal en \hat{z} y ver que vale.

5.4 Operadores tensoriales

En mecánica clásica

$$T_{ij} = R_{ii'} R_{jj'} T_{i'j'}$$

que es un tensor de rango dos. Esto es un tensor cartesiano. Su problema es que no es irreducible, entonces puede descomponerse en objetos que transforman diferente ante rotaciones. Sea la diada $U_i V_j$, tensor de rango dos, que puede escribirse como

$$UV = \frac{1}{3} \mathbf{U} \cdot \mathbf{V} \delta_{ij} + \frac{1}{2} (U_i V_j - U_j V_i) + \left[\frac{1}{2} (U_i V_j + U_j V_i) - \frac{1}{3} \mathbf{U} \cdot \mathbf{V} \delta_{ij} \right]$$

Hemos reducido el tensor cartesiano en tensores irreducibles. Podemos asociar esta descomposición con las multiplicidades de objetos con momento angular $\ell = 0, \ell = 1, \ell = 2$

escalar $\longrightarrow \ell = 0$ singlete (un elemento independiente)

vector $\longrightarrow \ell = 1$ triplete (tres elementos independientes)

tensor de traza nula $\longrightarrow \ell = 2$ quintuplete (cinco elementos independientes)

Se define

$$T_q^{(k)} \quad \text{tensor esférico de rango } k \text{ y número magnético } q$$

Un tensor esférico transforma como

$$\mathcal{D}(R) T_{q'}^{(k)} \mathcal{D}(R)^\dagger = \mathcal{D}(R) T_{q'}^{(k)} \quad (2)$$

Tendremos

$$T_0^{(0)} \quad (\text{escalar}) \text{ tensor esférico de rango } 0 \quad (\ell = 0)$$

$$(T_1^{(1)}, T_0^{(1)}, T_{-1}^{(1)}) \quad (\text{vector}) \text{ tensor esférico de rango } 1 \quad (\ell = 1)$$

En muchos casos se puede escribir un tensor esférico como armónico esférico

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = Y_\ell^m(\hat{n}) \xrightarrow{\text{paso}} \hat{n} \longrightarrow \vec{v} \quad Y_\ell^m(\vec{v}) \equiv Y_k^q(\vec{v}) = T_q^{(k)}$$

$$\hat{n} = (n_x, n_y, n_z) = \left(\frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r} \right) \longrightarrow \mathbf{v} = (rn_x, rn_y, rn_z)$$

$$\hat{n} = (\cos(\phi) \sin(\theta), \sin(\phi) \sin(\theta), \cos(\theta))$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} n_z \longrightarrow T_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} V_z$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{n_x \pm i n_y}{\sqrt{2}} \longrightarrow T_{\pm 1}^{(1)} = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{V_x \pm i V_y}{\sqrt{2}}$$

Calculando en (2), cosa que podemos hacer para, por ejemplo, una rotación infinitesimal, llegamos a las relaciones de conmutación para tensores.

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)} \quad [J_\pm, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp 1)(k \pm q + 1)} T_{q\pm 1}^{(k)}$$

Teorema de Wigner-Eckart

Es importante para el cálculo de transiciones evaluar elementos de matriz de operadores tensoriales. Los elementos matriciales de operadores tensoriales respecto de autoestados de momento satisfacen

$$\langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = \langle jk; mq | jk; j' m' \rangle \frac{\langle \alpha' j' | T^{(k)} | \alpha j \rangle}{(2j+1)}$$

un coeficiente que no depende de q, m, m' . El coeficiente que aparece primero es el coeficiente de Clebsh-Gordan de sumar momentos jk con $m_1 = m, m_2 = q, m + q = m'$.

La regla de selección se construye

$$\langle \alpha', j', m' | [J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = \langle | J_z T_q^{(k)} - T_q^{(k)} J_z - \hbar q T_q^{(k)} | \rangle$$

$$\langle \alpha', j', m' | 0 | \alpha, j, m \rangle = (\hbar m' - \hbar m - \hbar q) \langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle$$

$$0 = \hbar(m' - m - q) \langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle$$

$$\text{si } m' \neq m + q \longrightarrow \langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = 0$$

Una idea de la demostración del teorema

$$\langle \alpha', j', m' | [J_\pm, T_q^{(k)}] | \alpha, j, m \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j, m \rangle$$

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle \alpha', j', m' \pm 1 | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle - \\ & \sqrt{(j' \mp m')(j' \pm m' + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \pm 1 \rangle = \\ & \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j, m \rangle \end{aligned}$$

Es la misma relación de recurrencia que la de los coeficientes de Clebsh-Gordan, si reemplazamos

$$m' = m \quad j = j_1 \quad m = m_1 \quad j' = j \quad k = j_2 \quad q = m_2$$

Como ambas relaciones son lineales, sus resultados serán proporcionales. Se puede asociar

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 \pm 1 | j_1, j_2; j, m \rangle \propto \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j, m \rangle$$

$$\langle j_1, k; m, q \pm 1 | j, k; j', m' \rangle \propto \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j, m \rangle$$

Logramos la igualdad metiendo una constante independiente de m', q, m .

6.0.1 Reglas de selección

Como se tiene a $\langle | T_q^{(k)} | \rangle$ proporcional a los coeficientes de Clebsh-Gordan, serán válidas las mismas reglas de selección

$$m' = m + q \quad |j - k| \leq j' \leq j + k$$

6.1 Ejemplos de elementos matriciales de tensores

Sea un escalar (tensor de rango cero)

$$\langle \alpha' j' m' | T_0^{(0)} | \alpha j m \rangle \propto \langle j 0; m 0 | j 0; j' m' \rangle = \delta_{j' j} \delta_{m' m}$$

$$q = 0 \quad k = 0 \quad m + q = m' \rightarrow m = m'$$

$$|j - 0| \leq j' \leq j + 0 \rightarrow j = j'$$

No varían j, m en los estados No conecta estados con j, m diferentes un escalar.

Sea un vector (tensor de rango uno):

$$\langle \alpha' j' m' | T_q^{(1)} | \alpha j m \rangle \propto \langle j 1; m q | j 1; j' m' \rangle$$

$$q = 1, 0, -1 \quad k = 1 \quad m + \{1, 0, -1\} = m' \rightarrow m - m' = \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$$

$$|j - 1| \leq j' \leq j + 1 \quad -1 \leq j' - j \leq 1 \rightarrow j - j' = \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$$

Conecta estados que están separados por un j y un m .

6.1.1 Teorema de proyección

Consideremos lo que sucede en el teorema de Wigner-Eckart si $j = j'$ y se lo aplicamos a un operador vectorial $T_q^{(k=1)} \equiv V_q$

$$\langle \alpha' j m' | V_q | \alpha j m \rangle = \frac{\langle \alpha' j m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha j m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j m' | J_q | j m \rangle$$

Como caso especial, si $\alpha' = \alpha$ estoy en un subespacio donde coinciden los números cuánticos, se tiene

$$\mathbf{V} = \frac{\langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \mathbf{J}$$

6.1.2 Aplicación del teorema de proyección

Sea un H_0 esféricamente simétrico $[H_0, \mathbf{J}] = 0$, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ y $J^2 = (L+S)^2$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{r} \quad |E, \ell, s, j, m\rangle \quad 2j+1 \text{ degenerados}$$

que equivale a un CCOC : H, L^2, S^2, J^2, J_z donde cada autovalor dentro del ket es el que corresponde a estos operadores.

Si meto un campo B en \hat{z} tendré

$$H \equiv H_0 + H_1 = H_0 - \frac{\mu_B B}{\hbar} (L_z + 2S_z)$$

lo cual debería romper la degeneración.

$$L_z + 2S_z = \frac{\langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{L} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} J_z + 2 \frac{\langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{L} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} J_z$$

pero no puedo poner este nuevo operador, que mete el campo B, en el CCOC directamente, entonces uso teorema de proyección.

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{L} = L^2 + \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{S} = S^2 + \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

Entonces tengo todo expresado en función de J_z que sí forma parte de mi CCOC.

Capítulo 7

Simetrías en mecánica cuántica

En mecánica clásica tenemos el teorema de Noether

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{d}{dt} (p_i) = 0 \quad \rightarrow \quad \partial p_i = cte.$$

Y \mathcal{H}, \mathcal{L} no cambian con la transformación $q_i \rightarrow q_i + \delta q_i$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{d}{dt} (p_i) = 0 \quad \rightarrow \quad \partial p_i = cte.$$

En mecánica cuántica definiremos un operador unitario $\$$ asociado a traslación/rotación. Pensemos en una transformación infinitesimal dada por $\$$

$$\$ = \mathbb{1} - i \frac{\varepsilon}{\hbar} G \quad G \equiv \text{generador hermitico (de la transf.)}$$

Sea el H invariante frente a $\$,$ entonces

$$S^\dagger H S = H \quad \rightarrow \quad [H, \$] = 0 \quad \rightarrow \quad [H, G] = 0 \rightarrow \frac{dG}{dt} = 0 \rightarrow G \text{ es cte. de movimiento}$$

Esto significa que el autovalor no varía con el tiempo, Como $[H, G] = 0$ se tiene (si no hay degeneración)

$$G |n\rangle = k |n\rangle \quad \text{pués} \quad H(G |n\rangle) = E_n(k |n\rangle)$$

invariancia frente a traslaciones $G = \mathbf{p}$ e invariancia frente a rotaciones $G = \mathbf{J}$.

7.0.3 Simetría de paridad

Transforma un RHS en LHS. Es decir que hace

$$\mathbf{x} \longrightarrow -\mathbf{x}$$

y solicitaremos un operador unitario llamado paridad que verifique

$$|\alpha\rangle \longrightarrow \Pi |\alpha\rangle = |\alpha'\rangle$$

si Π es unitario y $\Pi^1 = \mathbb{1}$ entonces es hermítico. Queremos que refleje el $\langle \hat{x} \rangle$

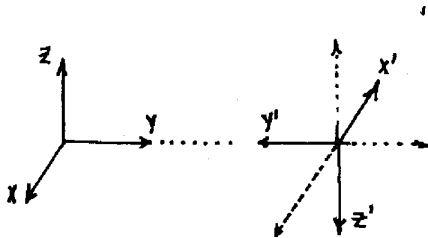


Figura 0.1

$$\langle \alpha' | \mathbf{x} | \alpha' \rangle = -\langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle$$

$$\langle \alpha | \Pi^\dagger \mathbf{x} \Pi | \alpha \rangle = -\langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle \rightarrow \Pi^\dagger \mathbf{x} \Pi = -\mathbf{x}$$

y entonces

$$\{\mathbf{x}, \Pi\} = 0,$$

anticonmuta con \mathbf{x} . Debido a ello

$$\Pi | \mathbf{x}' \rangle = | -\mathbf{x}' \rangle \quad \Pi^2 \equiv \mathbb{1}$$

lo cual dice que los autovalores son ± 1 y Π es unitario y hermítico. Como $\hat{\Pi}$ no depende del tiempo

$$\Pi^\dagger \mathbf{p} \Pi = \Pi^\dagger \frac{d\mathbf{x}}{dt} \Pi = \frac{d}{dt} (\Pi^\dagger \mathbf{p} \Pi) = \frac{d-\mathbf{x}}{dt} \rightarrow \{\mathbf{p}, \Pi\} = 0$$

y vemos que anticonmuta con \mathbf{p} . \mathbf{x} , \mathbf{p} son operadores impares. En cambio $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ es un operador par, entonces

$$[\mathbf{L}, \Pi] = 0 \quad [\mathbf{J}, \Pi] = 0$$

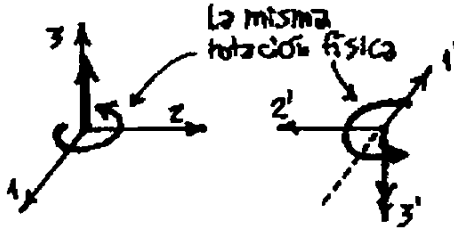


Figura 0.2

Que conmuta con \mathbf{J} puede verse de pedirle que

$$[\Pi, \mathcal{D}(R)] = 0 \longrightarrow [\Pi, \mathbf{J}] = 0,$$

cosa que vale en mecánica clásica, entonces

$$R^{(\text{paridad})} R^{(\text{rotación})} = R^{(\text{rotación})} R^{(\text{paridad})}$$

$$\Pi^\dagger \square \Pi = \begin{cases} +\square & \text{par} \quad \text{vector axial (pseudovector)} \\ -\square & \text{impar} \quad \text{vector polar} \end{cases}$$

$$\Pi^\dagger \square \Pi = \begin{cases} +\square & \text{par} \quad \text{escalar} \\ -\square & \text{impar} \quad \text{pseudoescalar} \end{cases}$$

$$\Pi^\dagger \mathbf{S} \cdot \mathbf{x} \Pi = \Pi^\dagger \mathbf{S} \Pi \cdot \Pi^\dagger \mathbf{x} \Pi = \mathbf{S} \cdot (-\mathbf{x}) = -\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}$$

y $\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}$ es un pseudoescalar.

7.0.4 Función de onda bajo paridad

$$\Psi_\alpha(x') = \langle x' | \alpha \rangle = \langle x' | \Pi | \alpha \rangle = \langle x' | \alpha' \rangle = \langle -x' | \alpha \rangle$$

y entonces la función de onda de un estado al que se le aplicó paridad será

$$\Psi_{\alpha'}(x') = \Psi_\alpha(-x')$$

Sea $|\alpha\rangle$ autoestado de paridad, entonces

$$\Pi |\alpha\rangle = \pm |\alpha\rangle$$

los autovalores serán ± 1

$$\langle x' | \alpha' \rangle = \pm \langle x' | \alpha \rangle = \langle -x' | \alpha \rangle$$

$$\Psi_{\alpha}(-x') = \begin{cases} +\Psi_{\alpha}(x') & \text{función de onda par} \\ -\Psi_{\alpha}(x') & \text{función de onda impar} \end{cases}$$

no toda función de onda tiene paridad bien definida.

$$\begin{aligned} \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x} &\rightarrow (r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \phi \rightarrow \phi + \pi) \\ \langle x' | \alpha, \ell, m \rangle &= R_{\alpha}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \rightarrow \text{con } \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x} \text{ será} \\ Y_{\ell}^m(\pi - \theta, \phi + \pi) &= (-1)^{\ell} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) \\ \Pi |\alpha, \ell, m \rangle &= (-1)^{\ell} |\alpha, \ell, m \rangle \end{aligned}$$

Como $[\mathbf{L}, \hat{\Pi}] = 0$ un autoestado de \mathbf{L} es autoestado de $\hat{\Pi}$.

7.0.5 Teorema

Sea $[H, \pi] = 0$ y $|n\rangle$ autoestados no degenerados de H

$\Rightarrow |n\rangle$ es autoestado de Π .

La demostración

$$\left(\frac{1}{2} \pm \frac{\Pi}{2}\right) |n\rangle = \frac{\Pi^2 \pm \Pi}{2} |n\rangle = \Pi \left(\frac{\pm 1 + \Pi}{2}\right) |n\rangle = \pm \Pi \frac{1 \pm \Pi}{2} |n\rangle$$

y entonces es autoestado de paridad con autovalor ± 1 .

$$H \frac{1}{2} (1 \pm \Pi) |n\rangle = \frac{1}{2} E_n |n\rangle \pm \frac{E_n}{2} \Pi |n\rangle = E_n \left[\left(\frac{1}{2} \pm \frac{\Pi}{2}\right) \right]$$

y es autoestado de H , de manera que

$$\left(\frac{1 \pm \Pi}{2}\right) |n\rangle = |n\rangle \Rightarrow |n\rangle \text{ es autoestado de paridad}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} |n\rangle \pm \frac{\Pi}{2} |n\rangle &= |n\rangle \\ \pm \frac{\Pi}{2} |n\rangle &= + \frac{|n\rangle}{2} \Rightarrow \Pi |n\rangle = \pm |n\rangle \end{aligned}$$

Un caso donde falla el teorema

$$[H, \Pi] = 0 \quad \text{con} \quad H = \frac{p^2}{2m}$$

pero $|p'\rangle$ no es autoestado de Π por la degeneración $|p'\rangle, |-p'\rangle$ son ambos correspondientes al autovalor $p'^2/2m$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} |p'\rangle = \frac{p'^2}{2m} |p'\rangle \quad \frac{\hat{p}^2}{2m} |-p'\rangle = \frac{p'^2}{2m} |-p'\rangle$$

$$\Pi |p'\rangle = |-p'\rangle$$

y $|p'\rangle$ no es autoestado de Π .

7.0.6 Reglas de selección de paridad Π

Sean $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ autoestados de paridad

$$\Pi |\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\alpha\rangle \quad \Pi |\beta\rangle = \varepsilon_\beta |\beta\rangle$$

siendo para el caso impar

$$\langle\beta|\square|\alpha\rangle = -\langle\beta|\Pi^\dagger\square\Pi|\alpha\rangle = -\varepsilon_\alpha\varepsilon_\beta\langle\beta|\square|\alpha\rangle,$$

y en el caso par

$$\langle\beta|\square|\alpha\rangle = \langle\beta|\Pi^\dagger\square\Pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha\varepsilon_\beta\langle\beta|\square|\alpha\rangle$$

Si el operador \square es impar (como \mathbf{x}, \mathbf{p}) entonces $\varepsilon_\alpha = 1, \varepsilon_\beta = -1$ o bien $\varepsilon_\alpha = -1, \varepsilon_\beta = 1$.

Si el operador \square es par (como \mathbf{L}, \mathbf{S}) entonces $\varepsilon_\alpha = 1, \varepsilon_\beta = 1$ o bien $\varepsilon_\alpha = -1, \varepsilon_\beta = -1$.

- Operadores impares solo conectan estados de paridad opuesta
- Operadores pares solo conectan estados de la misma paridad

$$\langle\beta|\mathbf{x}|\alpha\rangle = 0$$

entonces

$$\int \int dx' dx'' \langle\beta|x''\rangle \langle x''|\mathbf{x}|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = 0$$

y como es $\langle x''|\mathbf{x}|x'\rangle = x'\delta(x' - x'')$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle\beta|x'\rangle x' \langle x'|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \Psi_\beta^*(x') x' \Psi_\alpha(x')$$

7.1 Inversión temporal (reversión de movimiento)

En mecánica clásica sería *pasar la película hacia atrás*

$$t \longrightarrow -t$$

En sistemas sin fuerzas disipativas se tiene

$$m\ddot{x} = -\frac{d}{dx}V(x)$$

siendo $x(t)$ y $x(-t)$ soluciones de $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ pues si $t \rightarrow -t$ se tiene

$$m\ddot{x} = -\frac{d}{dx}V(x)$$

dado que

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = \frac{d^2x(-t)}{dt^2}$$

En mecánica cuántica tendremos

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V \right) \Psi(x, t)$$

y si hacemos el cambio $t \rightarrow -t$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, -t)}{\partial t} = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = - \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V \right) \Psi(x, t)$$

se ve que $\Psi(x, -t)$ no es solución de Schrödinger.

Pero notemos que $\Psi^*(x, -t)$ cumple la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*(x, -t)}{\partial t} = -i\hbar \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t}$$

Entonces necesitamos un operador que respete esta característica. Necesitaré el producto interno conjugado

$$\Psi_\alpha(x') = \langle x' | \alpha \rangle \quad \Psi_\alpha^*(x') = \langle x' | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | x' \rangle$$

El operador involucrado no será unitario

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \hat{\Theta} |\alpha\rangle \quad |\tilde{\beta}\rangle = \hat{\Theta} |\beta\rangle$$

Si $\hat{\Theta}$ unitario se conserva el producto interno

$$\langle \hat{\beta} | \hat{\alpha} \rangle = \langle \beta | \hat{\Theta}^\dagger \hat{\Theta} | \alpha \rangle = \langle \beta | \mathbb{1} | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle$$

Pediremos antiunitariedad y antilinealidad al operador $\hat{\Theta}$

$$\langle \hat{\beta} | \hat{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$$

$$\hat{\Theta}[C_\alpha |\alpha\rangle + C_\beta |\beta\rangle] = C_\alpha^* \hat{\Theta} |\alpha\rangle + C_\beta^* \hat{\Theta} |\beta\rangle$$

siendo lo primero la antiunitariedad y lo segunda la antilinealidad.

Todo operador antiunitario y antilineal puede escribirse como producto

$$\Theta = UK$$

donde U es unitario y K la conjugación compleja. K no cambia los autoestados, porque en base canónica un autoestado tiene un solo elemento (1) que no es nulo.

$$K(C|\alpha\rangle) = CK|\alpha\rangle = C^*K(\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle) = C^*(\sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*K|a'\rangle) = C^*(\sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*|a'\rangle)$$

Veamos que UK es antiunitario

$$|\hat{\alpha}\rangle = UK|\alpha\rangle = \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*U|a'\rangle \quad |\hat{\beta}\rangle = UK|\beta\rangle = \sum_{a''}\langle a''|\beta\rangle^*U|a''\rangle$$

$$\langle\hat{\beta}| = \sum_{a''}\langle a''|\beta\rangle\langle a''|U^\dagger$$

entonces

$$\langle\hat{\beta}|\hat{\alpha}\rangle = \sum_{a''}\langle a''|\beta\rangle\langle a''|U^\dagger\sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*U|a'\rangle$$

$$\sum_{a',a''}\langle a''|\beta\rangle\langle a'|\alpha\rangle^*\langle a''|U^\dagger U|a'\rangle = \sum_{a'}\langle a'|\beta\rangle\langle a'|\alpha\rangle^* = \sum_{a'}\langle\beta|a'\rangle^*\langle a'|\alpha\rangle^* = \langle\beta|\alpha\rangle^*$$

y entonces UK es antiunitario.

Notemos que no se define $\hat{\Theta}^\dagger$ actuando sobre bras. La demostración anterior esperó a quitarse de encima \hat{K} para hacer dual conjugado al $|\tilde{\beta}\rangle$.

7.1.1 Operadores ante $\hat{\Theta}$

Usaremos la notación

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \hat{\Theta}|\alpha\rangle$$

donde hay que tener en cuenta

$$\Theta^\dagger\Theta = \mathbb{1}$$

pues Θ^\dagger no está definido.

Sería razonable esperar que

$$\langle\hat{\alpha}|\mathbf{p}|\hat{\alpha}\rangle = -\langle\alpha|\mathbf{p}|\alpha\rangle \quad \langle\hat{\alpha}|\mathbf{x}|\hat{\alpha}\rangle = \langle\alpha|\mathbf{x}|\alpha\rangle$$

Sea $\hat{\mathbb{O}}$ un operador hermítico

$$\langle\alpha|\hat{\mathbb{O}}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\gamma\rangle$$

$$\langle \hat{\alpha} | \hat{\gamma} \rangle^* = \langle \alpha | \gamma \rangle \Rightarrow \langle \hat{\alpha} | \hat{\gamma} \rangle = \langle \gamma | \alpha \rangle$$

y como $\langle \hat{\alpha} | \Theta | \gamma \rangle = \langle \hat{\alpha} | \Theta 0 | \alpha \rangle$. Luego metemos un $\Theta^{-1} \Theta = 1$

$$\langle \hat{\alpha} | \Theta 0 \Theta^{-1} \Theta | \alpha \rangle = \langle \hat{\alpha} | \Theta 0 \Theta^{-1} | \hat{\alpha} \rangle = \langle \alpha | 0 | \alpha \rangle$$

Notamos que no se aplica Θ sobre bra alguno y tenemos Θ no unitario. Entonces requeriremos

$$\Theta \hat{p} \Theta^{-1} = -\hat{p} \quad \Theta \hat{j} \Theta^{-1} = -\hat{j}$$

$$\hat{\Theta} \hat{p} = -\hat{p} \hat{\Theta} \Rightarrow \{\hat{\Theta}, \hat{p}\} = 0$$

como para \mathbf{p}, \mathbf{J} operadores impares

$$\Theta \hat{x} \Theta^{-1} = \hat{x}$$

$$\hat{\Theta} \hat{x} = -\hat{x} \hat{\Theta} \Rightarrow [\hat{\Theta}, \hat{x}] = 0$$

y \mathbf{x} operador par.

Los operadores pares conmutan con Θ ,

$$\Theta |x'\rangle = |x'\rangle \quad \Theta |p'\rangle = |-p'\rangle$$

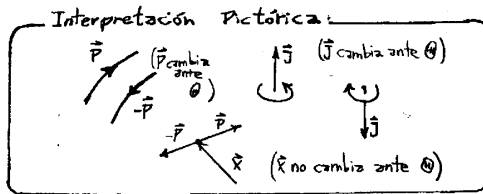


Figura 1.3

Hamiltoniano ante reversión de movimiento. Veamos la reversión de un sistema en estado $|\alpha\rangle$

$$|\alpha, t = \delta t\rangle = \left(\mathbb{1} - i \frac{\delta t}{\hbar} H \right) |\alpha\rangle$$

Si el hamiltoniano es invariante ante reversión temporal debería ser lo mismo

$$\underbrace{U \Theta}_{+\delta t} |\alpha\rangle = \underbrace{\Theta U}_{-\delta t} |\alpha\rangle$$

es decir que estamos pidiendo que se obtenga el mismo estado

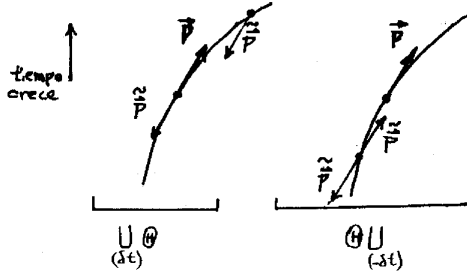


Figura 1.4

- Si revertimos el movimiento y evolucionamos δt .
- Si evolucionamos hacia atrás $-\delta t$ y revertimos el movimiento.

Veamos que vale lo anterior, pensando que si vale se tiene

$$\left(1 - i\frac{\delta t}{\hbar}H\right) \Theta |\alpha\rangle = \Theta \left(1 + i\frac{\delta t}{\hbar}H\right) |\alpha\rangle$$

$$-i\frac{\delta t}{\hbar}H\Theta |\alpha\rangle = \Theta i\frac{\delta t}{\hbar}H |\alpha\rangle$$

$$-iH\Theta |\alpha\rangle = \Theta(iH |\alpha\rangle)$$

$$[H, \Theta] = 0$$

Si Θ era unitario teníamos la relación de anticonmutación $\{H, \Theta\} = 0$ lo cual lleva a absurdos. Si $\{H, \Theta\} = 0$

$$\Theta^{-1} \frac{p^2}{2m} \Theta = -\frac{p^2}{2m} < 0 \text{ partícula libre con energía negativa } H \text{ debe ser par frente a } \Theta$$

7.1.2 Función de onda

Sea en $t = 0$ un sistema en el estado $|\alpha\rangle$

$$|\alpha\rangle = \int dx' \langle x' | \alpha \rangle |x'\rangle$$

$$\Theta |\alpha\rangle = \int dx' \langle x' | \alpha \rangle^* \Theta |x'\rangle = \int dx' \langle x' | \alpha \rangle^* |x'\rangle$$

$$\Psi_\alpha(x') \longrightarrow \Theta \longrightarrow \Psi_\alpha^*(x')$$

Esto era lo que *vimos* en la ecuación de Schrödinger.

7.1.3 Reversión de movimiento sobre J

$\Theta |\mathbf{J}\rangle$ no tiene sentido porque J_x, J_y, J_z no conmutan entre ellos. Analizaremos $|\ell, m\rangle$

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) \longrightarrow \Theta \longrightarrow Y_\ell^m(\theta, \phi)^* = Y_\ell^{-m}(\theta, \phi)(-1)^m$$

$$\Theta \ell, m \equiv (-1)^m \ell, -m$$

Lo que hace Θ es invertir la componente de \hat{z} y alterar la fase. Se ve que

$$\Theta^2 = \mathbb{1}$$

7.1.4 Reversión para sistemas de spin 1/2

Sea un estado general up de spin $|\hat{n}; +\rangle$, que se obtiene con dos rotaciones

$$\hat{S} \cdot \hat{n} |\hat{n}; +\rangle = \frac{\hbar}{2} |\hat{n}; +\rangle$$

entonces

$$e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} |+\rangle \equiv |\hat{n}; +\rangle$$

$$\Theta |\hat{n}; +\rangle = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} \eta |-\rangle$$

$$\Theta |\hat{n}; +\rangle = \eta |\hat{n}; -\rangle$$

pero

$$|\hat{n}; -\rangle = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} |+\rangle$$

dado que

$$e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_y} |+\rangle = |-\rangle$$

$$\Theta |\hat{n}; +\rangle = \eta e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_y} |+\rangle$$

$$\Theta = \eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_y} \text{ (Para sistemas de spin } 1/2)$$

donde

$$\Theta |+\rangle = \eta_+ |-\rangle \quad \Theta |-\rangle = \eta_- (-|+\rangle)$$

y como

$$\Theta^2 = -\mathbb{1}$$

$$\Theta^2(c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle) = \Theta(c_+^* \eta_+ |-\rangle + c_-^* \eta_- |+\rangle) = -c_+ \eta^* \eta |+\rangle - c_- \eta^* \eta |-\rangle = -(c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle)$$

luego

$$\Theta |j, m\rangle = i^{2m} |j, -m\rangle = (-1)^m |j, -m\rangle$$

para todo j entero o semientero.

7.1.5 Teorema

Sea H invariante ante Θ y los $|n\rangle$ no degenerados, entonces la autofunción de energía puede hacerse real tomando una fase apropiada.

Demostración

$$H\Theta |n\rangle = \Theta H |n\rangle = E_n \Theta |n\rangle \longrightarrow \Theta |n\rangle = \delta |n\rangle$$

$$\Psi_n = \langle \mathbf{x} | n \rangle \longrightarrow \Psi_{\tilde{n}} = \langle \mathbf{x} | \tilde{n} \rangle = \langle n | \mathbf{x} \rangle = \Psi_n(\mathbf{x})^*$$

y esto por ser antinunitario Θ

$$\Psi_{\tilde{n}} = \langle \mathbf{x} | \Theta | n \rangle = \delta \langle \mathbf{x} | n \rangle = \delta \Psi_n(\mathbf{x})$$

sea $\delta = 1$ entonces

$$\Psi_n^* = \Psi_n \longrightarrow \Psi_n(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$$

Si le aplico al sistema transformaciones dadas por operadores que conmutan con el H no lo sacamos del autoestado en que se encuentra con el paso del tiempo. En ese sistema solo será razonable medir variables representadas por esos operadores; puesto que de lo contrario estamos alterando el sistema y nos es imposible saber donde ha quedado.

Capítulo 8

Métodos perturbativos

Se basan en

$H = H_0 + \lambda V$ $\lambda \ll 1$ λ es un parámetro para controlar la perturbación

con $H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$ (el problema sin perturbar)

$$H |n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |n(\lambda)\rangle$$

que sería la solución exacta. Como esto es hartocomplicado podemos desarrollar en serie

$$\begin{aligned} E_n(\lambda) &\approx E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 \\ |n(\lambda)\rangle &\approx |0_n\rangle + \lambda |1_n\rangle + \lambda^2 |2_n\rangle \end{aligned}$$

siendo n autoestado correspondiente y (0), (1), (2) los órdenes del desarrollo perturbativo. Luego,

$$\begin{aligned} (H_0 + \lambda V) \left[\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |i_n\rangle \right] &= \left(\sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)} \right) \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |i_n\rangle \right) \\ \sum_{i=0}^{\infty} H_0 \lambda^i |i_n\rangle + \lambda V \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |i_n\rangle &= \sum_{i,j} \lambda^j E_n^j \lambda^i |i_n\rangle \end{aligned}$$

y aproximando los primeros términos

$$\begin{aligned} H_0 |0_n\rangle + H_0 \lambda |1_n\rangle + H_0 \lambda^2 |2_n\rangle + V \lambda |0_n\rangle + V \lambda^2 |1_n\rangle + \dots = \\ E_n^0 |0_n\rangle + E_n^0 \lambda |1_n\rangle + E_n^0 \lambda^2 |2_n\rangle + E_n^1 \lambda |0_n\rangle + E_n^1 \lambda^2 |1_n\rangle + E_n^1 \lambda^3 |2_n\rangle + E_n^2 \lambda^2 |0_n\rangle \end{aligned}$$

ahora igualamos orden a orden y resulta

$$\lambda^0 \dots H_0 |0_n\rangle = E_n^0 |0_n\rangle$$

$$\lambda^1 \dots H_0 |1_n\rangle + V |0_n\rangle = E_n^0 |1_n\rangle + E_n^1 |0_n\rangle$$

$$\lambda^2 \dots H_0 |2_n\rangle + V |1_n\rangle = E_n^0 |2_n\rangle + E_n^2 |0_n\rangle + E_n^1 |1_n\rangle$$

Pediremos una normalización a cada orden y considerando $\langle 0_n | n(\lambda) \rangle \in \mathbb{R}$

$$(\langle 0_n | + \lambda \langle 1_n | + \lambda^2 \langle 2_n |) (|0_n\rangle + \lambda |1_n\rangle + \lambda^2 |2_n\rangle) =$$

$$\begin{array}{r} \langle 0_n | 0_n \rangle + \lambda \langle 1_n | 0_n \rangle + \lambda^2 \langle 2_n | 0_n \rangle \\ \lambda \langle 0_n | 1_n \rangle + \lambda^2 \langle 1_n | 1_n \rangle + \lambda^3 \langle 2_n | 1_n \rangle \\ \lambda^2 \langle 0_n | 2_n \rangle + \lambda^3 \langle 1_n | 2_n \rangle + \lambda^4 \langle 2_n | 2_n \rangle \end{array}$$

$$\lambda^0 \quad \lambda^1$$

$$\lambda^2 \quad \lambda^3$$

$$\langle 0_n | 0_n \rangle = 1$$

$$\langle 0_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 0_n \rangle + \langle 0_n | 1_n \rangle = 1 \longrightarrow \langle 1_n | 0_n \rangle = -\langle 0_n | 1_n \rangle$$

$$\langle 0_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 0_n \rangle + \langle 0_n | 1_n \rangle + \langle 2_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 1_n \rangle + \langle 0_n | 2_n \rangle = 1$$

$$\dots \quad \dots \quad \dots$$

En un mismo autoestado (n) los órdenes diferentes (i) no son necesariamente ortogonales.

8.1 Resolución

A orden cero será

$$(H_0 - E_n^0) |0_n\rangle = 0 \quad \text{y se define} \quad |0_n\rangle \equiv |\varphi_n q\rangle$$

y $|0_n\rangle$ es dato porque es el estado no perturbado. A orden uno tenemos

$$\langle \varphi_n | H_0 - E_n^0 | 1_n \rangle + \langle \varphi_n | V - E_n^1 | 0_n \rangle = 0$$

$$E_n^1 = \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle$$

y la energía hasta orden uno es

$$E_n = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle$$

Veamos el autoestado a orden uno. Podemos poner (no hay degeneración)

$$|1_n\rangle = \sum_p (\langle \varphi_p | 1_n \rangle) |\varphi_p\rangle$$

y sea $p \neq n$

$$\langle \varphi_p | H_0 - E_n^0 | 1_n \rangle + \langle \varphi_p | V - E_n^1 | 0_n \rangle = 0$$

$$(E_p^0 - E_n^0) \langle \varphi_n | 1_n \rangle + \langle \varphi_p | V | 0_n \rangle = E_n^1 \langle \varphi_p | 0_n \rangle = 0$$

lo que significa que a un mismo orden (cero) diferentes autoestados son ortogonales.

$$\langle \varphi_p | 1_n \rangle = \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0}$$

Sea $p = n$ entonces

$$\langle \varphi_n | 1_n \rangle = \langle 0_n | 1_n \rangle = 0$$

ya lo vimos antes, en la normalización

$$|n(\lambda)\rangle = |0_n\rangle + \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p\rangle$$

autoestado hasta orden uno. A orden dos tenemos

$$(H_0 - E_n^0) |2_n\rangle + (V - E_n^1) |1_n\rangle - E_n^2 |0_n\rangle = 0$$

$$\langle \varphi_n | H_0 - E_n^0 | 2_n \rangle + \langle \varphi_n | V - E_n^1 | 1_n \rangle - \langle \varphi_n | E_n^2 | 0_n \rangle = 0$$

$$\langle \varphi_n | V | 1_n \rangle = E_n^2 \underbrace{\langle \varphi_n | 0_n \rangle}_{=1} + E_n^1 \underbrace{\langle \varphi_n | 1_n \rangle}_{=0}$$

$$E_n^2 = \langle \varphi_n | V | 1_n \rangle$$

$$E_n^2 = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_n | V | \varphi_p \rangle$$

$$E_n^2 = \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}$$

que es la energía a orden dos. Veamos el autoestado a orden dos

$$|2n\rangle = \sum_p (\langle \varphi_p | 2_n \rangle) |\varphi_p\rangle$$

sea $p \neq n$

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi_p | H_0 - E_n^0 | 2_n \rangle + \langle \varphi_p | V - E_n^1 | 1_n \rangle &= \langle \varphi_p | E_n^2 | 0_n \rangle \\
 (H_0 - E_n^0) \langle \varphi_p | 2_n \rangle + \langle \varphi_p | V | 1_n \rangle - E_n^1 \langle \varphi_p | 1_n \rangle &= E_n^2 \underbrace{\langle \varphi_p | 0_n \rangle}_{=0} \\
 \langle \varphi_p | 2_n \rangle &= \frac{E_n^1 \langle \varphi_p | 1_n \rangle}{E_p^0 - E_n^0} - \frac{\langle \varphi_p | V | 1_n \rangle}{E_p^0 - E_n^0} \\
 \sum_k \frac{\langle \varphi_n | V | 1_n \rangle}{E_p^0 - E_n^0} \langle \varphi_p | \varphi_q \rangle \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} + \frac{1}{E_n^0 - E_p^0} \left\langle \varphi_p \left| V \sum_k \frac{\langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \right| \varphi_k \right\rangle \\
 \langle \varphi_p | 2_n \rangle &= \frac{\langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle \langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{(E_p^0 - E_n^0)(E_n^0 - E_p^0)} + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle}{(E_n^0 - E_p^0)(E_n^0 - E_k^0)}
 \end{aligned}$$

Sea $p = n$

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\langle 0_n | 0_n \rangle}_{=1} + \underbrace{\langle 1_n | 0_n \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle 0_n | 1_n \rangle}_{=0} + \langle 2_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 1_n \rangle + \langle 0_n | 2_n \rangle &= 1 \\
 \langle 2_n | 0_n \rangle + \langle 0_n | 2_n \rangle &= -\langle 1_n | 1_n \rangle \\
 \langle 0_n | 2_n \rangle &= -\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle \\
 -\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle &= \sum_k -\frac{1}{2} \langle 1_n | 0_k \rangle \langle 0_k | 1_n \rangle \\
 -\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle &= -\frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_k^0)^2} = \langle 0_n | 2_n \rangle \\
 |2_n\rangle &= \sum_{p \neq n} -\frac{V_{nn} V_{pn}}{(E_p^0 - E_n^0)^2} |\varphi_p\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_{k \neq n} \frac{V_{pk} V_{kn}}{(E_n^0 - E_p^0)(E_n^0 - E_k^0)} |\varphi_p\rangle - \frac{1}{2} \sum_p \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^0 - E_k^0)^2} |\varphi_p\rangle
 \end{aligned}$$

y el autoestado hasta orden dos

$$|n(\lambda)\rangle = |0_n\rangle + \sum_{p \neq n} \frac{V_{pn}}{\Delta E_{np}^0} |2_n\rangle + |2_n\rangle$$

con la energía hasta orden dos

$$E_n = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_p^0)}$$

8.1.1 Caso degenerado

Sea que hay degeneración de orden g en el autoestado N (a orden cero)

$$H_0 |\varphi_n^k\rangle = E_N^0 |\varphi_N^k\rangle \quad k = 1, 2, \dots, g$$

Suponemos existe combinación lineal

$$|0_N^j\rangle = \sum_k a_k^j |\varphi_N^k\rangle$$

para escribir un estado degenerado en función de los otros.

$$\begin{aligned} (H_0 - E_N^0) |1_N^j\rangle + (V - E_N^{1j}) |0_N^j\rangle &= 0 \\ \underbrace{\langle 0_N^j | H_0 - E_N^0 | 1_N^j \rangle}_{=0} + \langle 0_N^j | V - E_N^{1j} | 0_N^j \rangle &= 0 \\ \sum_k \langle 0_N^j | (V - E_N^{1j}) a_k^j | \varphi_N^k \rangle &= 0 \\ \sum_k a_k^j \langle 0_N^j | V - E_N^{1j} | 0_N^j \rangle &= 0 \\ \sum_k a_k^j \langle 0_N^j | V | 0_N^j \rangle = \sum_k a_k^j \langle 0_N^j | E_N^{1j} | 0_N^j \rangle \\ \sum_k a_k^j \langle 0_N^j | V | 0_N^j \rangle = \sum_k a_k^j E_N^{1j} \delta_{ik} = a_k^j E_N^{1j} \end{aligned}$$

Esto último es una ecuación de autovalores y autovectores de la forma:

$$(\mathbb{V} - E_N^{1j} \mathbb{1}) \mathbf{a} = 0 \quad \det(\mathbb{V} - E_N^{1j} \mathbb{1}) = 0$$

nos dará los corrimientos de la energía a primer orden y los autoestados $|1_n^j\rangle$ serán los autovectores del problema.

8.2 Efecto Stark

Sea un átomo de H con $|n, \ell, m\rangle$ sin spin y con $n = 2$. Será

$$0 \leq \ell < n \quad -\ell \leq m \leq \ell \quad \ell = 0, 1 \quad m = -1, 0, 1$$

Tengo cuatro estados

$$\begin{cases} |200\rangle \\ |211\rangle \\ |210\rangle \\ |21-1\rangle \end{cases}$$

todos con la misma energía ϵ_2 . Metemos un campo eléctrico en \hat{z} y entonces $V = -ez|\mathbf{E}|$. Luego

$$\langle n\ell'm' | V | n\ell m \rangle = -e|\mathbf{E}| \langle n\ell'm' | z | n\ell m \rangle$$

\hat{z} es impar ante paridad y entonces vincula estados de paridad diferente, y entonces

$$\langle n\ell m | z | n\ell m \rangle = 0$$

$$\langle n\ell m' | z | n\ell m \rangle = 0$$

diagonal nula y con $m' \neq m$ a igual ℓ tiene la misma paridad

$$\Pi |2, \ell = 1, m\rangle = -|2, \ell = 1, m\rangle \quad \text{impares}$$

$$\Pi |2, \ell = 0, 0\rangle = |2, \ell = 0, 0\rangle \quad \text{par}$$

Solo hay un elemento no nulo correspondiente al producto par-impar. Se tendrá

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma|\mathbf{E}| \\ 0 & 0 & \gamma|\mathbf{E}| & 0 \end{pmatrix}$$

Puedo diagonalizar y obtengo

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma|\mathbf{E}| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma|\mathbf{E}| \end{pmatrix}$$

En este caso no se rompe la degeneración por completo.

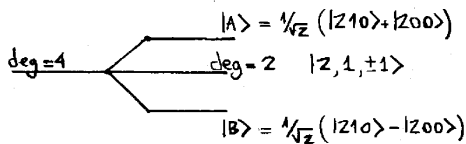


Figura 2.1

8.2.1 Corrimiento de la energía a orden 2 (con degeneración)

Sea que a orden uno se rompe toda la degeneración

$$(H_0 - E_N^0) |2_N^j\rangle + (V - E_N^{1j}) |1_N^j\rangle - E_N^{2j} |0_N^j\rangle = 0$$

Entonces la corrección a segundo orden de la energía será:

$$\langle 0_N^j | H_0 - E_N^0 | 2_N^j \rangle + \langle 0_N^j | V - E_N^{1j} | 1_N^j \rangle = E_N^{2j}$$

$$\langle 0_N^j | V | 1_N^j \rangle = E_N^{2j}$$

pues $\langle 0_N^j | 0_N^j \rangle = 0$ pero

$$|1_N^j\rangle = \sum_{k, i \neq 1} b_k^i |\varphi_k^i\rangle + \sum_i b_N^i |\varphi_N^i\rangle$$

$$\langle 0_N^j | 1_N^j \rangle = 0 = \sum_{k, i \neq 1} b_k^i \langle 0_N^j | 0_K^i \rangle + \sum_i b_N^i \langle 0_N^j | 0_N^i \rangle$$

falta desarrollo ... [info en mis originaales]

$$E_N^{2j} = \sum_{p \neq N} \frac{|\langle 0_N^j | V | 0_p^i \rangle|^2}{E_N^0 - E_p^0}$$

donde N es un estado degenerado y la suma es entre los i posibles.

8.3 Estructura fina del átomo de hidrógeno

La solución tradicional del átomo de H usa el potencial coulombiano. Esto desemboca en las funciones $|n, \ell, m\rangle$, sin embargo la introducción de ajuste como *perturbaciones* rompe algo la degeneración.

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad E_n = -\frac{\alpha^2 m_e^2 c^2}{2n^2} \quad a_0 = \hbar^2 / (m_e c^2)$$

$$v/c = p/(mc) = \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx 1/137$$

donde a_0 es el radio de Bohr, α es la constante de estructura fina. Tenemos a) Corrección cinemática (relativista)

$$E = c\sqrt{p^2 + m_e^2 c^2} = m_e c^2 \sqrt{1 + p^2 / (m_e^2 c^2)} \approx m_e c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_e^2 c^2} + \frac{3}{8} \frac{p^4}{m_e^4 c^4} \right)$$

$$E \approx m_e c^2 + \frac{p^2}{2m_e} + \frac{3p^4}{8m_e^3 c^2}$$

y esta corrección va como $W_{mv}/H_0 \sim \alpha^2$.

b) Acoplamiento espín-órbita Se puede pensar considerando un e^- en reposo con un protón orbitando que genera un \mathbf{B}_{eff}

$$W_{so} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{R^3} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_{eff}$$

y la corrección va como $W_{mv}/H_0 \approx \alpha^2$.

c) Término de Darwin o de contacto

$$W_D = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla^2 V(r)$$

que va como $W_D/H_0 \approx \alpha^2$.

Hay otras correcciones hiperfinas que provienen del espín del electrón y del espín del protón. Pero van como $\alpha^2/2000$. Si consideramos el sistema con

$$n = 2 \quad \ell = 0, 1 \quad m_\ell = 1, 0, -1 \quad m_s = 1/2, -1/2$$

serán ocho estados $\langle n, \ell, m_\ell, m_s \rangle$ (base completa).

$$W = \underbrace{W_{mv}}_{\sim p^4} + \underbrace{W_{so}}_{\sim \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}} + \underbrace{W_D}_{\sim |\mathbf{r}|}$$

y W es par ante Π y sólo habrá elementos de matriz $\neq 0$ que sean de la misma paridad.

$$\begin{array}{cc} 2s & 2p \\ 2s \left(\begin{array}{c} [2 \times 2] \\ [6 \times 6] \end{array} \right) & 2p \end{array}$$

$|2s\rangle$ es par ($\ell = 0$) y $|2p\rangle$ es impar ($\ell = 1$) y entonces $|2s\rangle, |2p\rangle$ no están conectados.

De manera que hay ocho estados $|n = 2, \ell, m_\ell, s, m_s\rangle$ que al calcular esta perturbación W resultan

El cálculo para las correcciones hiperfinas no condice la experiencia. Se necesita aquí mecánica cuántica relativista. Los dos primeros niveles tienen la misma ΔE porque en MCR se ve que

$$E = E(n, j)$$

es decir que no depende directamente de ℓ, s .

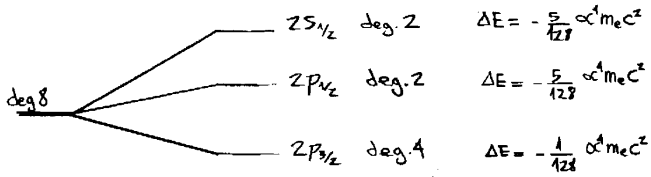


Figura 3.2

Un sketch de los métodos perturbativos

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & & & & & \\ & E_2 & & & & \\ & & E & & & \\ & & & E & & \\ & & & & \dots & \\ & & & & & E \\ & & & & & & E_3 \\ & & & & & & & E_4 \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} & & & & & \\ & & V_3 & & & \\ & & & V_4 & & \\ & & & & \dots & \\ & & & & & V_{nn} \end{pmatrix}$$

En H tenemos un bloque de energías degeneradas y se diagonalizará el bloque correspondiente en la matriz del potencial perturbativo V .

Partículas idénticas

Más apropiado sería partículas indistinguibles. Si en algún punto del espacio se solapan las funciones de onda (interfieren) de dos partículas del mismo tipo cosa de que tengan misma masa, carga, etc. (dos electrones por ejemplo) no podemos distinguir cual es cual. Sean dos estados $|k'\rangle, |k''\rangle$ con $k^{(i)}$ índice colectivo. En la zona de interferencia es

$$|k'\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2 \quad \text{o} \quad |k''\rangle_1 \otimes |k''\rangle_2$$

donde ambos estados son ortogonales y los subíndices numéricos identifican a la partícula.

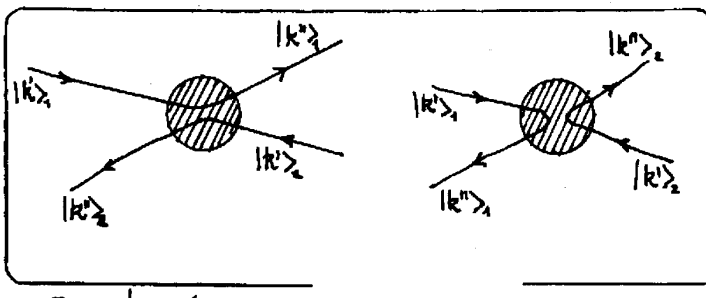


Figura 0.1

Entonces un estado general será

$$|K\rangle = c_1 |k'\rangle_1 \otimes |k''\rangle_2 + c_2 |k''\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2$$

con $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Esta es la “degeneración de intercambio”.

9.0.1 Permutación

Definimos este operador como

$$P_{12}(|k'\rangle_1 \otimes |k''\rangle_2) = |k''\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2$$

$$P_{12} = P_{21} \quad P_{12}^2 = \mathbb{1} \quad P_{12}^\dagger = P_{12} \quad P_{12}P_{12}^\dagger = 1 \quad \text{autovalores: } \pm 1$$

Su función es la de intercambiar etiquetas, no el orden de las partículas. Sean operadores \hat{A}_1, \hat{A}_2 que actúan sobre las partículas 1,2; es decir

$$\hat{A}_1 \equiv \hat{A}_1 \otimes \mathbb{1}_2, \quad \hat{A}_2 \equiv \mathbb{1}_1 \otimes \hat{A}_2$$

$$\hat{A}_1 |a'\rangle |a''\rangle = a' |a'\rangle |a''\rangle \quad \hat{A}_2 |a'\rangle |a''\rangle = a'' |a'\rangle |a''\rangle$$

$$\begin{aligned} P_{12} \hat{A}_1 P_{12}^{-1} P_{12} |a'\rangle |a''\rangle &= P_{12} a' |a'\rangle_1 |a''\rangle_2 = a' |a''\rangle_1 |a'\rangle_2 \\ &= P_{12} \hat{A}_1 P_{12}^{-1} |a''\rangle_1 |a'\rangle_2 = a' |a''\rangle_1 |a'\rangle_2 \\ &= \hat{A}_2 |a''\rangle_1 |a'\rangle_2 = a' |a''\rangle_1 |a'\rangle_2 \end{aligned}$$

y

$$P_{12} \hat{A}_1 P_{12}^{-1} = \hat{A}_2, \quad P_{21} \hat{A}_1 - \hat{A}_2 P_{12} = 0$$

Luego \hat{A} es simétrico si $[\hat{P}_{12}, \hat{A}_{12}] = 0$. Sea $[\hat{P}_{12}, \hat{H}] = 0$ entonces es P_{12} constante de movimiento y

$$P_{12} |\alpha\rangle = \pm |\alpha\rangle$$

Sea

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + v(|x_1 - x_2|) + V_e(\mathbf{x}_1) + V_e(\mathbf{x}_2)$$

donde si las partículas son idénticas es $m_1 = m_2 \equiv m$ y defino dos estados

$$|k'k''\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 + |k''\rangle_1 |k'\rangle_2) \quad |k'k''\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 - |k''\rangle_1 |k'\rangle_2)$$

con

$$P_{12} | \rangle_s = + | \rangle_s \quad P_{12} | \rangle_a = - | \rangle_a$$

Puedo introducir operadores de simetrización y antisimetrización

$$\hat{S}_{12} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} + \hat{P}_{12})$$

$$\hat{A}_{12} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} - \hat{P}_{12})$$

que verifican

$$S^2 = S, \quad A^2 = A, \quad SA = AS = 0, \quad [S, A] = 0$$

$$\hat{S}_{12}(c_1 |k'\rangle |k''\rangle + c_2 |k''\rangle |k'\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 + c_2)(|k'\rangle |k''\rangle + |k''\rangle |k'\rangle)$$

es simétrico y

$$\hat{A}_{12}(c_1 |k'\rangle |k''\rangle + c_2 |k''\rangle |k'\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 - c_2)(|k'\rangle |k''\rangle - |k''\rangle |k'\rangle)$$

es antisimétrico. En general se complica bastante con más de dos partículas

$$P_{ij}(|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 \dots |k^i\rangle_i \dots |k^j\rangle_j \dots) = (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 \dots |k^j\rangle_i \dots |k^i\rangle_j \dots)$$

pués tenemos

$$[P_{ij}, P_{k\ell}] \neq 0 \quad \text{en general}$$

Las permutaciones para tres partículas pueden descomponerse

$$P_{123} = P_{12}P_{13}$$

$$P_{123}|k'\rangle |k''\rangle |k'''\rangle = P_{12}|k'''\rangle |k''\rangle |k'\rangle = |k''\rangle |k'''\rangle |k'\rangle$$

Con tres partículas hay 3! estados; uno totalmente simétrico $|\rangle_s$, uno totalmente antisimétrico $|\rangle_a$ y cuatro sin simetría definida. En estados simétricos serán

$$\begin{aligned} |k'k''k'''\rangle_{s/a} = \frac{1}{\sqrt{6}} (&|k'k''k'''\rangle + |k''k'''\rangle + |k'''\rangle \\ &\pm |k''k'k'''\rangle \pm |k'k'''\rangle \pm |k'''\rangle) \end{aligned}$$

donde el $|\rangle_a$ tiene el signo $(-)$ en las permutaciones anticíclicas y el $(+)$ en las cíclicas. Existe un determinante de Slater como método mnemotécnico de obtener los estados $|\rangle_a$.

$$|\Psi\rangle_a = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} |k'\rangle & |k''\rangle & |k'''\rangle \\ |k'\rangle & |k''\rangle & |k'''\rangle \\ |k'\rangle & |k''\rangle & |k'''\rangle \end{vmatrix}$$

La obtención de estos estados corresponde a aplicar

$$A_{123} = \frac{1}{\sqrt{3!}} (\mathbb{1} + P_{231} + P_{312} - P_{212} - P_{132} - P_{321})$$

$$(\mathbb{1} + P_{23}P_{21} + P_{31}P_{32} - P_{21}P_{23} - P_{13}P_{12} - P_{32}P_{31})$$

Si dos $k^{(i)}$ coinciden ya no hay estado antisimétrico posible.

9.1 Postulado de simetrización

Permitirá romper la degeneración de intercambio. Postulamos que toda partícula es de uno de dos tipos de acuerdo a su simetría

Sistemas de N part. idénticas	N	simetrica	BE	entero
	N	antisimetrica	FD	semientero

En la naturaleza no ocurren simetrías mixtas.

9.1.1 Principio de exclusión de Pauli

Para fermiones supongamos sistema de dos partículas idénticas

$$|\Psi\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 - |k''\rangle_1 |k'\rangle_2)$$

y entonces si $k' = k''$ se tiene que

$$|\Psi\rangle_a = 0.$$

No es posible tener dos fermiones con iguales números cuánticos. Por el contrario los bosones sí pueden tener iguales números cuánticos.

9.1.2 Sistema de dos electrones de spin 1/2

Sistema de dos electrones de spin 1/2. Son fermiones. Sea que $[H, S] = 0$ con $S = S_1 + S_2$. Se tendrá

$$|\Psi\rangle^{sist} = |\Psi\rangle^{spa} \otimes |\Psi\rangle^{spin}$$

Como $|\Psi\rangle^{sist}$ es simétrica tendremos

$$P_{12} |\Psi\rangle^{sist} = -|\Psi\rangle^{sist}$$

$$P_{12} |\Psi\rangle^{sist} = P_{12} |\Psi\rangle^{spa} \otimes P_{12} |\Psi\rangle^{spin}$$

Para dos electrones con spin 1/2 se tiene $j_1 + j_2$ entonces $0 \leq j \leq 1$ de modo que $|m_1| \leq j_1$ y $|m_2| \leq j_2$ entonces $0 \leq S \leq 1$ y $|m_{s_1}| \leq s_1$ y $|m_{s_2}| \leq s_1$.

$$\left. \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \end{array} \right\} \text{triplete } s = 1 \quad \text{Estados simétricos}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)\} \text{ singlete } s = 0 \quad \text{Estados antisimétricos}$$

Entonces

$$\begin{aligned} s = 0 & \Rightarrow |\Psi\rangle^{spa} \text{ es simétrica} \\ s = 1 & \Rightarrow |\Psi\rangle^{spa} \text{ es antisimétrica} \end{aligned}$$

Vistos desde el CM de los electrones

$$P_{12} = \Pi$$

y entonces

$$P_{12} |n\ell m\rangle = (-1)^\ell |n\ell m\rangle$$

$$\ell \text{ par} \rightarrow |\Psi\rangle^{spa} = P_{12} |\Psi\rangle^{spa} \quad \ell \text{ impar} \rightarrow -|\Psi\rangle^{spa} = P_{12} |\Psi\rangle^{spa}$$

Necesitaré ℓ par con $s = 0$ entonces $\ell + s = j$ par. En cambio, si ℓ impar con $s = 1$ entonces $\ell + s = j$ par. Dos electrones sólo se acoplan a momento total j par.

Sean los siguientes estados

$$|\Psi\rangle_{sa} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle |k''\rangle \pm |k''\rangle |k'\rangle)$$

$$|\Psi_F\rangle_{sa} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a'\rangle |a''\rangle \pm |a''\rangle |a'\rangle)$$

y la probabilidad será

$$\begin{aligned} \text{Prob} &= |{}_{sa}\langle\Psi|\Psi\rangle_{sa}|^2 = \left| \frac{1}{2} ({}_1\langle a' |_2\langle a'' | \pm {}_1\langle a'' |_2\langle a' |)(|k'\rangle_1|k''\rangle_2 \pm |k''\rangle_1|k'\rangle_2) \right|^2 = \\ &= \frac{1}{4} |\langle a' | \langle a'' | |k'\rangle |k''\rangle \pm \langle a'' | \langle a' | |k'\rangle |k''\rangle \pm \langle a' | \langle a'' | |k''\rangle |k'\rangle \pm \langle a'' | \langle a' | |k''\rangle_1 |k'\rangle_1|^2 \\ &= \frac{1}{4} |2 \langle a' | k'\rangle \langle a'' | k''\rangle \pm 2 \langle a'' | k'\rangle \langle a' | k''\rangle|^2 \\ &= \left| \underbrace{\langle a' | k'\rangle \langle a'' | k''\rangle}_{\text{término directo}} \pm \underbrace{\langle a'' | k'\rangle \langle a' | k''\rangle}_{\text{término de intercambio}} \right|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Prob} &= |{}_{sa}\langle\Psi|\Psi\rangle_{sa}|^2 = |\langle a' | k'\rangle \langle a'' | k''\rangle|^2 + |\langle a'' | k'\rangle \langle a' | k''\rangle|^2 \\ &\quad \pm 2 \mathcal{R}e \left(\underbrace{\langle a' | k'\rangle \langle a' | k''\rangle^* \langle a'' | k''\rangle \langle a'' | k'\rangle^*}_{\text{Interferencia}} \right) \end{aligned}$$

Vemos que aparece una interferencia que será importante solamente si hay solapamiento. En el caso de no solaparse o con partículas clásicas solo el primer término es de importancia.

9.2 El átomo de helio

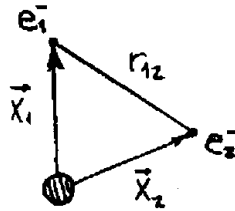


Figura 2.2

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

y si el último término es ~ 0 decimos que en ese caso H está desacoplado

$$\Psi = \Psi_1 \otimes \Psi_2$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{S}] = 0 \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

S es constante de movimiento y para la $|\psi_{spin}\rangle$ se tiene

$$S = 0 \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad \text{singlete}$$

$$S = 1 \quad \begin{aligned} &|\uparrow\uparrow\rangle \\ &|\downarrow\downarrow\rangle \\ &\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned} \quad \text{triplete}$$

Sea $e_1^- |100\rangle$ y $e_2^- |n\ell m\rangle$

$$|\Psi\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle |n\ell m\rangle \pm |n\ell m\rangle |100\rangle) |\Psi_{spin}\rangle$$

de modo que con $S = 0$ será

$$|\Psi\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle |n\ell m\rangle + |n\ell m\rangle |100\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

y en cambio con $S = 1$

$$|\Psi\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle |n\ell m\rangle - |n\ell m\rangle |100\rangle) \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \end{cases}$$

Podemos pensar en teoría de perturbaciones ahora y calcular

$$E_{He} = E_{100} + E_{n\ell m} + \Delta E$$

donde

$$\Delta E = \left\langle \Psi \left| \frac{e}{r_{12}} \right| \Psi \right\rangle$$

y el término en el *sandwich* lo considero una perturbación.

$$\Delta E = \langle \Psi^{spin} |^{\dagger} \frac{1}{2} (\langle 100 | \langle n\ell m | \pm \langle n\ell m | \langle 100 |) \frac{e}{r_{12}} (|100\rangle |n\ell m\rangle \pm |n\ell m\rangle |100\rangle) | \Psi^{spin} \rangle$$

$$\Delta E = \langle 100 | \langle n\ell m | \frac{e}{r_{12}} | 100 \rangle | n\ell m \rangle \pm \langle n\ell m | \langle 100 | \frac{e}{r_{12}} | 100 \rangle | n\ell m \rangle$$

que se puede escribir más resumidamente como

$$\Delta E = I \pm J$$

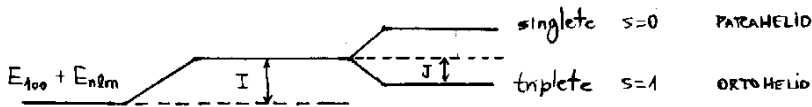


Figura 2.3

Esta separación de los niveles en $\pm J$ se debe al carácter de fermión de las partículas.

Picture de interacción y perturbación dependiente del tiempo

Puédense escribir perturbaciones dependientes del tiempo

$$H = H_0 + V(t)$$

con $|n\rangle$ no dependiente del tiempo. Se estudiarán transiciones entre autoestados del H_0 (que son estacionarios). Un autoestado permanece en el tiempo como tal pero con fase oscilante

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0, t\rangle_s &= e^{-iH/\hbar(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle_s \\ &= e^{-iH/\hbar(t-t_0)} e^{-iV(t)/\hbar(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_n e^{-iH_0/\hbar t} e^{-iV(t)/\hbar t} |n\rangle \langle n | \alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_n e^{-iE_n^0/\hbar t} |n\rangle e^{-iV(t)/\hbar t} \langle n | \alpha, t_0\rangle \\ e^{iH_0/\hbar t} |\alpha, t_0, t\rangle_s &= \sum_n \underbrace{e^{-iV(t)/\hbar t} \langle n | \alpha, t_0\rangle |n\rangle}_{C_n(t)} = |\alpha, t_0, t\rangle_I \end{aligned}$$

es decir

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0/\hbar t} |\alpha, t_0, t\rangle_s$$

Aquí se puede pensar que

- $C_n(t)$ evoluciona por $V(t)$

- $e^{-iE_n^0 t/\hbar}$ evoluciona por H_0

Esto introduce la *picture* de interacción de Dirac; en la cual los estados evolucionan con $V(t)$.

	Dirac	Schrödinger	Heisenberg
estados $ \alpha\rangle$	evolucionan con $V(t)$	evolucionan con H	fijos
operadores	evolucionan con H_0	fijos	evolucionan con H
base $ a'\rangle$	fijos	fijos	evolucionan

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_s = H |\alpha, t_0, t\rangle_s$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I \right) = H e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$i\hbar e^{-iH_0 t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V(t) e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V(t) |\alpha, t_0, t\rangle_I,$$

que es la ecuación de evolución de los kets. Pediremos asimismo que

$${}_s \langle A_s \rangle_s = {}_I \langle A_I \rangle_I$$

$${}_I \langle \alpha, t_0, t | A_I | \alpha, t_0, t \rangle_I = {}_s \langle \alpha, t_0, t | e^{-iH_0 t/\hbar} A_I e^{iH_0 t/\hbar} | \alpha, t_0, t \rangle_s = {}_s \langle \alpha, t_0, t | A_s | \alpha, t_0, t \rangle_s =$$

Y los operadores evolucionan según

$$A_I = e^{iH_0 t/\hbar} A_s e^{-iH_0 t/\hbar}$$

$$\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_I, H_0]$$

que es igual que la ecuación de Heisenberg pero con \hat{H}_0 en lugar de H . Los kets base permanecen fijos, porque así lo hacen en Schrödinger, en realidad oscila su fase; entonces

$$|n, t_0, t\rangle_s = e^{-iHt/\hbar} |n, t_0\rangle_s$$

$$|n, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} |n, t_0\rangle_s = e^{-iVt/\hbar} |n, t_0\rangle_s = e^{iH_0 t/\hbar} |n, t_0\rangle_s$$

$$|n, t_0, t\rangle_I = e^{iE_0 t/\hbar} |n, t_0, t\rangle_s$$

10.0.1 Evolución de los coeficientes

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = \sum_n |n\rangle \langle n | \alpha, t_0, t\rangle_I = \sum_n C_n(t) |n\rangle$$

$$C_n(t) = e^{iVt/\hbar} \langle n | \alpha, t_0 \rangle_s$$

$$\langle n | \alpha, t_0, t \rangle_I = C_n(t)$$

con $|n\rangle, |m\rangle$ autoestados de H_0 , le pego un $\langle n |$ a la ecuación de evolución de kets,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \alpha, t_0, t \rangle_I = \langle n | V_I(t) | \alpha, t_0, t \rangle_I$$

$$= \sum_m \langle n | V_I(t) | m \rangle \langle m | \alpha, t_0, t \rangle_I$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) = \sum_m C_m(t) \langle n | V_I(t) | m \rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) = \sum_m C_m(t) \langle n | V_s | m \rangle e^{it(E_n - E_m)/\hbar}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) = \sum_m C_m(t) V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t}$$

donde $V_{nm}(t) \equiv \langle n | V(t) | m \rangle$ y $\omega_{nm} \equiv (E_n - E_m)/\hbar$. Esta es la ecuación que cumplen los coeficientes, donde $|C_n(t)|^2$ es la probabilidad de hallar al sistema en el autoestado $|n\rangle$. Es decir

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \dots \\ \dot{c}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} e^{i\omega_{12}} & \dots \\ V_{21} e^{i\omega_{21}} & V_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_N \end{pmatrix}$$

que puede ser de difícil solución.

10.0.2 Método perturbativo (dependiente del tiempo)

Pensaremos en una serie perturbativa

$$C_n(t) = C_n(t)^{(0)} + C_n(t)^{(1)} + C_n(t)^{(2)} + \dots$$

El evolucionador temporal en la picture de interacción cumple

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_I$$

que viene de

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0)$$

con $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ la cual resolviendo nos hace llegar a

$$U_I(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt'$$

y esto lleva a la serie de Dyson:

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t V_I(t') \int_{t_0}^{t'} V_I(t'') dt'' + \dots \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt''' \dots \int_{t_0}^{t^{n-1}} dt^n V_I(t') V_I(t'') \dots V_I(t^n) \end{aligned}$$

10.0.3 Transiciones entre autoestados del hamiltoniano H_0

$$|i, t_0 = 0, t\rangle_I = U_I(t, 0) |i\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | U_I(t) | i\rangle$$

y como se viera oportunamente

$$|i, t\rangle_I = \sum_n C_n(t) |n\rangle = \sum_n (\langle n | U_I(t) | i\rangle) |n\rangle$$

La amplitud de transición será

$$C_n(t) = \langle n | U_I(t) | i\rangle$$

con $|i\rangle, |n\rangle$ autoestados de H_0 . Sea $\tilde{C}_n(t) = \langle n | U_S(t) | i\rangle$ y busquemos una expresión

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0, t\rangle_I &= e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_S \\ &= e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_S \end{aligned}$$

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\alpha, t_0\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_I$$

$$e^{iH_0 t/\hbar} \hat{U}_S e^{-iH_0 t_0/\hbar} = \hat{U}_I$$

y notemos que \hat{U} no obedece la ley de transformación de operadores.

$$C_n(t) = \langle n | e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar} | i\rangle$$

$$C_n(t) = e^{-i/\hbar[E_n^{(0)}t - E_i^{(0)}t_0]} \langle n | U_S(t, t_0) | i \rangle = e^{-i/\hbar[E_n^{(0)}t - E_i^{(0)}t_0]} \tilde{C}_n(t) \\ \Rightarrow |C_n(t)|^2 = |\tilde{C}_n(t)|^2.$$

Para transiciones entre autoestados de H_0 los coeficientes dan la misma probabilidad (evaluados con el evolucionador de Dirac que con el de Schrödinger). Vamos a las transiciones a los tres

- orden 0

$$C_n^{(0)}(t) = \langle n | 1 | i \rangle = \delta_{ni}$$

- orden 1

$$C_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}} V_{ni}(t') dt' \quad V_{ni} \equiv \langle n | V(t) | i \rangle$$

- orden 2

$$C_n^{(2)}(t) = \sum_m \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{it'/\hbar(E_n - E_m)} V_{nm}(t') e^{it''/\hbar(E_m - E_i)} V_{mi}(t'')$$

y entonces la probabilidad de ir desde $|ket i\rangle \rightarrow |i\rangle$, hasta orden dos, sería

$$P_{i \rightarrow n}^{(2)} = |C_n^{(0)}(t) + C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t)|^2$$

10.0.4 Ejemplo: potencial constante encendido abruptamente

Notemos que $V \neq V(t)$. Dependerá de cualquier otra cosa.

$$C_n^0(t) = 0$$

$$C_n^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i/\hbar(E_n - E_i)t'} V_{ni} dt' = \frac{V_{ni}}{(E_n - E_i)} (1 - e^{i\omega_{ni}t})$$

$$|C_n^1(t)|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left(\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right)$$

Es máxima la probabilidad cuando $\Delta E \rightarrow 0$. En ese caso las transiciones son a estados de la misma energía. A tiempo largo la probabilidad es no nula para aquellos estados

$$t \sim \frac{2\pi}{|\omega_{ni}|}$$

Hay probabilidad de transición $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ apreciable con $\Delta E \sim 0$.

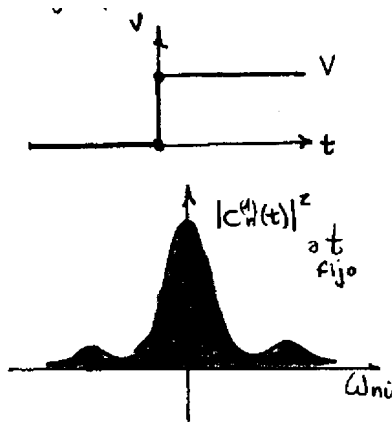


Figura 0.1

10.1 Scattering: orden 1

Este último ejemplo puede aplicarse a colisiones elásticas. Prendemos y apagamos un potencial que es el masacote al cual impactamos. De entrada ha partículas libres y de salida (lejos de V) partículas libres. Entonces $E_n - E_c \sim 0$ y consideraremos lo que sucede a tiempos largos. Interesará la probabilidad total de transicionar a estados de energía similares a E_i . Por ello se considera

$$\sum_{E_n \sim E_i} |C_n^1(t)|^2 \rightarrow \int dE_n \rho(E_n) |C_n^1(t)|^2$$

donde el integrando es el número de estados dentro de un intervalo de energías $(E, E + dE)$. En tiempos muy largos la expresión [1] tiende a una delta de Dirac

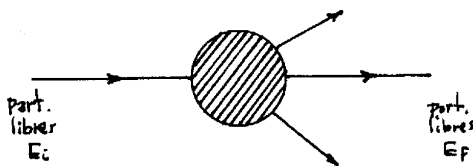


Figura 1.2

y se integra fácil,

$$\lim \int dE \rho(E_n) |C_n^1(t)|^2 = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |\bar{V}_{ni}|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_n \sim E_i}$$

La probabilidad de transición es proporcional a t . Se suele definir una tasa de transición (probabilidad de transición por unidad de tiempo)

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{E_n \sim E_i} |C_n^{(1)}|^2 \right) = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |\bar{V}_{ni}|^2 \rho(E_n) = \omega_{i \rightarrow n}^{(1)}$$

que es la regla de oro de Fermi.

10.2 El método variacional

Se puede usar para aproximar la energía del estado fundamental (el estado de energía mínima)

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n,m} \langle \psi | n \rangle \langle n | H | m \rangle \langle m | \psi \rangle = \sum_{n,m} E_n \langle \psi | n \rangle \langle n | m \rangle \langle m | \psi \rangle$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n,m} E_n C_n^* \langle n | m \rangle C_m = \sum_n E_n |C_n|^2$$

$$\sum_n E_n |C_n|^2 \geq \sum_n E_0 |C_n|^2 = E_0 \sum_n |C_n|^2 = E_0 \langle \psi_n | \psi_n \rangle$$

y usamos

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n | \psi \rangle |n\rangle \quad \langle \psi | = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n |$$

para arribar a

$$\frac{\langle \psi_n | H | \psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} \geq E_0.$$

10.2.1 Scattering a orden dos y OFPT

Continuando con el orden dos de scattering por un $V \neq V(t)$ se tiene:

$$\omega_{i \rightarrow n}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \overline{V_{ni} + \sum_{m \neq i} \frac{V_{nm} V_{mi}}{(E_i - E_m)}} \right|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_n \sim E_i}$$

Para obtener los siguientes términos dentro del $||^2$ podemos emplear un ardid gráfico conocido como *Old Fashioned Perturbation Theory*

Fijese que en los estados intermedios estados virtuales $|m\rangle, |j\rangle$ no se conserva la energía. Son propagadores.

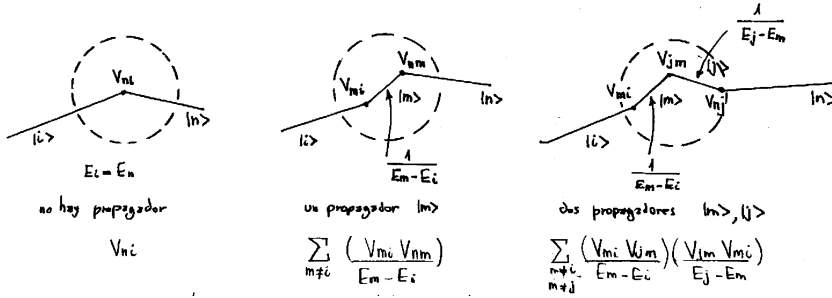


Figura 2.3

10.2.2 Perturbación armónica

Sea un potencial armónico y hermítico

$$V(t) = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t}, \quad V \neq V(t)$$

quiero ver probabilidad de transición a orden uno,

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t (V_{ni} e^{i\omega t'} + V_{ni}^\dagger e^{-i\omega t'}) e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} \left[V_{ni} \int_0^t e^{i(\omega + \omega_{ni})t'} dt' + V_{ni}^\dagger \int_0^t e^{i(-\omega + \omega_{ni})t'} dt' \right]$$

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} \left[V_{ni} \frac{e^{i(\omega + \omega_{ni})t} - 1}{i(\omega + \omega_{ni})} + V_{ni}^\dagger \frac{e^{i(-\omega + \omega_{ni})t} - 1}{i(-\omega + \omega_{ni})} \right]$$

$$C_n(t)^1 = \frac{V_{ni}}{\hbar} \frac{1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t}}{(\omega + \omega_{ni})} + \frac{V_{ni}^\dagger}{\hbar} \frac{1 - e^{i(-\omega + \omega_{ni})t}}{(-\omega + \omega_{ni})}$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_n(t)^1 = \frac{1}{\hbar} [V_{ni} \delta(\omega_{ni} + \omega) + V_{ni}^\dagger \delta(\omega_{ni} - \omega)]$$

Luego será nulo sólo si

$$\omega_{ni} = -\omega \quad \rightarrow \quad \frac{E_n - E_i}{\hbar} = -\omega \quad E_n = E_i - \hbar\omega$$

$$\omega_{ni} = -\omega \quad \rightarrow \quad \frac{E_n - E_i}{\hbar} = \omega \quad E_n = E_i + \hbar\omega$$

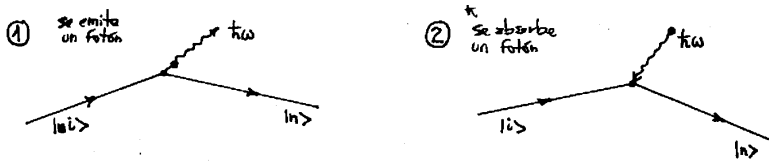


Figura 2.4

Luego,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_n(t)^1$$

representa la probabilidad de emitir o absorber fotones en una interacción. Se puede asociar que V crea fotones y V^\dagger destruye fotones. Para un átomo se tiene

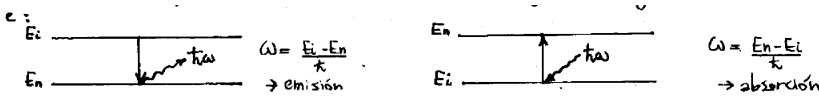


Figura 2.5

10.3 Despoblamiento de estados iniciales

Queremos ver con cual v se despoblan los $|i\rangle$. Para ello me construyo un potencial *suave*

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} V(t) = e^{\eta t} \Psi, \quad \forall \text{cte.}$$

donde η es un parámetro regularizador.

$$C_n(t)^1 = \lim_{t \rightarrow \infty} -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{ni} e^{\eta t'} e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \frac{e^{\eta t} e^{i\omega_{ni} t}}{\eta + i\omega_{ni}} \quad |C_n(t)^1|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2}$$

$$\frac{d}{dt} |C_n(t)^1|^2 = 2\eta \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2}$$

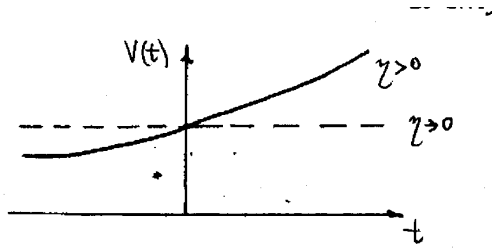


Figura 3.6

y tomando el límite $\eta \rightarrow 0$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{d}{dt} |C_n(t)|^2 = 2 \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{\eta}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} = \begin{cases} 0 & \text{si } \omega_{ni}^2 \neq 0 \\ \infty & \text{si } \omega_{ni}^2 = 0 \end{cases}$$

y llegamos a la regla de oro de Fermi,

$$\frac{d}{dt} |C_n(t)|^2 = 2 \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{ni}) \pi$$

10.3.1 Scattering sección eficaz

$|k\rangle, |k'\rangle$ son autoestados de momento (partículas libres),

$$|k| = |k'|$$

se conserva la energía. Consideraremos la aproximación más baja (aproximación de Born).

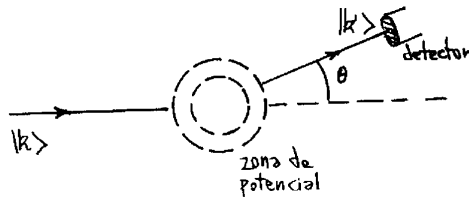


Figura 3.7

$$\omega = \int \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E' - E) |\langle k' | V | k \rangle|^2 \rho(E') dE'$$

queremos calcular la densidad de estados de energía entre $(E, E + dE)$. Pensamos en una partícula libre en una caja $1D$ de longitud L .

$$N e^{ik_x x/\hbar}, \quad \text{con } k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$

pidiendo normalización unitaria $\langle k | k \rangle = 1$ se tiene

$$\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x/\hbar}$$

con $L \rightarrow \pm\infty$ son n_x, k_x continuas.

$$\begin{aligned} dk_x &= \frac{2\pi}{L} dn_x \quad \longrightarrow \quad dn_x = \frac{L}{2\pi} dk_x \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n^2 \quad \longrightarrow \quad n^2 = \frac{L^2}{(2\pi)^2} k^2 \\ dE &= \frac{\hbar^2}{m} k dk \quad \longrightarrow \quad dn = \frac{L}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2 k} dE \\ n^2 dn d\Omega &= \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{mk}{\hbar^2} dE d\Omega \end{aligned}$$

donde $n^2 dn d\Omega$ es la densidad de estados de energía $(E, E + dE)$ en $d\Omega$

$$n^2 dn d\Omega = \rho(E') dE'$$

Con esto sale la integral obteniéndose

$$\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^3} |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 k' d\Omega$$

Esta es la probabilidad de transición entre los impulsos \mathbf{k}, \mathbf{k}' . Es el número de partículas en la unidad de tiempo por unidad de área

$$\text{seccion eficaz} \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\# \text{ de part en } d\Omega \text{ en la unidad de t}}{\# \text{ de part incidentes en la unidad de t por unidad de área}}$$

Un elemento de matriz $\langle k' | V | k \rangle$ será

$$\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = \int dx' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{k} \rangle = \int d\mathbf{x}' \frac{1}{L^3} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}'),$$

la transformada de Fourier del potencial es, amén de constantes, la amplitud a

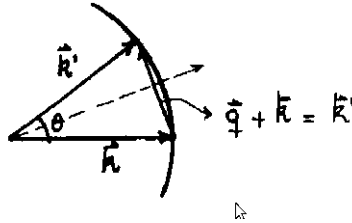


Figura 3.8

primer orden

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin(\theta/2) \quad \text{con } k = k'$$

Entonces para cualquier potencial esféricamente simétrico se puede hacer la integral

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \left(\frac{2m}{4\pi\hbar} \right)^2 \int d^3x' V(x) e^{i(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\cdot\mathbf{x}'} \right|^2$$

y expresamos todo en función de $q = q(\theta)$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty rV(r) \sin(q)r dr \right|^2$$

Utilizando un potencial de Yukawa primero y tomando el límite para llegar al de Coulomb tenemos la sección eficaz de Rutherford

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2m^2 e^4}{\hbar^4} \frac{1}{16k^4 \sin^4(\theta/2)}$$

hay que tomar el potencial de Yukawa y luego el límite porque el de Coulomb diverge de entrada

Introducción a la mecánica cuántica relativista

Consideremos una partícula libre por el momento

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla$$

en relatividad la primera expresión no sirve pero la segunda y la tercera sí.

$$P_\mu = i\hbar \partial_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}$$

$$p^\mu = (E/c, \mathbf{p}) \quad p_\mu = (E/c, -\mathbf{p}) \quad x^\mu = (ct, \mathbf{x})$$
$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right) \equiv \partial_\mu \quad \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) \equiv \partial^\mu$$

y Schrödinger para la partícula libre es

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (1)$$

y entonces podemos hacer la cuenta

$$\psi^* \times (1) \rightarrow i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi$$

y conjugando la ecuación,

$$\psi \times (1)^* \rightarrow -i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi \nabla^2 \psi^*$$

y restando ambas expresiones se obtiene

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} (\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi)$$

$$i\hbar \frac{\partial(\psi^* \psi)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0$$

la cual se puede reescribir como

$$\frac{\partial(\psi^* \psi)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] \right) = 0$$

que es una analogía de la conservación de la carga en electrodinámica. Recordemos que la conservación de la carga era $\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$. Tenemos entonces una especie de conservación de la probabilidad. Note que $\psi^* \psi = |\psi|^2 \geq 0$

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$$

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = H \quad \text{con } H\psi = E\psi$$

Pero esto se pone muy complicado debido a la raíz

11.0.2 La ecuación de Klein-Gordon

Conserva el cuadrado para no complicar demasiado los reemplazos. Entonces

$$H^2 = E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$$

$$-\hbar \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \psi + m^2 c^4 \psi \quad (2)$$

$$p^\mu p_\mu = m^2 c^2 \quad -\partial_\mu \partial^\mu \psi = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi$$

siendo el operador $\square^2 \equiv \partial_\mu \partial^\mu$ el dalembertiano.

$$\left(\square^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0$$

y procediendo de modo ídem al caso anterior,

$$\psi^* \cdot (2) = -\hbar^2 \psi^* \partial_t^2 \psi = -\hbar^2 c^2 \psi^* \nabla^2 \psi + m^2 c^4 \psi^* \psi$$

$$\psi \cdot (2)^* = -\hbar^2 \psi \partial_t^2 \psi^* = -\hbar^2 c^2 \psi \nabla^2 \psi^* + m^2 c^4 \psi \psi^*$$

y restando ambas ecuaciones tenemos

$$\hbar^2 \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*) = \hbar^2 c^2 \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{i}{c^2} [\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*] \right) + i \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = 0$$

El problema es que no puede asegurarse que esta $\rho \equiv i/c^2 [\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*]$ sea definida positiva, lo cual sería necesario para seguir una coherencia.

$$\psi = N e^{i/\hbar(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)}$$

$$\partial_t \psi = -N \frac{iE}{\hbar} e^{i/\hbar(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)}$$

$$\rho = \frac{i}{c^2} \left(N^* e^{-i/\hbar(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} (-N) \frac{iE}{\hbar} e^{i/\hbar(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} - N e^{i/\hbar(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} N^* \frac{E}{\hbar} e^{i/\hbar(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} e^{i\pi/2} \right)$$

$$\rho = -\frac{i}{c^2} \left(2|N|^2 \frac{iE}{\hbar} \right) < 0 \quad \text{si } E > 0$$

para una onda plana. Necesito considerar $E < 0$ pues $E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$ y la base debe ser completa.

La densidad ρ es positiva si tuviese $E < 0$ pero esto causa el problema de tener materia inestable, pues nunca se alcanza el fundamental. Acá muere en este atolladero la ecuación de Klein-Gordon.

11.0.3 La ecuación de Dirac

Dirac parte de pedir una ecuación lineal en el impulso \mathbf{p}

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2$$

usando $H\psi = E\psi$ y $H^2 = E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$ y con $\beta, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p}$ operadores.

$$H^2 = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)$$

$$H^2 = c^2 \alpha_i p_i \alpha_\ell p_\ell + c^3 \alpha_i p_i \beta m + \beta mc^3 \alpha_i p_i + \beta^2 m^2 c^4$$

$$H^2 = c^2 \alpha_i \alpha_\ell p_i p_\ell + c^3 m p_i \underbrace{(\alpha_i \beta + \beta \alpha_i)}_{=0} + \beta^2 m^2 c^4$$

$$H^2 = c^2 \underbrace{\left(\frac{\alpha_i \alpha_\ell + \alpha_\ell \alpha_i}{2} \right)}_{\delta_{i\ell}} p_i p_\ell + m^2 c^4 \underbrace{\beta^2}_{=1}$$

$$\alpha_i \alpha_\ell + \alpha_\ell \alpha_i = 2\delta_{i\ell} \quad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad \beta^2 = 1$$

Como se ve, estos no pueden ser simples escalares. Dirac pide

- α, β hermíticos
- $\beta^2 = 1$ $\alpha^2 = 1$ autovalores ± 1
- traza nula

$$\alpha_i \beta = -\beta \alpha_i \quad \rightarrow \quad \beta \alpha_i \beta = -\beta^2 \alpha_i = -\alpha_i$$

$$\text{Tr}(\alpha_i) = -\text{Tr}(\beta \alpha_i \beta) = -\text{Tr}(\beta \beta \alpha_i)$$

- dimensión par

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

donde cada elemento de la matriz es de 2×2 .

Entonces

$$H\vec{\psi} = i\hbar \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t}, \quad H \in 4 \times 4, \vec{\psi} \in 4 \times 1, \quad \vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \sum_k \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + mc^2 \beta \psi \quad (3)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = i\hbar c \sum_k \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x_k} \alpha_k + mc^2 \psi \alpha_k \beta$$

$$\psi^\dagger \cdot (3) - (3)^\dagger \cdot \psi \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger \psi) = -i\hbar c \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k}(\psi^\dagger \alpha_k \psi)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger \psi) + c \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k}(\psi^\dagger \alpha_k \psi) = 0$$

Y si $\rho \equiv \psi^\dagger \psi$ ahora tenemos una densidad de probabilidad como requiere la naturaleza.

11.0.4 Ejemplo: partícula libre quieta

Sea una partícula libre en reposo,

$$\mathbf{p} = 0 \quad H = \beta mc^2$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \beta mc^2 \psi$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Tenemos cuatro ecuaciones, dos con energía positiva y dos con energía negativa

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = mc^2 \psi_i \quad i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = -mc^2 \psi_i$$

$$\psi_1 = e^{-imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_3 = e^{imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Como aún tenemos degeneración de orden dos, necesitaremos un operador que conmute con el H

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad [H, \vec{\Sigma}] = 0$$

$$\Sigma_3 = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \psi_1, E = mc^2, \Sigma_3 = 1 & \quad \psi_2, E = mc^2, \Sigma_3 = -1 \\ \psi_3, -E = mc^2, \Sigma_3 = 1 & \quad \psi_4, -E = mc^2, \Sigma_3 = -1 \end{aligned}$$

Podemos identificar

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$$

$$\text{si } p \neq 0 \Rightarrow [H, \vec{\Sigma}] = 2ic\vec{\alpha} \times \mathbf{p}$$

11.0.5 Energías negativas

Como $E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$ hay $E < 0$ y además un *gap* de ancho $2mc^2$ entre ellas. Las $E < 0$ harían que la materia jamás alcance un estado fundamental y por ende jamás se estabilice. Dirac piensa que los estados de $E < 0$ están todos llenos. No decaen más electrones allí dentro. Es el mar de Dirac. Iluminando ese vacío se lo puede excitar.

Podemos hacer saltar a la zona positiva una carga ($-e$) dejando un hueco positivo (equivalente a una carga $+e$). Es una creación de pares $\gamma \rightarrow e^- e^+$, sin embargo el proceso inverso $e^- e^+ \rightarrow \gamma$ de aniquilación de pares ocurre prontamente. Se observó experimentalmente.

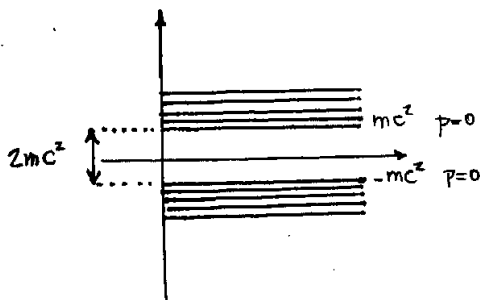


Figura 0.1

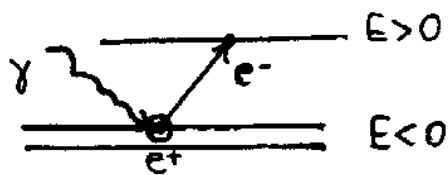


Figura 0.2