

Capítulo 1

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

1.1 Dinámica cuántica

1.1.1 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 $H(t)$.

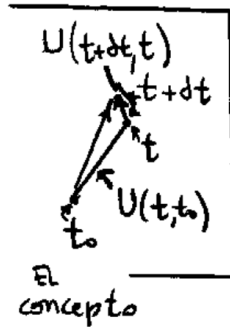


Figura 0.1

- 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 .

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

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.

1.1.2 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.

1.1.3 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.

1.1.4 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

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

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

1.1.5 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

$$a.$$

1.1.6 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

Coeficientes

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.

1.1.7 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.

1.2 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.

1.2.1 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.

1.2.2 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,

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

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

1.2.3 Interferencia en experimento de Young

Consideremos la situación depicted en la figura bajo estas líneas

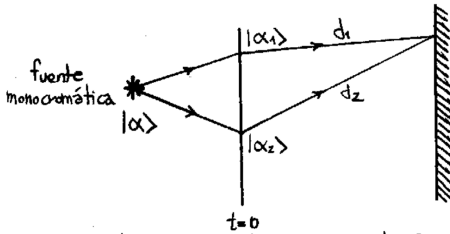


Figura 2.2

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 unirlo en $|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle$ vemos una intensidad que depende de la diferencia de camino.

1.2.4 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).

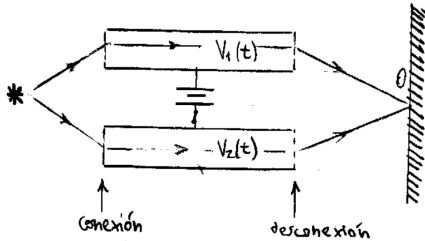


Figura 2.3

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,

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

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.

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

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

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

1.3 El propagador

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

a

b

c

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

a

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:

b

c

d

y entonces el propagador es una función de Green que satisface

d

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

1.3.1 El propagador de la partícula libre

a
a
b

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

a

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

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

a

1.4 Integrales de camino de Feynmann

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

a

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

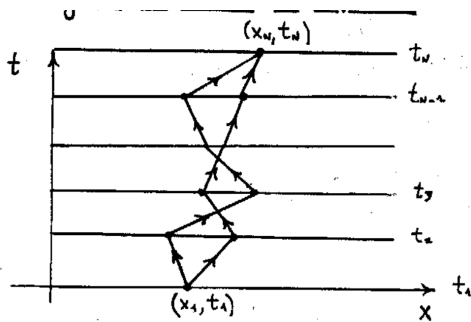


Figura 4.4

a

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, Feymann lee

a

Definiremos

\equiv

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

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

y hay que considerar TODOS los posibles caminos

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

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 $\Delta fase$ no es grande y hay interferencia constructiva. Para un δt infinitesimal es

a

b

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

a

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

$+$

$=$

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:

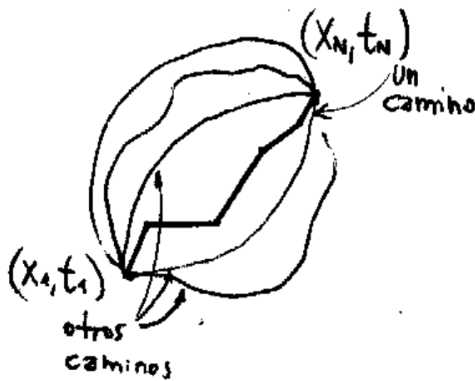


Figura 4.5

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 $(x', 0) \rightarrow (x', t)$

$$G(t) =$$

$$G(t) =$$

y tomando Laplace-Fourier

$$\tilde{G}(t)$$

La expresión

$$\equiv \text{Integral de caminos de Feynmann}$$

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

1.5 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

clausura

el producto de dos matrices ortogonales es otra matriz ortogonal

asociatividad

Eidentidad

Einversa

1.5.1 No conmutatividad de las rotaciones clásicas

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

$$R_z(\varphi) = ()$$

$$R_x(\varphi) = ()$$

$$R_y(\varphi) = ()$$

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.

1.6 Rotaciones cuánticas

Para las rotaciones cuánticas se pedirá

$$D,$$

rotación infinitesimal o bien

$$D,$$

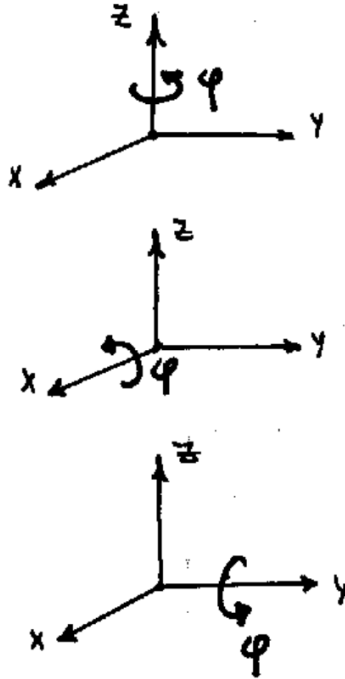


Figura 5.6

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

de modo que la cuenta lleva a

$$J_x$$

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

$$=$$

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

$$|\alpha\rangle =$$

$$D$$

$$D$$

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

$$D$$

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.

1.6.1 Angulos de Euler

Se define una serie de rotaciones

$$123$$

lo cual equivale a

$$R() =$$

$$e$$

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

$$R_{y'}(\beta) =$$

$$R_{z'}(\gamma) =$$

$$R() =$$

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:

$$D() =$$

1.6.2 Autoestados y autovalores de J

Partimos de

$$[J^2, J] = 0$$

y

$$J^2 =, [J^2, J] = 0$$

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

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

Se eligen J^2, J_z como observables que conmutan

$$J^2$$

Definiremos los operadores de subida y de bajada

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

que verifican

$$[J^2, J_{\pm}] = 0$$

Entonces se tiene

$$J^2() \longrightarrow$$

$$(J_z) \longrightarrow$$

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

$$J_+$$

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

$$J_+ J_- =,$$

$$J^2 =,$$

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

$$(a - b^2) \langle a, b | a, b \rangle =, a \geq b^2$$

hay cota para b . Como no puede seguir subiendo debe dar el ket nulo

$$= 0$$

$$= 0$$

pero

$$J_- J_+ \\ = 0 \quad a = b_m(b_m - \hbar)$$

tiene solución

$$b_M - B_m = -\hbar$$

pero esto es absurdo.

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 $b/\hbar = m$

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

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

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

1.6.3 La normalización de J_{\pm}

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

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

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

$$\langle \rangle =$$

$$=$$

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

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

$$\mathcal{D}(R) =$$

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

$$\propto \delta_{jj'}$$

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

$$D$$

y

$$D$$

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

$$D$$

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

$$D$$

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

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.

$$|j, m\rangle \longrightarrow$$

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

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

$$D$$

$$D$$

En los $d_{m'm}^{(j)}$ está la dificultad de la cuenta.

1.7 Formalismo de spinores de Pauli

Apropiado para trabajar con sistemas de spin $1/2$. 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

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

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

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \text{ con}$$

que es una especie de vector

$$\sigma$$

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

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

Las matrices de Pauli cumplen las propiedades básicas siguientes

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

$$|+\rangle \quad (\sigma \hat{\mathbf{a}})$$

1.7.1 Aplicación a las rotaciones

$$D$$

pero

$$()^n =$$

$$e$$

$$d$$

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

$$d$$

donde hemos usado los resultados

$$\cos \sin$$

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

$$D =$$

1.7.2 Ejemplo

$$d$$

Este resultado es intuitivamente lógico.

1.7.3 Rotaciones en sistemas con $j = 1$

Ahora tenemos

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

recordando J_y en términos de escaleras

$$\begin{aligned} &J_y \\ &e \\ &\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^n = \\ &e = \end{aligned}$$

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

$$d$$

1.8 Momento angular orbital

$$\mathbf{L} =$$

verifica el álgebra de \mathbf{J} ,

$$[]$$

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

$$() =$$

$$() =$$

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

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

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

$$\Psi$$

$$\Psi$$

Podemos hallar una expresión para L_z en esféricas:

$$\langle r, \theta, \varphi \| \alpha \rangle$$

identificamos

$$=$$

operador L_z en esféricas

Usando

$$L^2 =$$

$$\langle L^2 \rangle$$

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

donde $\nabla_{\theta, \varphi}^2$ 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:

$$\langle | \rangle =$$

$$\langle | \rangle =$$

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

$$[] = [] = 0$$

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

$$\langle \hat{n} | \ell, m \rangle =$$

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

$$L_z$$

$$L^2$$

$$=$$

Entonces, con la ortogonalidad

$$\longrightarrow$$

y con la completitud

$$\longrightarrow$$

de manera que llegamos a

$$\int \int$$

Podemos hallar una expresión para

$$= 0$$

$$\Rightarrow$$

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

$$=$$

y por este camino se llega a

$$Y$$

con

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

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

Además,

(no hay signo menos)

1.8.1 Armónicos esféricos como matrices de rotación

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

$$\hat{n} =$$

Necesitamos aplicar

$$D$$

$$n$$

$$l$$

$$l$$

$$Y$$

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

$$lm$$

$$Y^*,$$

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

La Ψ tiene la misma simetría que el potencial.

1.9 Suma de momentos angulares

1.9.1 Dos momentos de espín 1/2

Sean dos estados de espín 1/2

$$a$$

en cada espacio valen las relaciones usuales de conmutación

$$b, [S_{1i}, S_{2j}] = 0$$

donde el último indica que operadores de espacios diferentes conmutan.

Un estado general es

$$a$$

Hay cuatro estados

$$b$$

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

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

$$c$$

Así tendremos

$$d$$

$$S^2 =$$

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

$$d$$

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

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

1.9.2 Cambio entre bases

Podemos hallar a ojo que

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

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 $|s, m\rangle$ se tiene

$$S$$

y ahora si opero con S_- ,

$$S$$

Luego

$$\langle 00 \rangle$$

y puedo usar ortonormalidad

$$= 0 = \quad \text{con } |a|^2 + |b|^2 = 1$$

.

1.10 Teoría formal de suma de momentos angulares

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

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

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$$

$$[J^2, J_k] = 0$$

El momento total \mathbf{J} cumple que

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$$

donde vemos que

$$[J^2, J_k] = 0$$

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

$$|j_1, j_2; j, m\rangle =$$

$$\sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2}^j$$

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

$$\sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2}^j$$

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

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

$$C$$

1.10.1 Restricciones para la no nulidad de los coeficientes

$$a$$

$$b$$

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

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

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

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

$$C$$

y juntando todo se tiene

$$\Rightarrow$$

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

$$dim$$

$$j = 1/2, 3/2, 5/2$$

Podemos ver a ojo que

$$|j\rangle$$

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

$$= \sum = 1$$

1.10.2 Relación de recurrencia

$$J_{\pm} = ket j, m =$$

$$b$$

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

$$\sqrt{()}$$

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

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

$$a$$

habrá sólo cuatro $C_{m_1 m_2}^j$ no nulos, que serán

$$\langle | \rangle$$

donde vemos que los coeficientes linean 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

$$LS$$

$$LS$$

$$LS$$

1.11 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

$$=$$

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

$$=$$

$$\mathcal{D}(R)^+$$

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.

1.12 Operadores tensoriales

En mecánica clásica

$$T_{ij}$$

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

$$UV =$$

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

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

Un tensor esférico transforma como

$$DTD = DT$$

Tendremos

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

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

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

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

$$\hat{n} = ()$$

$$Y \longrightarrow T$$

$$Y$$

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

□

1.13 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

$$\langle \parallel \rangle =$$

un coeficiente que no depende de q, m, m' .

La regla de selección se construye

$$\langle \parallel \rangle =$$

$$\neq$$

Una idea de la demostración del teorema

$$sa$$

$$ba$$

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

$$\propto$$

$$\propto$$

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

1.13.1 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

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

1.14 Ejemplos de elementos matriciales de tensores

Sea un escalar (tensor de rango cero)

$$\langle \parallel \rangle =$$

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

Sea un vector (tensor de rango uno):

$$\langle \parallel \rangle \propto \langle j1; mq | j1; j' m' \rangle$$

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

1.14.1 Teorema de proyección

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

$$=$$

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

$$\mathbf{V} = \frac{\langle \cdot \rangle}{J} \mathbf{J}$$

1.14.2 Aplicación del teorema de proyección

Sea un H_0 esféricamente simétrico

cosas

Si meto un campo B en \hat{z} tendré

$$H \equiv H_0 + H_1 = H_0$$

lo cual debería romper la degeneración.

$$L_z + 2S_z =$$

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

escalares

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

1.15 Simetrías en mecánica cuántica

En mecánica clásica tenemos el teorema de Noether

$$\partial p_i = cte.$$

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

$$\partial$$

En mecánica cuántica definiremos un operador unitario $\$$ asociado a traslación/rotación. Pensemos en una transformación infinitesimal dada por $\$$

$$\$$$

Sea el H invariante frente a $\$,$ entonces

$$SHS =$$

Esto significa que el autovalor no varía con el tiempo, Como $[H, G] = 0$ se tiene

$$nodege$$

1.15.1 Simetría de paridad

Transforma un RHS en LHS. Es decir que hace

$$\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$$

y solicitaremos un operador unitario llamado paridad que verifique

$$|\alpha\rangle \rightarrow \Pi |\alpha\rangle = |\alpha'\rangle$$

si Π es unitario y $\Pi^1 = \mathbb{1}$ entonces es hermitico. Queremos que refleje el $\langle \hat{x} \rangle$

$$a$$

anticonmuta con \mathbf{x} . Debido a ello

$$a$$

como $\hat{\Pi}$ no depende del tiempo

$$d$$

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

$$[] = 0$$

Que conmuta con \mathbf{J} puede verse de pedirle que

$$[\mathbf{J}, \mathbf{J}] = 0 \longrightarrow [\mathbf{J}, \mathbf{J}] = 0,$$

cosa que vale en mecánica clásica, entonces

$$R$$

$$\square$$

$$\square$$

1.15.2 Función de onda bajo paridad

$$\Psi$$

y entonces la función de onda de un estado al que se le aplicó paridad será

$$\Psi$$

Sea $|\alpha\rangle$ autoestado de paridad, entonces

$$a$$

los autovalores serán ± 1

$$=$$

no toda función de onda tiene paridad bien definida.

$$\mathbf{x}$$

$$=$$

$$\Pi$$

Como $[\mathbf{L}, \hat{\Pi}] = 0$ un autoestado de \mathbf{L} es autoestado de $\hat{\Pi}$.

1.15.3 Teorema

Sea

autoestado

La demostración

()

2

3

Un caso donde falla el teorema

$$caso$$

$$casomas$$

1.15.4 Reglas de selección de paridad Π

Sean $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ autoestados de paridad

$$\Pi$$
$$\langle \parallel \rangle$$

- Operadores impares solo conectan estados de paridad opuesta

$$a$$

- Operadores pares solo conectan estados de la misma paridad

$$b$$

$$= 0$$
$$c$$

1.16 Inversión temporal (reversión de movimiento)

En mecánica clásica sería *pasar la película hacia atrás*

$$t \longrightarrow -t$$

En sistemas sin fuerzas disipativas se tiene

$$m\ddot{x} =$$

En mecánica cuántica tendremos

$$i\hbar$$
$$=$$

no es solución de Schrödinger. Pero notemos que $\Psi^*(x, -t)$ cumple la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar$$

Entonces necesitamos un operador que respete esta característica. Necesitaré el producto interno conjugado

$$\Psi$$

El operador involucrado no será unitario

$$|\tilde{\alpha}\rangle =$$

Si $\hat{\Theta}$ unitario se conserva el producto interno

$$=$$

Pediremos antiunitariedad y antilinealidad al operador $\hat{\Theta}$

$$=$$

$$=$$

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.

$$K$$

Veamos que 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 $|\tilde{\beta}\rangle$.

1.16.1 Operadores ante $\hat{\Theta}$

Usaremos la notación

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \hat{\Theta} |\alpha\rangle$$

donde hay que tener en cuenta

$$= \mathbb{1}$$

Sería razonable esperar que

$$= -$$

Sea $\hat{\mathbb{O}}$ un operador hermítico

$$=$$

Luego metemos un $= 1$

$=$

Notamos que no se aplica Θ sobre bra alguno y tenemos Θ no unitario. Entonces requeriremos

$=$

como para \mathbf{p}, \mathbf{J} operadores impares

$=$

y \mathbf{x} operador par.

Los operadores pares conmutan con Θ ,

$==$

Hamiltoniano ante reversión de movimiento. Veamos la reversión de un sistema en estado $|\alpha\rangle$

$=$

Si el hamiltoniano es invariante ante reversión temporal debería ser lo mismo

$=$

es decir que estamos pidiendo que se obtenga el mismo estado

- 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

$=$

$$= [H, \Theta] = 0$$

Si Θ era unitario teníamos la relación de anticonmutación $\{H, \Theta\} = 0$ lo cual lleva a absurdos.

a

Si $\{H, \Theta\} = 0$

$= H$ debe ser par frente a Θ

1.16.2 Función de onda

Sea en $t = 0$ un sistema en el estado $|\alpha\rangle$

$==$

Ψ

Esto era lo que *vimos* en la ecuación de Schrödinger.

1.16.3 Reversión de movimiento sobre J

no tiene sentido porque J_x, J_y, J_z no conmutan entre ellos. Analizaremos $|\ell, m\rangle$

$$\Theta |J\rangle$$

$$\equiv$$

Lo que hace Θ es invertir la componente de \hat{z} y alterar la fase. Se ve que

$$\Theta^2 = \mathbb{1}$$

1.16.4 Reversión para sistemas de spin 1/2

Sea un estado general up de spin $|\hat{n}; +\rangle$, que se obtiene con dos rotaciones

$$S_n$$

$$\Theta$$

$$a$$

$$b$$

$$c$$

1.16.5 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

$$H\Theta |n\rangle =$$

$$=$$

$$=$$

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.

1.17 Métodos perturbativos

Se basan en

$$H = H_0 + \lambda V \qquad \lambda \ll 1$$

con $H_0 \ket{n^{(0)}} = E_n^{(0)} \ket{n^{(0)}}$ (el problema sin perturbar)

$$H$$

que sería la solución exacta. Como esto es hartocomplicado podemos desarrollar en serie

$$\begin{aligned} &\approx \\ &\approx \\ &() = () \\ &\sum_{i=0}^\infty = \end{aligned}$$

y aproximando los primeros términos

$$\begin{aligned} &H_0 \\ &E_0 \end{aligned}$$

ahora igualamos orden a orden y resulta

$$\begin{aligned} &\lambda^0 \\ &\lambda^1 \\ &\lambda^2 \end{aligned}$$

Pediremos una normalización a cada orden y considerando $\bra{0_n} \ket{n(\lambda)} \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} &() = \\ &\lambda \\ &... \\ &... \end{aligned}$$

En un mismo autoestado (n) los órdenes diferentes (i) no son necesariamente ortogonales.

1.18 Resolución

A orden cero será

$$() \quad \text{y se define}$$

y $|0_n\rangle$ es dato porque es el estado no perturbado. A orden uno tenemos

$$()$$

$$\langle \rangle$$

y la energía a orden uno es

$$=$$

Veamos el autoestado a orden uno. Podemos poner (no hay degeneración)

$$=$$

y sea $p \neq n$

$$+ = 0$$

$$=$$

a un mismo orden (cero) diferentes autoestados son ortogonales. Sea $p = n$ entonces

$$= 0$$

ya lo vimos antes, en la normalización

$$=$$

autoestado hasta orden uno. A orden dos tenemos

$$+- = 0$$

$$+- = 0$$

$$=$$

$$E$$

que es la energía a orden dos. Veamos el autoestado a orden dos

$$|2n\rangle = \sum_p () |\phi_p\rangle$$

sea $p \neq n$

$$+$$

$$+$$

$$=$$

+

+

Sea $p = n$

$$+ = 1$$

$$=$$

$$=$$

$|2n\rangle =$

y el autoestado hasta orden dos

$$=$$

con la energía hasta orden dos

$$=$$

1.18.1 Caso degenerado

Sea que hay degeneración de orden g en el autoestado N (a orden cero)

$$= k = 1, 2, \dots, g$$

Suponemos existe combinación lineal

+

para escribir un estado degenerado en función de los otros.

$$= 0$$

$$= 0$$

$$= 0$$

$$= 0$$

$$=$$

Esto último es una ecuación de autovalores y autovectores de la forma:

$$= 0$$

nos dará los corrimientos de la energía a primer orden y los autoestados $|1_n^j\rangle$ serán los autovectores del problema.

1.19 Efecto Stark

Sea un átomo de H con $|n, \ell, m\rangle$ sin spín y con $n = 2$. Será

$$0$$

Tengo cuatro estados

$$200$$

todos con la misma energía ϵ_2 . Metemos un campo eléctrico en \hat{z} y entonces $V = -ez|\mathbf{E}|$. Luego

$$=$$

\hat{z} es impar ante paridad y entonces vincula estados de paridad diferente, y entonces

$$= 0$$

diagonal nula y con $m' \neq m$ a igual ℓ tiene la misma paridad

$$=$$

Solo hay un elemento no nulo correspondiente al producto par-impar. Se tendrá

$$=$$

Puedo diagonalizar y obtengo

$$=$$

En este caso no se rompe la degeneración por completo.

$$=$$

1.19.1 Corrimiento de la energía a orden 2 (con degeneración)

Sea que a orden uno se rompe toda la degeneración

$$+- = 0$$

Entonces la corrección a segundo orden de la energía será:

$$+- = E$$

pues $\langle 0_N^j | 0_N^j \rangle = 0$ pero

$$=$$

$$=$$

falta desarrollo ...

$$E =$$

donde N es un estado degenerado.

1.20 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.

cuentitas

donde a_0 es el radio de Bohr, α es la constante de estructura fina . Tenemos a)
Corrección cinemática (relativista)

$$0$$

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}

$$W_{so} =$$

y la corrección va como $W_{mv}/H_0 \approx \alpha^2$.

c) Término de Darwin o de contacto

$$=$$

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

$$n = 2$$

serán ocho estados.

$$W$$

y W es par ante Π y sólo habrá elementos de matriz $\neq 0$ que sean de la misma paridad.

matriz

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

$$dg$$

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

$$E =$$

es decir que no depende directamente de ℓ, s .

Un sketch de los métodos perturbativos

$$H_0 =$$

1.21 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

$$|\alpha, t_0, t\rangle_s =$$

a b c

Aquí se puede pensar que

- $C_n(t)$ evoluciona por $V(t)$
- C evoluciona por H_0

Esto introduce la *picture* de interacción de Dirac; en la cual los estados evolucionan con $V(t)$.

	Dirac	Schrödinger	Heinsenberg
estados	e	e	fijos
operadores	e	fijos	e
base	fijos	fijos	e

$$b$$
$$nb$$
$$a$$

que es la ecuación de evolución de los kets. Pediremos asimismo que

$$a$$
$$c$$

Y los operadores evolucionan según

$$a$$

$$d =$$

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

$$d$$

$$d$$

$$d$$

1.21.1 Evolución de los coeficientes

$$as$$

$$C_n(t) =$$

$$d$$

y le pego un $\langle n|$ a la ecuación de evolución de kets,

$$i\hbar$$

$$s$$

$$i\hbar$$

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

$$=$$

que puede ser de difícil solución.

1.21.2 Método perturbativo (dependiente del tiempo)

Pensaremos en una serie perturbativa

$$C_n(t) =$$

El evolucionador temporal en la picture de interacción cumple

$$| \rangle =$$

que viene de

$$i\hbar$$

la cual resolviendo nos hace llegar a

$$U$$

y esto lleva a la serie de Dyson:

$$U$$

1.21.3 Transiciones entre autoestados del hamiltoniano H_0

$$|i\rangle =$$

$$a$$

La amplitud de transición será

$$C$$

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

$$a$$

$$b$$

y notemos que \hat{U} no obedece la ley de transformación de operadores.

$$a$$

$$b \Rightarrow |C_n(t)|^2 = |\tilde{C}_n(t)|^2$$

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
- orden 1
- orden 2

1.21.4 Ejemplo: potencial constante encendido abruptamente