

Notas Cuantica III

Daniel Vazquez Lago

12 de septiembre de 2024

Índice general

1. Estructura fina del hidrógeno	5
1.1. Postulados y simetrías	5
1.1.1. Traslaciones temporales	6
1.1.2. Traslaciones espaciales	6
1.2. Ecuación de Dirac	6
1.3. Acoplamiento electromagnético en la ecuación de Dirac	6
1.4. Átomo de hidrógeno sin correcciones de alto orden	6
A. Apéndice	7
A.1. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo	7
A.1.1. Primer orden	7
A.1.2. Segundo orden	7
A.2. Momento angular y espín	7
A.2.1. Momento angular para $j = 1/2, 1, 3/2$	7
A.2.2. Representaciones del operador rotación: matrices de rotación	7
A.2.3. Coeficientes de Clebsch-Gordan	7
A.2.4. Armónicos esféricos	8
A.2.5. El teorema de Wigner-Eckart	8

1

Estructura fina del hidrógeno

Para encontrar las correcciones relativistas para los orbitales de átomo hidrogenoide usamos la ecuación de Dirac. Esta ecuación puede ser resuelta de manera exacta para un potencial de Coulomb. Sin embargo, los cálculos son pesados, y dado que estas correcciones son pequeñas, es conveniente usar la teoría de perturbaciones para incluir únicamente los términos del orden v^2/c^2 en el hamiltoniano de Dirac.

1.1. Postulados y simetrías

Los estados físicos están representados como vectores de un espacio de Hilbert. Las cantidades observables están representadas por operadores hermíticos $(A^\dagger)_{ij} = a_{ij}^*$ actuando sobre los estados del espacio de Hilbert. El valor de una propiedad representada por el observable A da como resultado diferentes autovalores y, tras la medida, el estado del vector del sistema es el autoestado asociado al autovalor obtenido ϕ_a .

La probabilidad de obtener un valor particular es:

$$P(a) = \frac{|\langle \phi_a | \Psi \rangle|^2}{|\langle \phi_a | \phi_a \rangle| |\langle \Psi | \Psi \rangle|} \quad (1.1)$$

El estado de un vector cambia a lo largo del tiempo siguiendo la **ecuación de Schrödinger**.

$$i\hbar \frac{d\Psi(t)}{dt} = \mathcal{H}\Psi(t) \quad (1.2)$$

donde \mathcal{H} es el Hamiltoniano del sistema y representa la energía. Las simetrías en la mecánica cuántica están representadas por operadores unitarios lineales (es decir, que el hermítico conjugado y el inverso son iguales $U^\dagger = U^{-1}$). Bajo estos operadores las probabilidades de transición se mantienen:

$$\langle \Psi'_a | \Psi'_b \rangle = \langle U\Psi_a | U\Psi_b \rangle = \langle \Psi_a | U^\dagger U \Psi_b \rangle = \langle \Psi_a | \Psi_b \rangle \quad (1.3)$$

Son especialmente importantes las simetrías representadas por un operador unitario que estén arbitrariamente cerca del operador identidad $\mathbf{1}$, de tal modo que podamos escribir:

$$U_\epsilon = \mathbf{1} + i\epsilon T + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (1.4)$$

donde ϵ es un número real infenitesimal, y T es un operador que no depende de ϵ . La condición para que $U^\dagger U = \mathbf{1}$ es que T debe verificar que $T = T^\dagger$. Si tomamos ahora $\epsilon = \theta/n$ donde θ es algún tipo de parámetro independiente de n (y finito), y aplicamos la transformación n veces tenemos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{i\theta T}{n} \right) = e^{i\theta T} = U(\theta) \quad (1.5)$$

Al operador T se le llama **generador de simetría**. Muchos de los observables están representados por este tipo de operadores. Bajo una transformación de simetría $\Psi' = U\Psi$, el valor esperado de un observable A debería seguir la siguiente transformación:

$$\langle \Psi | A \Psi \rangle \rightarrow \langle \Psi' | A \Psi' \rangle = \langle \Psi | U^{-1} A U \Psi \rangle \quad (1.6)$$

La matriz A bajo dicha transformación puede ser hallada transformando el observable Comandos

$$A \rightarrow A' = U^{-1} A U \quad (1.7)$$

Si tomamos U como 1.4, tendremos que el operador A se transforma como:

$$A \rightarrow A' = A - i\epsilon[T, A] \quad (1.8)$$

El efecto de transformaciones de simetría infenitesimales en cualquier operador puede ser expresado a través de *las relaciones de conmutación entre el operador y el generador de simetría*.

1.1.1. Traslaciones temporales

1.1.2. Traslaciones espaciales

1.2. Ecuación de Dirac

1.3. Acomplamiento electromagnético en la ecuación de Dirac

1.4. Atomo de hidrógeno sin correcciones de alto orden



Apéndice

A.1. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo

A.1.1. Primer orden

A.1.2. Segundo orden

A.2. Momento angular y espín

Las leyes de la naturaleza no deberían depender de como este orientado nuestro laboratorio. Se espera entonces que nuestras teorías sean invariante bajo rotaciones. En este apartado vamos a probar como la invariancia bajo rotaciones lleva a la existencia de la conservación del momento \mathbf{J} . Una rotación en un espacio tridimensional es una transformación lineal $x'_i = \sum_j R_{ij}x_j$ de las Coordenadas cartesianas x_i que deja invariante el producto escalar $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$. De este modo tenemos que:

A.2.1. Momento angular para $j = 1/2, 1, 3/2$

A.2.2. Representaciones del operador rotación: matrices de rotación

A.2.3. Coeficientes de Clebsch-Gordan

Dos sistemas con momentos angulares \mathbf{J}_1 y \mathbf{J}_2 pueden ser considerados juntos como un sistema global de momento angular total $\mathbf{J}_3 = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$. Existen dos bases de autofunciones de este tercer sistema, representadas por $|j_1 j_2 j_3 m_3\rangle$ y $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$. Lógicamete podremos cambiar de un estado a otro usando:

$$|j_1 j_2 j_3 m_3\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \quad (\text{A.1})$$

A los elementos de la matriz $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle$ se le llaman **coeficientes de Clebsch-Gordan**. Una notación alternativa es:

$$\begin{aligned}\Psi_{j_1 j_2 j_3}^{m_3} &= \sum_{m_1, m_2} C_{j_1 j_2}(j_3 m_3; m_1 m_2) \Psi_{j_1 j_2}^{m_1 m_2} \\ \Psi_{j_1 j_2}^{m_1 m_2} &= \sum_{j_3, m_3} C_{j_1 j_2}(j_3 m_3; m_1 m_2) \Psi_{j_1 j_2}^{m_1 m_2}\end{aligned}\tag{A.2}$$

A.2.4. Armónicos esféricos

Los armónicos esféricos $Y_l^m(\theta, \varphi)$ son las autofunciones del orbital momento angular orbital, y satisfacen las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\left[\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] Y_l^m + l(l+1)Y_l^m = 0\tag{A.3}$$

Y vienen dadas explícitamente por:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos(\theta)) e^{im\varphi}\tag{A.4}$$

A.2.5. El teorema de Wigner-Eckart

Sean los $|\Phi_j^m\rangle$ los autoestados del momento angular con autovalores $j(j+1)\hbar^2$ y $m_j\hbar$ para J^2 y J_3 respectivamente. Recordar que

$$(J_1 \pm iJ_2)|\Phi_j^m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|\Phi_j^{m \pm 1}\rangle\tag{A.5}$$

Sea $|\Psi_j^m\rangle$ otros autoestados del momento angular. Podemos demostrar que

$$\langle \Phi_j^{m+1} | \Psi_j^{m+1} \rangle = \langle \Phi_j^m | \Psi_j^m \rangle\tag{A.6}$$

Esto demuestra que $\langle \Phi_j^m | \Psi_j^m \rangle$ es *independiente* de m . Cualquier otro elemento de la matriz con valores de j y m diferentes se anulan:

$$\langle \Psi_{j_3}^{m_3} | O_{j_2}^{m_2} \rangle = 0\tag{A.7}$$

Definimos como un **tensor irreducible** de rango j como un conjunto de $2j+1$ operadores O_j^m ($m = -j, -j+1, \dots, j$) que al aplicarle los generadores de rotación

$$[J_3, O_j^m] = \hbar m O_j^m \quad [J_1 \pm iJ_2, O_j^m] = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} O_j^{m \pm 1}\tag{A.8}$$

Algunos ejemplos de tensores irreducibles son los *armónicos esféricos*.

Teorema A.1 (Wigner-Eckart). Sea $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle$ es el coeficiente de Clebsch-Gordan asociado con el acoplamiento de los momentos angulares \mathbf{J}_1 y \mathbf{J}_2 que componen \mathbf{J}_3 ; y $\langle \Phi || O || \Psi \rangle$, llamada la matriz irreducible elemental, que puede depender de todo menos de las tres componentes m_1, m_2 y m_3 ; el teorema de Wigner-Eckart nos dice que:

$$\langle \Phi_{j_3}^{m_3} | O_{j_1}^{m_1} | \Psi_{j_2}^{m_2} \rangle = \frac{1}{2j_3+1} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle \langle \Phi || O || \Psi \rangle\tag{A.9}$$

El teorema de Wigner-Eckart se puede expresar de otra forma, la **Formula de Landé**. Sea \mathbf{A} un vector cualquiera y \mathbf{J} un momento angular. Esta fórmula nos dice que:

$$\langle \Phi_j^m | \mathbf{A} | \Psi_j^{m'} \rangle = \frac{\langle \Phi_j^m | \mathbf{A} \cdot \mathbf{J} | \Psi_j^m \rangle}{j(j+1)\hbar^2} \langle \Phi_j^m | \mathbf{J} | \Psi_j^{m'} \rangle\tag{A.10}$$