

Notas - Curso Mecánica Cuántica II

PhD in Physics & Full Professor at Universidad Nacional de Colombia

Roberto Enrique Martínez Martínez*

November 9, 2023

1 Momento Angular

El momento angular es una variable dinámica clásica y se define como

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{1}$$

En mecánica cuántica es un operador Hermítico por ser un observable físico con autovalores reales. Además, \vec{r} y \vec{p} son Hermíticas. Las componentes cartesianas se expresan en la forma:

$$L_k = \epsilon_{ijk} r_i p_j = -i\hbar \epsilon_{ijk} x_i \frac{\partial}{\partial x_j} \tag{2}$$

con $i, j, k = 1, 2, 3$. Cabe notar que el momento angular tiene unidades de \hbar .

Se omitirá el símbolo $\hat{}$ pero se sobreentiende que son operadores en la mecánica cuántica. El conjunto de $\{L_1, L_2, L_3\}$ son la base de un espacio vectorial de vectores. Definiendo

*remartinezm@unal.edu.co

un producto entre los vectores se puede contruir un algebra sobre el espacio vectorial de los L_i de la forma:

$$[\ , \] : V \otimes V \longrightarrow V \qquad [L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad (3)$$

Es un ejercicio mostrar que dicha algebra es consistente con

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (4)$$

para lo cual es necesario usar la identidad

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (5)$$

El operador $L^2 = \sum_i L_i L_i = L_i L_i$ conmuta con los elementos L_i de la base del espacio vectorial, i.e.

$$\begin{aligned} [L^2, L_j] &= [L_i L_i, L_j] = L_i [L_i, L_j] + [L_i, L_j] L_i \\ &= i\hbar\epsilon_{ijk} \{L_i L_k + L_k L_i\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Definamos los operadores escalera L_{\pm} los cuales nos permiten movernos sobre el espacio de representación del álgebra de la siguiente forma:

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (7)$$

los operadores L_{\pm} , se podría ver como un cambio de base en el espacio vectorial de los operadores de momento angular i.e. $\{L_x, L_y\} \longrightarrow \{L_+, L_-\}$ donde la primera base estaría dada por operadores hermíticos y la segunda no son hermíticos, pues $L_{\pm}^{\dagger} = L_{\mp}$. En la nueva base L^2 se puede escribir en la forma

$$L^2 = \frac{1}{2} (L_+ L_- + L_- L_+) + L_z^2 \quad (8)$$

En la nueva base, el álgebra de *Lie* se puede escribir como:

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z, \quad [L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm \quad (9)$$

donde

$$[L^2, L_\pm] = 0$$

El operador L^2 conmuta con todo el álgebra y se llama invariante de *Casimir*. El conjunto de operadores que conmutan entre si forman una subálgebra y se puede escoger como:

$$\{L^2, L_z\} \quad (10)$$

Por tanto, deben tener autofunciones comunes, las cuales las vamos a denotar con su respectivo autovalor. Para evitar que los autovalores no tengan unidades usamos \hbar :

$$\begin{aligned} L^2 |\alpha, \beta\rangle &= \hbar^2 \alpha |\alpha, \beta\rangle \\ L_z |\alpha, \beta\rangle &= \hbar \beta |\alpha, \beta\rangle \end{aligned} \quad (11)$$

Usando ahora la relación $[L^2, L_\pm] = 0$, obtenemos

$$L^2 L_\pm |\alpha, \beta\rangle = L_\pm L^2 |\alpha, \beta\rangle = \hbar^2 \alpha L_\pm |\alpha, \beta\rangle \quad (12)$$

es decir el nuevo vector $L_\pm |\alpha, \beta\rangle$ tiene autovalores α . El autovalor de $L_\pm |\alpha, \beta\rangle$ respecto a L_z es

$$\begin{aligned} L_z L_\pm |\alpha, \beta\rangle &= (L_\pm L_z \pm \hbar L_\pm) |\alpha, \beta\rangle \\ &= \hbar (\beta \pm 1) L_\pm |\alpha, \beta\rangle \end{aligned} \quad (13)$$

es decir el vector $L_\pm |\alpha, \beta\rangle$ tiene autovalor de L_z igual a $\hbar (\beta \pm 1)$.

Decimos que cuando los operadores L_{\pm} actúan sobre el vector $|\alpha, \beta\rangle$ sube o baja en una unidad el autovalor de L_z . Como el vector lo denotamos según los autovalores de L^2 y L_z , entonces definimos:

$$L_{\pm} |\alpha, \beta\rangle = c_{\alpha, \beta}^{\pm} |\alpha, \beta \pm 1\rangle \quad (14)$$

el valor α no cambia, porque $[L^2, L_{\pm}] = 0$.

Veamos alguna propiedad de α y β que se derivan del algebra,

$$\begin{aligned} \langle \alpha, \beta | L^2 - L_z^2 | \alpha, \beta \rangle &= \langle \alpha, \beta | L_x^2 + L_y^2 | \alpha, \beta \rangle \\ &= \hbar^2 (\alpha - \beta^2) \geq 0 \end{aligned} \quad (15)$$

donde $|\alpha, \beta \pm 1\rangle$ están normalizados y $L^2 - L_z^2$ es un operador definido positivo. Por tanto,

$$\alpha - \beta^2 \geq 0 \quad i.e. \quad -\sqrt{\alpha} \leq \beta \leq \sqrt{\alpha} \quad (16)$$

es decir β esta acotado por $\pm\sqrt{\alpha}$. Entonces existe un valor máximo β_{max} tal que

$$L_+ |\alpha, \beta_{max}\rangle = 0 \quad (17)$$

dado que L_+ sube en una unidad el valor de L_z . En este caso β_{max} es el máximo de L_z .

De igual manera al aplicar L_-

$$L_- |\alpha, \beta_{min}\rangle = 0 \quad (18)$$

Aplicando a la primera identidad L_- y usando el álgebra de Lie $L_- L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z$ se obtiene:

$$\begin{aligned} L_- L_+ |\alpha, \beta_{max}\rangle &= (L^2 - L_z^2 - \hbar L_z) |\alpha, \beta_{max}\rangle \\ &= \hbar^2 (\alpha - \beta_{max}^2 - \beta_{max}) |\alpha, \beta_{max}\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (19)$$

De igual forma aplicando L_+ a la segunda identidad y usando $L_+L_- = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z$, se obtiene

$$\begin{aligned} L_+L_- |\alpha, \beta_{min}\rangle &= \hbar^2 (\alpha - \beta_{min}^2 + \beta_{min}) |\alpha, \beta_{min}\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \tag{20}$$

Resumiendo

$$\begin{aligned} \alpha &= \beta_{max} (\beta_{max} + 1) \\ &= \beta_{min} (\beta_{min} - 1) \end{aligned} \tag{21}$$

es decir $\beta_{max} = -\beta_{min} \equiv l$.

Por tanto, $\boxed{\alpha = l(l+1)}$ el cual corresponde al autovalor de L^2 . En lugar de β usamos m para designar el autovalor de L_z . Como los autovalores de L_z varian en una unidad, entonces tenemos $\boxed{2l+1}$ valores para m i.e.

$$-l \leq m \leq l \tag{22}$$

El problema de autovalores de momento angular lo expresamos en la forma:

$$\begin{aligned} L^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ L_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle \end{aligned} \tag{23}$$

Al aplicar los operadores escalera, los nuevos estados se deben normalizar i.e. $c_{\alpha, \beta}^{\pm}$.

Para hallar la misma, apliquemos el conjunto al ket i.e.

$$(L_{\pm} |l, m\rangle)^{\dagger} = \langle l, m | L_{\mp} = \langle l, m \pm 1 | c_{l, m}^{\pm *} , \tag{24}$$

por tanto,

$$\begin{aligned}
\langle l, m | L_{\mp} L_{\pm} | l, m \rangle &= c_{l,m}^{\pm *} c_{l,m}^{\pm} \langle l, m \pm 1 | l, m \pm 1 \rangle \\
&= |C_{l,m}|^2 \\
&= \langle l, m | L^2 - L_z^2 \mp \hbar L_z | l, m \rangle \\
&= \hbar^2 (l(l+1) - m^2 \mp m)
\end{aligned} \tag{25}$$

es decir

$$C_{l,m}^{\pm} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m^2 \mp m} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \mp 1)} \tag{26}$$

Por tanto, los operadores escalares actúan como:

$$L_{\pm} |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} |l, m \pm 1\rangle \tag{27}$$

El espacio vectorial de funciones con momento angular l está formado por los vectores base,

$$\{|l, -l\rangle, |l, -l+1\rangle, \dots, |l, 0\rangle, \dots, |l, l-1\rangle, |l, l\rangle\} \tag{28}$$

y la relación de completez se expresa como:

$$\sum_{m=-l}^l |l, m\rangle \langle l, m| = \iota \tag{29}$$

Para escribir los operadores L^2 , L_z en coordenadas esféricas, consideremos el cambio de base i.e. :

ILUSTRACION.1 – Pag – 06

$$\begin{aligned}
x &= r \sin(\theta) \cos(\varphi) & \hat{e}_{\theta} \times \hat{e}_{\varphi} &= \hat{e}_r \\
y &= r \sin(\theta) \sin(\varphi) & \hat{e}_{\varphi} \times \hat{e}_r &= \hat{e}_{\theta} \\
z &= r \cos(\theta) & \hat{e}_r \times \hat{e}_{\theta} &= \hat{e}_{\varphi}
\end{aligned} \tag{30}$$

Un elemento de línea se expresa como:

$$d\vec{l} = dr \hat{e}_r + r \sin(\theta) d\varphi \hat{e}_\varphi + r d\theta \hat{e}_\theta \quad (31)$$

y el elemento de volumen es

$$\begin{aligned} dV &= dr \, r \sin(\theta) d\varphi \, r d\theta \\ &= r^2 \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= r^2 d\Omega \end{aligned} \quad (32)$$

donde el diferencial de área es

$$dA = r^2 d\Omega \quad (33)$$

los vectores \vec{r} y $\vec{\nabla}$ en coordenadas esféricas se escriben en la forma

$$\begin{aligned} \vec{r} &= r \hat{e}_r \\ \vec{\nabla} &= \hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{e}_\theta + \hat{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (34)$$

por tanto:

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \vec{r} \times \vec{p} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla} \\ &= -i\hbar \left\{ \hat{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\hat{e}_\theta}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\} \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} L_z &= -i\hbar (x \partial_y - y \partial_x) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L^2 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \end{aligned} \quad (36)$$

Es fácil demostrar que los armónicos esféricos son las autofunciones $|l, m\rangle$ de L^2 y L_z i.e.

$$\begin{aligned} L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (37)$$

donde los armónicos esféricos para $l = 0, 1$ son:

$$\begin{aligned}
 Y_{00}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} & Y_{00}(x, y, z) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
 Y_{10}(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta & Y_{10}(x, y, z) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \\
 Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta & Y_{1\pm 1}(x, y, z) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x \pm iy}{r}
 \end{aligned} \tag{38}$$

La relación de ortogonalidad para los armónicos esféricos está dada por:

$$\int_0^1 \int_{-1}^1 Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega = \sqrt{2l+1} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \tag{39}$$

1.1 Momento de Espín

En 1922, *Stern-Gerlach* realizaron un experimento con átomos de plata, los cuales tienen 47 electrones y en el último nivel de energía $5S$ ($l = 0$) hay un electrón sin aparear, los demás electrones están apareados.

Goudsmit y Uhlenbeck postularon la existencia del espín del electrón como un momento angular intrínseco postulando la energía de interacción con un campo \vec{B} como:

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2mc} g_s \vec{S} \cdot \vec{B} \tag{40}$$

donde $(-e)$ y m es la carga y masa del electrón y g_s se conoce como factor de *Landé* y su valor experimental y predicho por la ecuación de *Dirac* es:

$$g_s = 2 \tag{41}$$

Para el átomo de hidrógeno, el momento angular satisface la condición

$$l < n \tag{42}$$

donde n es el número cuántico principal. Para $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ cada valor de m toma $2l+1$ valores i.e. $m = 1, 3, 5, 7, 9, 11$; pero cada nivel de energía puede tener un electrón en dos estados de espín, $S = 1/2$, $m_S = \pm \frac{1}{2}$. Por tanto, para el estado cuántico nlm , en particular para el elemento Plata con 4 electrones, la distribución de electrones es de la forma:

$$\begin{aligned}
 &1s^2 \\
 &2s^2 \quad 2p^6 \\
 &3s^2 \quad 3p^6 \quad 3d^{10} \\
 &4s^2 \quad 4p^6 \quad 4d^{10} \\
 &5s^2
 \end{aligned} \tag{43}$$

donde las letras s, p, d representan los números cuánticos de momento angular $l = 0, 1, 2$. Todos los niveles de energía de la Plata están llenos y ?? los electrones están apareados $\uparrow\downarrow$ en sus respectivos niveles. Se queda un solo electrón en el último nivel de energía, sin aparear. La nube electrónica en su conjunto se comporta como un sistema de espín $1/2$. Cuando se lanza el chorro de átomos de Plata contra el dispositivo de *Stern-Gerlach*, el campo magnético desvía la plata en direcciones diferentes según sea el estado cuántico de espín del último electrón i.e. $1/2$ ó $-1/2$.

Como el espín del electrón tiene dos componentes, están se puedan representar como:

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \tag{44}$$

si suponemos que

$$S_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad S_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{45}$$

entonces

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (46)$$

es decir, los autovalores de S_z serían $m_z = \pm \frac{\hbar}{2}$. En general, definimos las componentes del espín en la forma:

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad (47)$$

Usando las propiedades de las matrices de *Pauli* se puede demostrar que:

$$[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k \quad (48)$$

además

$$\vec{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_i \sigma_i = \frac{3}{4} \hbar^2 I \quad (49)$$

Por tanto, usamos los operadores $\{S^2, S_z\}$ para que construyan los espacios de espín i.e.

$$\begin{aligned} S^2 |s, m_s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle & s &= 1/2 \\ S_z |s, m_s\rangle &= \hbar m_s |s, m_s\rangle & m_s &= \pm 1/2 \end{aligned} \quad (50)$$

El espín obedece un álgebra de *Lie* exactamente igual a la del momento angular, y por tanto, el espacio $|s, m_s\rangle$ hereda todas las propiedades i.e.

$$\begin{aligned} S_{\pm} |s, m\rangle &= \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle \\ \sum_{m_s=\pm 1/2} |s, m_s\rangle \langle s, m_s| &= \mathbb{I} \end{aligned} \quad (51)$$

donde g_s se conoce como el factor de Landé y el valor experimental para el electrón es $g_s = 2$. Dicho valor fue predicho por la ecuación de *Dirac*, en el limite no relativista.

El espín del electrón tiene dos componentes y estas se pueden representar en la base $\left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$.

Por tanto el operador de espín asociado a la componente z se puede representar mediante

la matriz de *Pauli* σ_z i.e.

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad i.e. \quad S_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad S_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (52)$$

los autovalores de S_z son $m_z = \pm \frac{\hbar}{2}$. En general definimos la componente i del espín en la forma:

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \quad (53)$$

usando las propiedades de las matrices de *Pauli* $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k$ podemos escribir

$$[S_i, S_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} S_k \quad (54)$$

$$\vec{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} \sigma_i \sigma_i = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{I}_{2 \times 2}$$

usamos los operadores $\{S^2, S_z\}$ como los que conmutan entre si, y expresamos la ecuación de autovalores

$$S^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle; \quad S_z |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle \quad (55)$$

para el caso donde $s = 1/2$ entonces $s(s+1) = 3/4$ y $m_s = \pm 1/2$.

De igual forma:

$$S_{\pm} |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle \quad (56)$$

$$\mathbb{I}_{2 \times 2} = \sum_{m_s = \pm 1/2} |s, m_s\rangle \langle s, m_s|$$

1.2 Cambio de Base Para el Espín

ILUSTRACION.2 – Pag – 11

Se rota el sistema coordenado (θ, φ) el vector \vec{S}_z apunta en la dirección z' i.e. \vec{S}'_z . La proyección de \vec{S}'_z en los ejes coordenados x, y, z es:

$$\vec{S}'_z = \sin \theta \cos \varphi \vec{S}_x + \sin \theta \sin \varphi \vec{S}_y + \cos \theta \vec{S}_z \quad (57)$$

usando la representación de matrices de *Pauli* 2×2 , tenemos:

$$\vec{\sigma}'_z = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (58)$$

En el sistema x, y, z la base de espín-autoestados de S_z es $|\frac{1}{2}, m\rangle = \{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle\}$. En el sistema de referencia x', y', z' será un autoestado de σ'_z la cual es combinación lineal de $\{|\frac{1}{2}, m\rangle\}$ Debemos resolver el problema de autoestados

$$\sigma'_z \left| \frac{1}{2}, \alpha \right\rangle = \lambda_\alpha \left| \frac{1}{2}, \alpha \right\rangle \quad (59)$$

donde $\lambda_\alpha = \pm 1$ indicando espín arriba ó abajo en el sistema x', y', y' .

Usando la relación de completez y multiplicando a la izquierda por $\langle m' |$, obtenemos:

$$\sum_{m=1/2, -1/2} \langle m' | \sigma'_z | m \rangle \langle m | \alpha \rangle = \lambda_\alpha \langle m | \alpha \rangle \quad (60)$$

donde

$$\begin{aligned} \langle m' | \sigma'_z | m \rangle &= \sin \theta \cos \varphi \langle m' | \sigma_x | m \rangle + \sin \theta \sin \varphi \langle m' | \sigma_y | m \rangle + \cos \theta \langle m' | \sigma_z | m \rangle \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta e^{i\varphi} \\ \sin \theta e^{-i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}_{m, m'} \end{aligned} \quad (61)$$

donde la matriz representa la entrada m', m en la base del sistema coordenado x, y, z . El producto $\langle m|\alpha\rangle$ es la proyección del vector $|\alpha\rangle$ en x', y', z' en la base $|m\rangle$ de espín en el sistema coordenado x, y, z' , es decir, hay dos proyecciones $\langle \frac{1}{2}|\alpha\rangle, \langle -\frac{1}{2}|\alpha\rangle$. Expresado de otra forma, el espín arbitrario S'_z tendrá dos componentes de espín en el sistema x, y, z' , espín arriba - espín abajo. Por si aplican la rotación usamos

$$\langle m|\alpha\rangle = c_{\pm} \quad (62)$$

cuando $m = 1/2, -1/2$.

Retomando ahora la ecuación de autovalores, tenemos

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \lambda_{\alpha} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (63)$$

Para hallar λ_{α} aplicamos $\det\{\mathbb{M} - \lambda_{\alpha}\mathbb{I}\} = 0$, lo cual da

$$(\cos \theta - \lambda_{\alpha})(\cos \theta + \lambda_{\alpha}) + \sin^2 \theta = 0 \quad (64)$$

Por tanto,

$$\lambda_{\alpha} = \pm 1 \quad (65)$$

Para hallar el autovalor de $\lambda_{\alpha} = +1$, usamos la ecuación lineal que aparece del problema de autovalores i.e.,

$$\cos \theta c_+ + \sin \theta e^{-i\varphi} c_- = \lambda_{\alpha} c_+ \quad (66)$$

$$\frac{c_+}{c_-} = \frac{\sin \theta e^{-i\varphi}}{1 - \cos \theta} = \frac{\cos \theta/2 e^{-i\varphi/2}}{\sin \theta/2 e^{i\varphi/2}} = \frac{\langle 1|1\rangle}{\langle -1|1\rangle}$$

de igual forma para $\lambda_\alpha = -1$

$$\begin{aligned} & \langle m|\lambda \rangle \\ \frac{c_+}{c_-} &= -\frac{\sin \theta}{1 + \cos \theta} \frac{e^{-i\varphi}}{e^{i\varphi/2}} = -\frac{\sin \theta/2}{\cos \theta/2} \frac{e^{-i\varphi/2}}{e^{i\varphi/2}} = \frac{\langle 1|-1 \rangle}{\langle -1|-1 \rangle} \end{aligned} \quad (67)$$

Por tanto, la matriz cambio de base es

$$\begin{aligned} \langle \alpha|m \rangle &= U_{\alpha m} = \begin{pmatrix} m = +, \lambda = 1 & m = -, \lambda = 1 \\ m = +, \lambda = 2 & m = -, \lambda = 2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta/2 e^{-i\varphi/2} & \sin \theta/2 e^{i\varphi/2} \\ -\sin \theta/2 e^{-i\varphi/2} & \cos \theta/2 e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta/2 & \sin \theta/2 \\ \sin \theta/2 & \cos \theta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \\ &= (\cos \theta/2 + i\sigma_y \sin \theta/2) (\cos \theta/2 - i\sin \theta/2 \sigma_z) \end{aligned} \quad (68)$$

$$\boxed{U = e^{i\frac{\theta}{2}\sigma_y} e^{-i\frac{\varphi}{2}\sigma_z}}$$

1.3 Adición de Momento Angular

Consideremos un sistema ó sistemas con momentos angulares \vec{J}_1, \vec{J}_2 los cuales deben satisfacer la condición

$$[\vec{J}_1, \vec{J}_2] = 0 \quad (69)$$

Los espacios vectoriales donde actúan están definidos de la forma:

$$\begin{aligned} J_1^2 |j_1, m_1\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle & J_2^2 |j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_2, m_2\rangle \\ J_z |j_1, m_1\rangle &= \hbar m_1 |j_1, m_1\rangle & J_z |j_2, m_2\rangle &= \hbar m_2 |j_2, m_2\rangle \end{aligned} \quad (70)$$

donde $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$ y $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$, es decir, m_1 toma $2j_1 + 1$ valores y m_2 toma $2j_2 + 1$ valores. Diremos que el sistema completo esta formado por un espacio dimensional $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ de la forma

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (71)$$

la cual llamaremos la base antigua. EL álgebra de *Lie* del sistema de dos momentos angulares es

$$\begin{aligned} [J_{1i}, J_{1j}] &= i\hbar \epsilon_{ijk} L_{1k} \quad ; \quad [J_{2\alpha}, J_{2\beta}] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\rho} L_{2\rho} \\ [J_{1i}, J_{2\beta}] &= 0 \end{aligned} \quad (72)$$

usamos diferente etiqueta porque $J_1 = L$ y en este caso $i = x, y, z$ y $J_2 = S$ y en este caso $\alpha = 1, 2, 3$; pero son índices de espacios completamente diferentes. En el primer caso hablamos de espacios representados por armónicos esféricos, en el segundo caso serían espacios de espín.

Los ejemplos típicos de sistemas de dos electrones como en el átomo de Helio, dos nucleones como un átomo de Deuterio ó un átomo de Hidrógeno donde el electrón tiene momento angular orbital y espín. Para el caso del átomo de Helio y el núcleo de Deuterio el espacio de representación se ?? igual porque los dos corresponden a un poslime??? de espín $1/2$ y los vectores de momento angular son $s_1^2 s_{1z}$ y $s_2^2 s_{1z}$. Los espacios son

$$\left\{ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}_{e_1} \quad \left\{ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}_{e_2} \quad (73)$$

Para el primer espacio (e_1) estamos denotando el estado del electrón con espín arriba y espín abajo. Igualmente para e_2 . El espacio total del sistema es de dimensión 4 y lo denotamos como

$$|s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle \quad (74)$$

lo llamamos la base antigua. El sistema de dos electrones del átomo de Helio ó el núcleo de Deuterio, como un todo, puede estar con espín total $+1, 0$ y cada estado de espín tiene su proyección sobre la componente z . Entonces tendríamos un espacio de la forma:

$$|j, m\rangle \longrightarrow \{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\} \oplus \{|0, 0\rangle\} \quad (75)$$

y a esta la llamaremos la base nueva. La dimensionalidad del espacio no ha cambiado, lo que se modificó fue el espacio vectorial y el momento angular total. Pasamos de estados de espín $1/2$ a estados de espín *uno* y *cero*. Similar ocurre para un electrón en el átomo de Hidrógeno con momento angular L y espín S , los estados son $|l, m\rangle$ y $|\frac{1}{2}, m_s\rangle$, pero el espín total puede ser $l \pm \frac{1}{2}$. Para simplificar la notación, suponemos que tenemos espacios de dimensión j_1 y j_2 entonces

$$|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle = |m_1 m_2\rangle \quad (76)$$

es decir, usamos únicamente las componentes de z de momento angular. Por tanto este es un espacio de dimensión $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Para esta base, el conjunto de operadores que conmutan entre sí son:

$$\{J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}\} \quad (77)$$

y la rotación de completez se escribe en la forma:

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2| = \mathbb{I} \quad (78)$$

construyamos la teoría de momento angular en la nueva base. Definimos el momento angular total como:

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \quad (79)$$

donde

$$J^2 = \left(\vec{J}_1 + \vec{J}_2 \right)^2 \quad (80)$$

$$J_z = J_{1z} + J_{2z}$$

Definimos nuestro nuevo conjunto de operadores que conmutan entre si como

$$\{\vec{J}^2, J_z, \vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2\} \quad (81)$$

donde es fácil demostrar teniendo en cuenta que $[\vec{J}_1, \vec{J}_2] = 0$, $\vec{J}^2 = \vec{J}_1^2 + \vec{J}_2^2 + 2\vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2$, además de los siguientes conmutadores: $[\vec{J}^2, J_z] = [\vec{J}^2, \vec{J}_1^2] = [\vec{J}^2, \vec{J}_2^2] = [J_z, \vec{J}_1^2] = [J_z, \vec{J}_2^2] = [\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2] = 0$.

Como tenemos un nuevo conjunto de operadores que conmutan entre sí, entonces debe existir una autofunción de los nuevos 4 operadores. Supongamos que existe y omitimos j_1 j_2 en la notación

$$|j_1, j_2; j, m\rangle \longrightarrow |j, m\rangle \quad (82)$$

Por tanto, se puede realizar el cambio de base del sistema antiguo al nuevo sistema y viceversa, i.e., $\{|j_1, m_1\rangle, |j_2, m_2\rangle\} \longleftrightarrow \{|j, m\rangle\}$. Además deben ser espacios de igual dimensionalidad i.e.

$$|m_1, m_2\rangle \longrightarrow |j, m\rangle \quad (83)$$

donde la dimensión del espacio $|j, m\rangle$ debe ser igual a $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. El álgebra de *Lie* asociada a $\{J^2, J_z\}$ se puede escribir en la forma

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k \quad (84)$$

y los autovalores

$$J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad (85)$$

$$J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

donde

$$\begin{aligned} -j &\leq m \leq j \\ \sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} \sum_{m=-j}^j |j, m\rangle \langle j, m| &= \mathcal{I} \end{aligned} \quad (86)$$

Por lo tanto, necesitamos hallar j_{min} y j_{max} tal que

$$\sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} \sum_{m=-j}^j 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (87)$$

Los elementos de la matriz cambio de base $|m_1, m_2\rangle \leftrightarrow |j, m\rangle$ se llaman coeficientes de Clebsch- Gordan. Usando la relación de completez en la base antigua y multiplicando por $|j, m\rangle$, tenemos

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |m_1, m_2\rangle \langle m_1, m_2 | j, m\rangle \quad (88)$$

con los coeficientes de *Clebsch - Gordan* $\langle m_1, m_2 | j, m\rangle$ se construye una matriz unitaria de dimensión $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \otimes (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Para demostrar la unitariedad multiplicamos por $\langle j', m' |$ la relación anterior, donde $\langle j' m' | j m\rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}$ i.e.

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j' m' | m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | j m\rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \quad (89)$$

Para $j = j'$ y $m = m'$ y teniendo en cuenta que $\langle j m | m_1 m_2\rangle^* = \langle m_1 m_2 | j m\rangle$ entonces

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} |\langle m_1 m_2 | j m\rangle|^2 = \mathcal{I}, \quad (90)$$

para el caso $j \neq j'$ y $m \neq m'$ se tiene:

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j'm'|m_1m_2\rangle \langle m_1m_2|jm\rangle = 0, \quad (91)$$

es decir, dichos coeficientes forman una matriz unitaria. El producto entre las mismas filas es uno y el producto entre filas diferente es cero.

Por lo tanto, la matriz mostrada formada por los elementos $\langle m_1m_2|jm\rangle$ es unitaria.

Para realizar la transformación inversa tomamos la relación de completez en la base nueva y multiplicamos por $|m_1m_2\rangle$,

$$|m_1m_2\rangle = \sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} \sum_{m=-j}^j |jm\rangle \langle jm|m_1m_2\rangle \quad (92)$$

Para hallar j_{max} usamos la relación $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ y multiplicamos por el bra y ket respectivos, $\langle m_1m_2|$ y $|jm\rangle$, a ambos lados de la ecuación, es decir:

$$\langle m_1m_2| J_z - J_{1z} - J_{2z} |jm\rangle = 0 \quad (93)$$

$$(m - m_1 - m_2) \langle m_1m_2|jm\rangle = 0$$

si el elemento de matriz es diferente de cero, $\langle m_1m_2|jm\rangle \neq 0$, entonces $m = m_1 + m_2$, de lo contrario $\langle m_1m_2|jm\rangle = 0$ entonces $m \neq m_1 + m_2$, es decir, son dos vectores ortogonales.

Por otro parte, el valor máximo que puede tomar m es:

$$\begin{aligned} m_{max} &= m_{1max} + m_{2max} \\ &= j_1j_2 \\ &= j \end{aligned} \quad (94)$$

Para hallar el valor mínimo de j imponemos la condición de dimensionalidad del espacio

de base antiguo, la cual es conocida,

$$\begin{aligned}
 (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) &= \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} \sum_{m=-j}^j 1 = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) \\
 &= 2 \times \frac{1}{2} (j_{\max} + j_{\min})(j_{\max} - j_{\min} + 1) + j_{\max} - j_{\min} + 1 \\
 &= (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2 \\
 &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)
 \end{aligned} \tag{95}$$

Resolviendo las dos ultimas ecuaciones encontramos que:

$$j_{\min} = |j_1 - j_2| \tag{96}$$

Por tanto, $j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$.

1.4 Sistema de dos Electrones

Volviendo al sistema ya mencionado, la base antigua se expresa como:

$$|m_1 m_2\rangle \longrightarrow \left\{ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle, \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right\} \tag{97}$$

Para la base nueva tenemos entonces

$$\begin{aligned}
 j &= \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| = 0, \quad \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \\
 &= 0, 1
 \end{aligned} \tag{98}$$

entonces el espacio total está dado por

$$|jm\rangle \longrightarrow \{|0\ 0\rangle, |1\ 1\rangle, |1\ 0\rangle, |1\ -1\rangle\} \tag{99}$$

Para expandir $|0\ 0\rangle$ en función de la base antigua, usamos la relación de completez

$$|0\ 0\rangle = \sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | 0\ 0\rangle \tag{100}$$

De igual forma

$$|1\ 0\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | 1\ 0\rangle \quad (101)$$

Para que el coeficiente de *Clebsh-Gordan* sea diferente de cero, es necesario

$$m_1 + m_2 = m = 0 \quad (102)$$

la única solución sería

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} | 0\ 0 \right\rangle, \left\langle -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} | 0\ 0 \right\rangle \\ & \left\langle \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} | 1\ 0 \right\rangle, \left\langle -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} | 1\ 0 \right\rangle \end{aligned} \quad (103)$$

y de la suma $\sum_{m_1} \sum_{m_2}$, solamente dos términos son diferentes de cero:

$$\begin{aligned} |0\ 0\rangle &= \left| \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \right\rangle \left\langle \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} | 0\ 0 \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} | 0\ 0 \right\rangle \\ |1\ 0\rangle &= \left| \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \right\rangle \left\langle \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} | 1\ 0 \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} | 1\ 0 \right\rangle \end{aligned} \quad (104)$$

como tenemos un cambio de base $\{|\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2} \ \frac{1}{2}\rangle\}$ por $\{|0\ 0\rangle, |1\ 0\rangle\}$ esto se representa

por la matriz unitaria 2×2 , i.e.:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} | 0\ 0 \rangle & \langle -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} | 0\ 0 \rangle \\ \langle \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} | 1\ 0 \rangle & \langle -\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} | 1\ 0 \rangle \end{pmatrix} \quad (105)$$

Para los $|1\ 1\rangle$ y $|1\ -1\rangle$ los *Clebsh-Gordan* cambio de base son $\langle m_1 m_2 | 1\ 1\rangle$ y $\langle m_1 m_2 | 1\ -1\rangle$,

y las condiciones diferentes de cero son

Las soluciones posibles son, respectivamente,

$$m_1 = m_2 = \frac{1}{2} \quad m_1 = m_2 = -\frac{1}{2} \quad (107)$$

Por tanto:

$$\begin{aligned}
 |1\ 1\rangle &= \sum_{m_1} \sum_{m_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | 1\ 1\rangle = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \\
 |1\ -1\rangle &= \sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | 1\ -1\rangle = \left| -\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \right\rangle
 \end{aligned} \tag{108}$$

donde el coeficiente diferente de cero implica

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} | 1\ 1 \right\rangle = 1; \quad \left\langle -\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} | 1\ 1 \right\rangle = 1 \tag{109}$$

El conjunto $\{|1\ 1\rangle, |1\ 0\rangle, |1\ -1\rangle\}$ forman un espacio de dimensión 3 simétrico y $\{|0\ 0\rangle\}$ es un espacio unidimensional de funciones antisimétricas:

$$\begin{aligned}
 |1\ 1\rangle &= \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \\
 |1\ 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right) \quad |0\ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right) \\
 |1\ -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left| -\frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \right\rangle
 \end{aligned} \tag{110}$$

2 Adición del Momento Angular y Espín

Para el momento angular consideremos el espacio dado por $j_1 = l = 1$ con $m_1 = m = +1, 0, -1$. Para el espín consideramos $j_2 = s = \frac{1}{2}$ y $m_1 = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$. El espacio asociado al momento angular $|l\ m\rangle = \{|11\rangle, |10\rangle, |1\ -1\rangle\}$ y para el espín $|s\ m_s\rangle = \left\{ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$.

El primero es de dimensión 3 y el espín de dimensión 2.

Es decir:

$$\begin{aligned}
 |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle &= |m\ m_s\rangle = \left\{ \left| 1 \frac{1}{2} \right\rangle, \left| 1 \ -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| 0 \frac{1}{2} \right\rangle, \left| 0 \ -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| -1 \frac{1}{2} \right\rangle, \left| -1 \ -\frac{1}{2} \right\rangle \right\} \\
 3 \otimes 2 &= 6
 \end{aligned} \tag{111}$$

Haciendo el cambio de base a $|j m\rangle$ tenemos que j toma los valores

$$\begin{aligned} j &= |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2 \\ &= \frac{1}{2}, \frac{3}{2}. \end{aligned} \tag{112}$$

Teniendo en cuenta la componente z de cada subespacio, tenemos:

$$\begin{aligned} |j m\rangle \longrightarrow & \left\{ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle, \right\} \cup \left\{ \left| \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle \right\} \\ 6 &= 2 \oplus 4 \end{aligned} \tag{113}$$

usando el argumento de conservación de J_z , $m = m_1 + m_2$, podemos establecer cuales *Clebsch-Gordan* son diferente de cero. Consideremos los estados en la nueva base donde $m = \frac{1}{2}$,

$$|jm\rangle \longrightarrow \left\{ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right\}. \tag{114}$$

En la base antigua $m = m_1 + m_2 = \frac{1}{2}$ tiene dos soluciones

$$|m_1 m_2\rangle \longrightarrow \left\{ \left| 1 - \frac{1}{2} \right\rangle, \left| 0 \frac{1}{2} \right\rangle \right\}. \tag{115}$$

Usando la relación de completez

$$|jm\rangle = \sum_{m_1=-1}^1 \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | jm\rangle \tag{116}$$

el cambio de base sería:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| 1 - \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1 - \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + \left| 0 \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 0 \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| 1 - \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1 - \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + \left| 0 \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 0 \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right. \end{aligned} \tag{117}$$

Por ser una matriz 2×2 se representa como una rotación con $\cos y$, $\sin y$ conociendo solo un elemento, los otros quedan determinados.

Para los casos de $m = -\frac{1}{2}$ se hace un razonamiento similar:

$$|jm\rangle \longrightarrow \left\{ \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right\}, \quad |m_1 m_2\rangle \longrightarrow \left\{ \left| -1 \frac{1}{2} \right\rangle, \left| 0 - \frac{1}{2} \right\rangle \right\} \quad (118)$$

Por tanto:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| 0 - \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 0 - \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle + \left| -1 \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle -1 \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| 0 - \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 0 - \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle + \left| -1 \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle -1 \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \end{aligned} \quad (119)$$

Por ser rotaciones 2×2 con uno solo, se determinan los otros.

Los otros, transforman como:

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right\rangle &= \left| 1 \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle &= \left| -1 - \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (120)$$

En lugar de calcular 21 elementos de la matriz unitaria 6×6 , solo debemos calcular dos *Clebsch-Gordan*.

2.1 Cálculo de Coeficientes de Clebsch-Gordan para \vec{L} y \vec{S}

Tomando en cuenta la acción de los operadores escalera la cual sube y baja en una unidad la componente z del momento angular

$$J_{\pm} |jm\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |jm \pm 1\rangle \quad (121)$$

y aplicandola al cambio de base,

$$J_{\pm} |jm\rangle = (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1} \sum_{m_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | jm \rangle \quad (122)$$

obtenemos

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

$$(123)$$

como m_1 y m_2 son variables mudas, realizamos las siguientes definiciones:

- En el primer término: $m_1 \longrightarrow m'_1 \mp 1$, $m_2 \longrightarrow m'_2$
- En el segundo término: $m_1 \longrightarrow m'_1$, $m_2 \longrightarrow m'_2 \mp 1$

Por tanto:

$$\begin{aligned} \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j \ m \pm 1\rangle &= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \{ \sqrt{(j_1 \mp m'_1 + 1)(j_1 \pm m'_1)} |m'_1 m'_2\rangle \langle m'_1 \mp 1 \ m'_2 | jm \rangle \} \\ &+ \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \{ \sqrt{(j_2 \mp m'_2 + 1)(j_2 \pm m'_2)} |m'_1 m'_2\rangle \langle m'_1 \ m'_2 \mp 1 | jm \rangle \} \end{aligned} \quad (124)$$

Multiplicando por $\langle m_1 m_2 |$ y teniendo en cuenta que $\langle m_1 m_2 | m'_1 m'_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}$, la expresión anterior se puede escribir en términos de la siguiente relación de recurrencia:

$$\begin{aligned} \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle m_1 m_2 | j \ m \pm 1 \rangle &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle m_1 \mp 1 \ m_2 | jm \rangle \\ &+ \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle m_1 \ m_2 \mp 1 | jm \rangle \end{aligned} \quad (125)$$

la cual establece una relación de recurrencia entre diferentes coeficientes de *Clebsch-Gordan*.

Estos coeficientes de *C-G* son diferentes de cero si satisfacen la condición

$$m_1 + m_2 = m \pm 1 \quad (126)$$

Esta relación de recurrencia permite calcular coeficientes de *C-G* a partir de otros conocidos. Estudiemos el cambio de base para $l_1 = l = 1$ y $l_2 = s = \frac{1}{2}$.

En la base antigua, la base está dada por

$$\begin{aligned} |l \ m_l\rangle &= \{ |l \ l\rangle, |l \ l-1\rangle, \dots, |l \ 0\rangle, |l \ -1\rangle, \dots, |l \ -l\rangle \} \\ |s \ m_s\rangle &= \left\{ \left| \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} \ -\frac{1}{2} \right\rangle \right\} \end{aligned} \quad (127)$$

donde se tiene $2(2l + 1)$ funciones para el espacio $|l m_l\rangle \otimes |s m_s\rangle = |m_l m_s\rangle$.

En la base nueva tenemos $j = l - \frac{1}{2}$, $l + \frac{1}{2}$ por tanto la base se expresa como:

$$|jm\rangle = \left\{ \left| l - \frac{1}{2} \ l - \frac{1}{2} \right\rangle, \dots, \left| l - \frac{1}{2} \ -(l - \frac{1}{2}) \right\rangle \right. \\ \left. \left| l + \frac{1}{2} \ l + \frac{1}{2} \right\rangle, \dots, \left| l + \frac{1}{2} \ -(l + \frac{1}{2}) \right\rangle \right\} \quad (128)$$

es decir en la base nueva la dimensión de la base es

$$2(l - \frac{1}{2}) + 1 + 2(l + \frac{1}{2}) + 1 = 2(2l + 1). \quad (129)$$

Consideremos el cambio de base para el espacio $j = l + \frac{1}{2}$, i. e., $\{|l + \frac{1}{2} m\rangle\}$. Usemos

la relación de recurrencia aplicando J_- y considerando el espín del electrón arriba, i. e.,

$m_2 = \frac{1}{2}$. Por tanto, los coeficientes de *Clebsch-Gordan* diferentes de cero serán:

Al considerar la relación de recurrencia para J_- , entonces

$$m_1 + m_2 = m - 1 \quad (130)$$

y teniendo en cuenta que $m_2 = \frac{1}{2}$, entonces

$$m_1 = m - \frac{3}{2}. \quad (131)$$

Reemplazando $m \rightarrow m + 1$ entonces:

$$m_1 + m_2 = m \rightarrow m_1 = m = \frac{1}{2}. \quad (132)$$

Entonces la relación de recurrencia se expresa como:

$$j = l + \frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2}, m_1 = m - \frac{1}{2}, m \rightarrow m + 1 : \quad (133)$$

$$\sqrt{(l + m + \frac{3}{2})(l - m + \frac{1}{2})} \left\langle m - \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} \ m \right\rangle = \sqrt{(l + m + \frac{1}{2})(l - m + \frac{1}{2})} \left\langle m + \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} \ m + 1 \right\rangle \\ + \sqrt{(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1)(\frac{1}{2} - \frac{1}{2})} \left\langle m - \frac{1}{2} \ \frac{3}{2} \middle| l + \frac{1}{2} \ m + 1 \right\rangle$$

$$(134)$$

donde el ultimo término se anula y obtenemos:

$$\left\langle m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} m \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}} \left\langle m + \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} m + 1 \right\rangle \quad (135)$$

si en la anterior relación reemplazamos $m \rightarrow m + 1$, obtenemos:

$$\left\langle m + \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} m + 1 \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{l+m+\frac{5}{2}}} \left\langle m + \frac{3}{2} \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} m + 2 \right\rangle \quad (136)$$

Podemos seguir cambiando $m \rightarrow m + 1$ hasta llegar a $m = l - \frac{3}{2}$, en este caso obtenemos:

$$\left\langle l - 1 \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} l - \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \left\langle l \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} l + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (137)$$

donde $m = l + \frac{1}{2}$ es el máximo valor que puede tomar. De las 3 ultimas ecuaciones, reemplazando, obtenemos:

$$\left\langle m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} m \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l+m+\frac{3}{2}}{l+m+\frac{5}{2}}} \cdots \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \left\langle l \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} l + \frac{1}{2} \right\rangle \quad (138)$$

El coeficiente XX , las componentes z han tomado su máximo valor, i. e., $m_1 + m_2 = m$,

por tanto $|m_1 m_2\rangle = |l \frac{1}{2}\rangle$ lo identificamos con $|lm\rangle = |l + \frac{1}{2} l + \frac{1}{2}\rangle$ i. e.,

$$\left\langle l \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} l + \frac{1}{2} \right\rangle = 1. \quad (139)$$

Por tanto, el coeficiente de *Clebsch-Gordan* toma la forma:

$$\left\langle m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2} m \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l1}}. \quad (140)$$

El estado en la base nueva $|jm\rangle = |l + \frac{1}{2} m\rangle$ debe ser una combinación lineal de la base

antigua $|m_1 m_2\rangle$ tal que $m_1 + m_2 = m$. Como $m_2 = \pm \frac{1}{2}$ entonces $m = m_1 + \frac{1}{2}$, $m = m_1 - \frac{1}{2}$,

lo cual implica:

$$\begin{aligned} \left| l + \frac{1}{2} m \right\rangle &= \left| m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right| l + \frac{1}{2} m \right\rangle \\ &\quad + \left| m + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle m + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| l + \frac{1}{2} m \right\rangle \end{aligned} \quad (141)$$

De igual forma para el estado $|l - \frac{1}{2} m\rangle$

$$\begin{aligned} \left| l - \frac{1}{2} m \right\rangle &= \left| m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right| l - \frac{1}{2} m \right\rangle \\ &\quad + \left| m + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle m + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| l - \frac{1}{2} m \right\rangle \end{aligned} \quad (142)$$

Esto corresponde a un cambio de base $\{|m + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle, |m - \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle\}$ a $\{|l + \frac{1}{2} m\rangle, |l - \frac{1}{2} m\rangle\}$,

la transformación es una matriz unitaria 2×2 , i.e.,

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}. \quad (143)$$

Entonces

$$\cos \alpha = \left\langle m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right| l + \frac{1}{2} m \right\rangle = \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \quad (144)$$

donde:

Por tanto, el cambio de base antigua $\{\}$ por la base nueva $\{\}$ se expresa como:

$$\begin{pmatrix} |l + \frac{1}{2} m\rangle \\ |l - \frac{1}{2} m\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \\ -\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |m - \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ |m + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix} \quad (146)$$

Recordando la notación donde $j_1 \longrightarrow \vec{L}$ y sus autofunciones son los armónicos esféricos y $j_2 \longrightarrow \vec{s}$ cuya base son los espinores de dimensión 2, entonces:

$$|m_1 m_2\rangle = \left| l \frac{1}{2} m_1 m_2 \right\rangle = |l m_1\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} m_2 \right\rangle = Y_l^{m_1}(\theta, \phi) \otimes \chi_s. \quad (147)$$

La ecuación matricial 2×2 se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \left| l \pm \frac{1}{2} m \right\rangle &= \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \chi_+ + \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \chi_- \\ &\equiv y_l^{j=l \pm \frac{1}{2} m} \end{aligned} \quad (148)$$

Usando la representación espinorial $\chi_{\pm} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, entonces:

$$\begin{aligned} y_l^{j=l \pm \frac{1}{2} m}(\theta, \phi) &= \left| l \pm \frac{1}{2} m \right\rangle \\ &= \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (149)$$

donde $y_l^{j=l \pm \frac{1}{2} m}$ es la autofunción de $J^2, J_z, |j m\rangle$. Esta corresponde a la función de onda de un electrón en el átomo de Hidrógeno con momento angular l y espín $\frac{1}{2}$. La parte radial siguen siendo los polinomios de *Laguerre*.

El nuevo número cuántico $j = l \pm \frac{1}{2}$ es la suma de momentos angulares \vec{L} y \vec{S} . La compo-

nente z, m , sería

$$\begin{aligned} -\left(l + \frac{1}{2}\right) &\leq m \leq l + \frac{1}{2} & j = l + \frac{1}{2} \\ -\left(l - \frac{1}{2}\right) &\leq m \leq l - \frac{1}{2} & j = l + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (150)$$

$$\psi_{nlm} \otimes \chi_s \longrightarrow y_l^{j=l\pm\frac{1}{2},m}(\theta, \phi) R_{nl}(r) \quad l = 0, 1, \dots, n-1, \quad (151)$$

donde $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$, $\gamma \equiv \frac{me^2}{\hbar^2 n}$ y

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &= -\sqrt{\frac{(n-l-1)!(2\gamma)^3}{2n[(n+l)!]^3}} (2\gamma r)^l e^{-\gamma r} L_{n+l}^{2l+1}(2\gamma r) \\ L_q^s(x) &= \frac{d^s}{dx^s} \left(e^x \frac{d^q}{dx^s} (e^{-x} x q) \right). \end{aligned} \quad (152)$$

Definimos:

$$\begin{aligned} \text{Radio de Bohr} \quad a_0 &= \frac{2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm} \\ &= 0.519 \\ &= 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \end{aligned} \quad (153)$$

$$\begin{aligned} \text{Constante de estructura fina} \\ \alpha &= \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.037} \end{aligned} \quad (154)$$

Funciones radiales de átomos hidrogenoides con Z protones:

$$\begin{aligned} n=1 \quad l=0 \quad R_{10}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \\ n=2 \quad l=0 \quad R_{20}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Z}{2a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \\ n=2 \quad l=1 \quad R_{21}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \\ n=3 \quad l=0 \quad R_{30}(r) &= 2 \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2} \right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \\ n=3 \quad l=1 \quad R_{31}(r) &= \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{Z}{3a_0} \left(1 - \frac{Zr}{6a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \end{aligned} \quad (155)$$

$$n = 3 \quad l = 2 \quad R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \quad (156)$$

donde $l = 0, 1, 2, 3, \dots = s, p, d, f, \dots$

2.2 Resumen Armónicos Esféricos $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$L^2 |lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle \quad ; \quad L_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle \quad (157)$$

donde

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad ; \quad L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (158)$$

donde

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta \varphi | lm \rangle \longrightarrow |lm\rangle. \quad (159)$$

Sea $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \phi_m(\varphi)$ Entonces de la ecuación para L_z obtenemos:

$$-i \frac{d\phi_m(\varphi)}{d\varphi} = m \phi_m(\varphi) \Rightarrow \phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad \text{con } m \text{ entero.} \quad (160)$$

La ecuación para L^2 da los autovalores:

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta_{lm}(\theta) = \hbar^2 l(l+1) \Theta_{lm}(\theta) \quad (161)$$

Resolviendo esta ecuación:

$$\begin{aligned} \Theta_{lm}(\theta) &\longrightarrow P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) \\ P_l(x) &= \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \end{aligned} \quad (162)$$

en donde $x = \cos \theta$ y $P_l^{-m} = P_l^m$. Con base en esta relación de recurrencia, se encuentra:

$P_0(x)$	$P_1(x)$	$P_2(x)$	$P_3(x)$	$P_4(x)$
1	x	$\frac{1}{2} (3x^2 - 1)$	$\frac{1}{2} (5x^3 - 3x)$	$\frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 2)$

$$\frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(x') P_l(x) = \delta(x - x'); \quad P_l(-x) = (-1)^l P_l(x) \quad (163)$$

$$\Theta_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \quad (164)$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right) \left(\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right)} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$

de manera que al recordar la definición de $P_l(x)$ se tiene:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right) \left(\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\right)} e^{im\varphi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l}. \quad (165)$$

Ahora, dado que $Y_{lm}(\theta, \varphi)^* = (-1)^m Y_{l-m}(\theta, \varphi)$, se encuentra que

$$\sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi)^* Y_{lm}(\theta, \varphi) = \mathcal{I} \quad (166)$$

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} & Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \approx \frac{3z^2 - r^2}{r^2} \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \approx \frac{z}{r} & Y_{2\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \cos \theta \approx \mp \frac{(x \pm iy)z}{r^2} \\ Y_{1\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \approx \mp \frac{x \pm iy}{r} & Y_{2\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{\pm i2\varphi} \sin^2 \theta \approx \frac{x^2 - y^2 \pm 2ixy}{r^2} \end{aligned} \quad (167)$$

3 Rotaciones en Mecánica Cuántica

Definimos una rotación infinitesimal, $\delta\phi$, alrededor del eje z , la cual actúa sobre una función de coordenadas r, θ, φ de la forma:

$$\psi(r, \theta', \varphi') = R_z(\delta\phi)\psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi - \delta\phi) \quad (168)$$

Usando la expansión de Taylor

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta', \varphi') &\approx \psi(r, \theta, \phi) - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \psi(r, \theta, \varphi) \\ &= \left(1 - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi}\right) \psi(r, \theta, \varphi) \end{aligned} \quad (169)$$

el operador de rotación alrededor del eje z un ángulo infinitesimal $\delta\phi$, se define como:

$$\begin{aligned} R_z(\delta\phi) &\approx 1 - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \\ &\approx 1 - \frac{i\delta\phi}{\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}\right) \\ &\approx 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{L}_z \end{aligned} \quad (170)$$

donde \hat{L}_z es el operador que genera la rotación alrededor del eje z . Para una rotación finito-dimensional hacemos un conjuntos de N rotaciones infinitesimales tal que cuando $N \rightarrow \infty$, $\delta\phi N \rightarrow \phi$, donde ϕ es el ángulo finito. Por tanto:

$$\begin{aligned} R_z(\phi) &= \lim_{N \rightarrow \infty} R_z(\delta\phi)^N = \lim_{N \rightarrow \infty} R_z\left(\frac{\phi}{N}\right)^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\phi}{N} \hat{L}_z\right)^N \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \hat{L}_z}. \end{aligned} \quad (171)$$

En general, una rotación finita de ángulo θ alrededor del eje \hat{n} , se expresa en la forma:

$$R_n(\theta) = e^{-\frac{i\theta}{\hbar} \hat{n} \cdot \hat{L}} \quad (172)$$

consideramos una función de coordenadas $\psi(x, y, z)$ y realizamos rotaciones alrededor de los ejes x, y, z . Vemos primero que pasa con el vector (x, y, z) cuando realizamos rotaciones infinitesimales $\delta\theta_1, \delta\theta_2$ y $\delta\theta_3$ alrededor de x, y, z respectivamente

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & \delta\theta_3 & 0 \\ -\delta\theta_3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} & \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \delta\theta_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\delta\theta_2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ & & \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \delta\theta_1 \\ 0 & -\delta\theta_1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (173)$$

Las coordenadas transforman de la manera siguiente:

$$\begin{aligned} x' &= x + \delta\theta_3 y & x' &= x + \delta\theta_2 z & x' &= x \\ y' &= y - \delta\theta_3 x & y' &= y & y' &= y + \delta\theta_1 z \\ z' &= z & z' &= z - \delta\theta_2 x & z' &= z - \delta\theta_1 y \end{aligned} \quad (174)$$

donde la coordenada sobre cada eje rotado queda invariante.

Por tanto, la función $\psi(x, y, z)$ transforma bajo cada rotación de la forma:

$$\begin{aligned} \psi(x', y', z') &\approx \psi(x + \delta\theta_3 y, y - \delta\theta_3 x, z) \\ &\approx \psi(x, y, z) + \left(\delta\theta_3 y \frac{\partial}{\partial x} - \delta\theta_3 x \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(x, y, z) \\ &\approx \left(I - \frac{i\delta\theta_3}{\hbar} \hat{L}_z \right) \psi(x, y, z), \end{aligned} \quad (175)$$

$$\begin{aligned} \psi(x', y', z') &= \psi(x + \delta\theta_2 z, y, z - \delta\theta_2 x) \\ &\approx \psi(x, y, z) + \delta\theta_2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi(x, y, z) \\ &\approx \left(I - \frac{i\delta\theta_2}{\hbar} L_y \right) \psi(x, y, z), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi(x', y', z') &= \psi(x, y + \delta\theta_1 z, z - \delta\theta_1 y) \\
&\approx \psi(x, y, z) + \delta\theta_1 \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi(x, y, z) \\
&\approx \left(I - \frac{i\delta\theta_1}{\hbar} L_x \right) \psi(x, y, z),
\end{aligned} \tag{176}$$

donde se definieron los generadores de las rotaciones en la forma:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\
\hat{L}_y &= -i\hbar \left(-z \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\
\hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)
\end{aligned} \tag{177}$$

como son rotaciones infinitesimales y se desprecian términos de orden $(\delta\theta)^2$, entonces si realizamos la rotaciones infinitesimales a la vez, obtenemos:

$$\begin{aligned}
\psi(x', y', z') &\approx \left(I - \frac{i}{\hbar} (\delta\theta_1 L_x + \delta\theta_2 L_y + \delta\theta_3 L_z) \right) \psi(x, y, z) \\
&\approx \left(I - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\theta} \cdot \vec{L} \right) \psi(x, y, z).
\end{aligned} \tag{178}$$

Realizando un número N muy grande de rotaciones infinitesimales, la función transforma bajo una rotación finita como:

$$\psi(x', y', z') = e^{-\frac{i}{\hbar} \delta\vec{\theta} \cdot \vec{L}} \psi(x, y, z) \tag{179}$$

donde se puede demostrar que los generadores de las rotaciones son los momentos angulares y satisfacen el álgebra de *Lie*:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad i, j, k = 1, 2, 3. \tag{180}$$

Este conjunto de transformaciones forman un grupo llamado $SO(3)$ porque está definido por matrices ortogonales 3×3 de determinante $+1$ cuando actúa sobre el vector \vec{r} . En

adelante para referirnos a la rotación usaremos la rotación:

$$R(\vec{\theta}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\theta} \cdot \vec{L}}. \quad (181)$$

De la definición de $R(\vec{\theta})$ se demuestra que ésta es unitaria, y por tanto cumple la condición,

$$R(\vec{\theta})^\dagger = R(\vec{\theta})^{-1}. \quad (182)$$

Si la función de onda la expresamos mediante armónicos esféricos,

$$\psi(x, y, z) = \sum_{m=-l}^l f_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sum_{m=-l}^l f_{lm}(r) |lm\rangle \quad (183)$$

donde ignoramos la parte radial porque el grupo de rotaciones solo actúa sobre las coordenadas (θ, φ) . Por tanto, solo resta saber como actúa el operar sobre la base de los armónicos esféricos

$$R(\vec{\theta}) |lm\rangle. \quad (184)$$

La representación matricial de $R(\vec{\theta})$ en la base $|lm\rangle$ la encontramos usando la relación de completez, tenemos:

$$\begin{aligned} R(\vec{\theta}) |lm\rangle &= \sum_{m'=-l}^l |lm'\rangle \langle lm'| R(\vec{\theta}) |lm\rangle \\ &= \sum_{m'=-l}^{l'} D_{m' m}^{(l)}(\vec{\theta}) |lm'\rangle \end{aligned} \quad (185)$$

donde la representación matricial del operador $R(\vec{\theta})$ en la base $|lm\rangle$ se define como

$$D_{m' m}^{(l)}(\vec{\theta}) = \langle lm'| R(\vec{\theta}) |lm\rangle \quad (186)$$

como m, m' toman $2l + 1$ valores, esta matriz es $(2l + 1) \times (2l + 1)$ dimensional. A dicha matriz se le conoce como la *D*-matriz de *Wigner*.

Para un operar cualquiera, esta transformación bajo una rotación como

$$\langle lm' | \hat{A}' | lm' \rangle = \langle lm | R(\vec{\theta})^\dagger \hat{A} R(\vec{\theta}) | lm \rangle, \quad (187)$$

$$\hat{A}' = R(\vec{\theta})^\dagger \hat{A} R(\vec{\theta}). \quad (188)$$

Para una transformación infinitesimal tenemos:

$$\begin{aligned} \hat{A}' &= \left(I + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\theta} \cdot \hat{\vec{L}} \right) \hat{A} \left(I - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\theta} \cdot \hat{\vec{L}} \right) \\ &\approx \hat{A} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\theta} \cdot [\hat{\vec{A}}, \hat{\vec{L}}] \end{aligned} \quad (189)$$

$$\delta\hat{A} = -\frac{i}{\hbar} \delta\theta \left[\hat{\vec{A}}, \hat{n} \cdot \hat{\vec{L}} \right] \quad (190)$$

Definimos un operar escalar aquel que es invariante bajo rotaciones $\delta\hat{A} = 0$, es decir, satisface la condición:

$$[\hat{\vec{A}}, \hat{\vec{L}}] = 0 \quad i.e. \quad \hat{A}' = \hat{A}. \quad (191)$$

Definimos un operador vectorial aquel que transforma bajo rotaciones como:

$$\begin{aligned} \delta\hat{\vec{A}} &= -\frac{i}{\hbar} \delta\theta \left[\hat{\vec{A}}, \hat{n} \cdot \hat{\vec{L}} \right] \\ &= \delta\theta \hat{n} \times \hat{\vec{A}} \end{aligned} \quad (192)$$

por tanto se cumple la identidad:

$$[\hat{\vec{A}}, \hat{n} \cdot \hat{\vec{L}}] = i\hbar \hat{n} \times \hat{\vec{A}} \quad (193)$$

es decir,

$$n_i \left[\hat{\vec{A}}_k, \hat{\vec{L}}_i \right] = i\hbar n_i \hat{\vec{A}}_j \epsilon_{ijk} \quad (194)$$

las componentes del operador vectorial transforman bajo rotaciones de acuerdo

$$[\hat{A}_k, \hat{L}_i] = i\hbar\epsilon_{kij}\hat{A}_j. \quad (195)$$

Por ejemplo, el momento angular es un vector bajo rotaciones porque

$$[\hat{L}_k, \hat{L}_i] = i\hbar\epsilon_{kij}\hat{L}_j. \quad (196)$$

Definiendo los operadores escalera de la forma:

$$\begin{aligned} \hat{A}_{\pm} &= \hat{A}_x \pm i\hat{A}_y \\ \hat{L}_{\pm} &= \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \end{aligned} \quad (197)$$

se satisfacen las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} [L_z, A_{\pm}] &= [L_z, A_x] \pm i[L_z, A_y] \\ &= +i(\hbar A_y \mp i\hbar A_x) \\ &= \hbar(\pm A_x + iA_y) \\ &= \pm\hbar A_{\pm} \end{aligned} \quad (198)$$

$$\begin{aligned} [L_{\pm}, A_{\pm}] &= [L_x \pm iL_y, A_x \pm iA_y] \\ &= \pm i[L_x, A_y] \pm i[L_y, A_x] \\ &= \pm i\{i\hbar A_z - i\hbar A_z\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (199)$$

$$\begin{aligned}
[L_{\pm}, A_{\mp}] &= [L_x \pm iL_y, A_x \mp iA_y] \\
&= \mp i [L_x, A_y] \pm i [L_y, A_x] \\
&= (\mp i)i\hbar A_z \pm i(-i\hbar)A_z \\
&= \pm 2iA_z
\end{aligned} \tag{200}$$

Definimos las componentes esféricas del vector \vec{A} como:

$$\begin{aligned}
\hat{A}_{\pm 1} &\mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A}_x \pm i\hat{A}_y), \\
\hat{A}_0 &= \hat{A}_z
\end{aligned} \tag{201}$$

y usando las identidades anteriores, se obtienen las nociones de conmutación para las componentes esféricas del operador vectorial,

$$\begin{aligned}
[L_z, \hat{A}_q] &= \hbar q \hat{A}_q \quad q = +1, -1, 0 \\
[L_{\pm}, \hat{A}_q] &= \hbar \sqrt{2 - q(q \pm 1)} \hat{A}_{q \pm 1}
\end{aligned} \tag{202}$$

4 Tensor de Segundo Rango y Representaciones Irreducibles

Un tensor de segundo rango T_{ij} transforma bajo rotaciones de igual forma que el producto de dos vectores $A_i B_j$. Usando las reglas de conmutación para un vector obtenemos:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_i, \hat{T}_{jk}] &= [L_i, \hat{A}_j \hat{B}_k] \\
&= [\hat{L}_i, \hat{A}_j] \hat{B}_k + A_j [\hat{L}_i, \hat{B}_k] \\
&= i\hbar \epsilon_{ijl} \hat{A}_l \hat{B}_k + i\hbar \hat{A}_j \epsilon_{ikl} \hat{B}_l \\
&= i\hbar \epsilon_{ijl} \hat{T}_{lk} + i\hbar \epsilon_{ikl} \hat{T}_{jl}
\end{aligned} \tag{203}$$

es decir, cada índice transforma como un vector. Este tensor se puede descomponer en componentes irreducibles de la forma

$$\begin{aligned}\widehat{T}_{ij}^{(0)} &= \frac{1}{3}\delta_{ij}\sum_p\widehat{T}_{pp}, \\ \widehat{T}_{ij}^{(1)} &= \frac{1}{2}\left(\widehat{T}_{ij} - \widehat{T}_{ji}\right) \quad i \neq j, \\ \widehat{T}_{ij}^{(2)} &= \frac{1}{2}\left(\widehat{T}_{ij} + \widehat{T}_{ji}\right) - \widehat{T}_{ij}^{(0)}.\end{aligned}\tag{204}$$

$\widehat{T}_{ij}^{(0)}$ transforma como un escalar. Veamos:

$$\begin{aligned}\left[\widehat{L}_k, \widehat{T}_{ij}^{(0)}\right] &= \frac{1}{3}\delta_{ij}\sum_p\left[\widehat{L}_k, \widehat{T}_{pp}\right] \\ &= \frac{i}{3}\hbar\delta_{ij}\sum_p\{\epsilon_{kpl}\widehat{T}_{lp} + \epsilon_{kpl}\widehat{T}_{pl}\} \\ &= \frac{i}{3}\hbar\delta_{ij}\sum_p\{-\epsilon_{kpl}\widehat{T}_{pl} + \epsilon_{kpl}\widehat{T}_{pl}\} \\ &= 0\end{aligned}\tag{205}$$

$\widehat{T}_{ij}^{(1)}$ tiene las componentes independientes 1 2, 1 3, 2 3 y transforman como un vector.

Construyamos las tres componentes de la forma $\epsilon^{kij}T_{ij}^{(1)} = \widehat{T}_k^{(1)}$ y apliquemos los vectores

de rotación usando las relaciones de conmutación para un tensor de segundo rango:

$$\begin{aligned}\left[\widehat{L}_l, \widehat{T}_k^{(1)}\right] &= \left[\widehat{L}_l, \epsilon^{kij}\widehat{T}_{ij}^{(1)}\right] \\ &= \epsilon^{kij}\left\{\left[\widehat{L}_l, \widehat{T}_{ij}^{(1)}\right]\right\} \\ &= i\hbar\epsilon^{kij}\{\epsilon_{lip}\widehat{T}_{pj}^{(1)} + \epsilon_{ljp}\widehat{T}_{ip}^{(1)}\} \\ &= i\hbar\{\widehat{T}_{pk}^{(1)} - \widehat{T}_{kp}^{(1)}\} \\ &= i\hbar\epsilon_{lkj}\widehat{T}_j^{(1)}\end{aligned}\tag{206}$$

donde se usa la relación $\widehat{T}_{lk}^{(1)} - \widehat{T}_{kl}^{(1)} = \epsilon_{lkj}\widehat{T}_j^{(1)}$. Decimos que las tres componentes $T_{ij}^{(1)}$

forman un espacio irreducible de dimensión 3 porque las tres componentes transforman entre sí bajo una rotación.

De igual forma $T_{ij}^{(2)}$ forma un tensor de segundo rango bajo rotaciones y corresponde a un espacio de dimensión 5. Veamos:

$$\begin{aligned}
[\widehat{L}_k, \widehat{T}_{ij}^{(2)}] &= \frac{1}{2} [\widehat{L}_k, \widehat{T}_{ij}] + \frac{1}{2} [\widehat{L}_k, \widehat{T}_{ji}] - [\widehat{L}_k, \widehat{T}_{ij}^{(0)}] - [\widehat{L}_k, \widehat{T}_{ji}^{(0)}] \\
&= \frac{1}{2} \{ \epsilon_{kil} \widehat{T}_{lj} + \epsilon_{kjl} \widehat{T}_{il} + \epsilon_{kjl} \widehat{T}_{li} + \epsilon_{kil} \widehat{T}_{jl} \} \\
&= \frac{1}{2} \epsilon_{kil} (\widehat{T}_{lj} + \widehat{T}_{jl}) + \frac{1}{2} \epsilon_{kjl} (\widehat{T}_{il} + \widehat{T}_{li}) \\
&= \epsilon_{kil} \widehat{T}_{lj}^{(2)} + \epsilon_{kjl} \widehat{T}_{il}^{(2)}
\end{aligned} \tag{207}$$

donde el factor $-\epsilon_{kil} \widehat{T}_{lj}^{(0)} + \epsilon_{kjl} \widehat{T}_{il}^{(0)}$ se adicionó para completar el tensor de rango 2 porque estos factores son cero,

$$\begin{aligned}
\{-\epsilon_{kil} \widehat{T}_{lj}^{(0)} + \epsilon_{kjl} \widehat{T}_{il}^{(0)}\} &= \epsilon_{kil} \frac{1}{3} \delta_{lj} \sum_p \widehat{T}_{pp} + \epsilon_{kjl} \frac{1}{3} \delta_{il} \sum_p \widehat{T}_{pp} \\
&= \frac{1}{3} (\epsilon_{kij} + \epsilon_{kji}) \sum_p \widehat{T}_{pp} \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{208}$$

Un tensor de rango k en coordenadas esféricas es un conjunto de $2k + 1$ operadores de la forma $T_q^{(k)}$ con $q = -k, \dots, k$. Para el caso de $k = 1$ tenemos $T_+^{(1)}$, $T_-^{(1)}$, $T_0^{(1)}$. Recordando para un tensor de rango 1, tenemos:

$$\begin{aligned}
[\widehat{L}_z, \widehat{T}_q^{(1)}] &= \hbar q \widehat{T}_q^{(1)} \quad q = +, -, 0 \\
[\widehat{L}_{\pm}, \widehat{T}_q^{(1)}] &= \hbar \sqrt{1(1+1) - q(q \pm 1)} \widehat{T}_{q \pm 1}^{(1)}
\end{aligned} \tag{209}$$

Estas relaciones se puede generalizar para un tensor de rango (k) , $T_q^{(k)}$, obteniendo se las conmutadores:

$$\begin{aligned}
[\widehat{L}_z, \widehat{T}_q^{(k)}] &= \hbar q \widehat{T}_q^{(k)} \quad q = -k, \dots, k \\
[\widehat{L}_{\pm}, \widehat{T}_q^{(k)}] &= \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \widehat{T}_{q \pm 1}^{(k)}
\end{aligned} \tag{210}$$

usando las relaciones de como actúan los operadores de momento angular sobre el espacio base

$$\begin{aligned}\langle kq' | \hat{L}_z | kq \rangle &= \hbar q \langle kq' | kq \rangle = \hbar q \delta_{qq'} \\ \langle kq' | \hat{L}_\pm | kq \rangle &= \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \delta_{q', q \pm 1}\end{aligned}\tag{211}$$

y multiplicando en las relaciones anterior por $\hat{T}_{q'}^{(k)}$, sumando sobre q' y usando la ecuación de autovalores para \hat{L}_z , \hat{L}_\pm , obtenemos

$$\begin{aligned}\sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle kq' | J_z | kq \rangle &= \hbar q \hat{T}_q^{(k)} = [\hat{L}_z, T_q^{(k)}] \\ \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle kq' | J_\pm | kq \rangle &= \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \hat{T}_{q \pm 1}^{(k)}\end{aligned}\tag{212}$$

Entonces:

$$\begin{aligned}[\hat{L}_z, \hat{T}_q^{(k)}] &= \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \langle kq' | J_z | kq \rangle \\ [\hat{L}_\pm, T_q^{(k)}] &= \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \langle kq' | \hat{L}_\pm | kq \rangle.\end{aligned}\tag{213}$$

Los generadores de la rotación determinan como transforman los vectores del espacio base bajo una rotación. Un tensor de rango superior, el cual vive en la fibra del espacio base, transforma como una combinación lineal de la base de tensores y los coeficientes de esta transformación son dictados por las propiedades de transformación de los generadores en el espacio base. Es decir,

$$\begin{aligned}[\hat{L}, \hat{T}_q^{(k)}] &= \sum_{+q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle kq' | \hat{L} | kq \rangle \\ &= \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \hat{L}_{q'q}\end{aligned}\tag{214}$$

Bajo una rotación el operador $\widehat{T}_q^{(k)}$ transforma como

$$\begin{aligned}
\widehat{R}_n^\dagger(\delta\theta)\widehat{T}_q^{(k)}\widehat{R}_n(\delta\theta) &= \left(I + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\theta} \cdot \widehat{\vec{L}}\right) \widehat{T}_q^{(k)} \left(I - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\theta} \cdot \widehat{\vec{L}}\right) \\
&\approx T_q^{(k)} + \frac{i}{\hbar}\delta\theta \left[\widehat{n} \cdot \widehat{\vec{L}}, \widehat{T}_q^{(k)}\right] \\
&= \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \langle kq' | I + \frac{i}{\hbar}\delta\theta \widehat{n} \cdot \widehat{\vec{L}} | kq \rangle \\
&= \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \langle kq' | e^{i\delta\vec{\theta} \cdot \widehat{\vec{L}}} | kq \rangle \\
&= \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \langle kq' | R_n^\dagger(\theta) | kq \rangle
\end{aligned} \tag{215}$$

Por tanto, para una transformación finita:

$$\widehat{R}_n^\dagger(\theta)\widehat{T}_q^{(k)}R_n(\theta) = \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} D_{qq'}^{(k)*}(\vec{\theta}) \tag{216}$$

5 Teorema de Wigner - Eckart

Considerando las relaciones de conmutación anteriores para \widehat{L}_z y \widehat{L}_\pm , y multiplicando por

$$\langle j'm' | y | jm \rangle$$

$$\langle j'm' | \left[\widehat{J}_z, \widehat{T}_q^{(k)} \right] - \hbar q \widehat{T}_q^{(k)} | jm \rangle = 0, \tag{217}$$

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

Si $m' - m - q = 0$ entonces el elemento de matriz es diferente de cero. Esto sugiere que

$$\langle j'm' | T_q^{(k)} | jm \rangle \text{ tiene propiedades de un elemento de } Clebsch-Gordan, \langle j'm' | jk; mq \rangle.$$

De igual forma usando la otra relación de conmutación:

$$\langle j'm' | \left[\widehat{J}_\pm, \widehat{T}_q^{(k)} \right] | jm \rangle = \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \langle j'm' | T_{q\pm 1}^{(k)} | jm \rangle. \tag{218}$$

Para determinar el conmutador es necesario calcular $\langle j'm' | \hat{J}_\pm$ y $\hat{J}_\pm | jm \rangle$, los cuales se pueden expresar en la forma

$$\begin{aligned}\hat{J}_\pm | jm \rangle &= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} | jm \pm 1 \rangle \\ \langle jm | \hat{J}_\mp &= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle jm \pm 1 |\end{aligned}\tag{219}$$

y al reemplazar en $\langle j'm' | [\hat{J}_\pm, \hat{T}_q^{(k)}] | jm \rangle$, se obtiene:

$$\begin{aligned}\sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle j'm' \mp 1 | T_q^{(k)} | jm \rangle &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j'm' | T_q^{(k)} | jm \pm 1 \rangle \\ &+ \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j'm' | T_{q \pm 1}^{(k)} | jm \rangle\end{aligned}\tag{220}$$

Recordando la relación de recurrencia que se obtiene de adición del momento angular $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ y usando las bases $|jm\rangle$ y $|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ obtuvimos para el operador escalera la relación de recurrencia siguiente

$$\begin{aligned}\sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle j'm' \mp 1 | jk; mq \rangle &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j'm' | jk; m \pm 1q \rangle \\ &+ \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j'm' | jk; mq \pm 1 \rangle\end{aligned}\tag{221}$$

comparando las dos expresiones anteriores se observa que el elemento de matriz $\langle j'm' | \hat{T}_q^{(k)} | jm \rangle$ tiene las propiedades de un coeficiente de *Clebsch-Gordan*, i.e.

$$\langle j'm' | jk; mq \rangle \approx \langle j'm' | \hat{T}_q^{(k)} | jm \rangle.\tag{222}$$

El teorema de *Wigner-Eckart* establece la siguiente relación:

$$\langle j'm' | \hat{T}_q^{(k)} | jm \rangle = \langle jk; mq | j'm' \rangle \langle j' || \hat{T}^{(k)} || j \rangle\tag{223}$$

en donde $\langle jk; mq | j'm' \rangle$ depende del espacio base y contiene las reglas de selección del producto tensorial y $\langle j' || \hat{T}^{(k)} || j \rangle$ depende del tensor o representación que estamos usando.

Para un escalar tenemos, según el teorema de WE , el elemento de matriz:

$$\begin{aligned}
 \langle j'm'|\widehat{B}|jm\rangle &= \langle j0;m0|j'm'\rangle \langle j'|\widehat{B}|j\rangle \\
 &= \delta_{jj'}\delta_{mm'} \langle j'|\widehat{B}|j\rangle \\
 &= \widehat{B} \delta_{jj'}\delta_{mm'}
 \end{aligned} \tag{224}$$

Para un vector tenemos para el elemento de matriz

$$\langle j'm'|\widehat{A}_q|jm\rangle = \langle j1;q|j'm'\rangle \langle j'|\widehat{A}|j\rangle \tag{225}$$

donde \widehat{A} es un tensor de rango $k = 1$. Calculemos los elementos de matriz para un vector \vec{J} . Para calcular $\langle j'|\widehat{J}|j\rangle$ usamos el vector momento angular \widehat{J} ,

$$\langle j'm'|\widehat{J}_q|jm\rangle = \langle j1;q|j'm'\rangle \langle j'|\widehat{J}|j\rangle \tag{226}$$

Consideremos la componente cero i.e. J_0 , entonces

$$\begin{aligned}
 \langle j'm'|J_0|jm\rangle &= \langle j1;m0|j'm'\rangle \langle j'|\widehat{J}|j\rangle \\
 &= \hbar m \delta_{jj'} \delta_{m'm}
 \end{aligned} \tag{227}$$

Teniendo en cuenta el coeficiente de *Clebsch-Gordan*, $\langle j1;m0|jm\rangle = \frac{m}{\sqrt{j(j+1)}}$, entonces

$$\langle j'|\widehat{J}|j\rangle = \hbar \frac{\sqrt{j(j+1)}}{m} \delta_{jj'}. \tag{228}$$

Para calcular el valor esperado del producto $\vec{J} \cdot \vec{A}$, usemos las siguientes identidades

$$\begin{aligned}
 \vec{J} \cdot \vec{A} &= J_0 \widehat{A}_0 + J_{+1} \widehat{A}_{-1} - J_{-1} \widehat{A}_{+1} \\
 J_0 |jm\rangle &= \hbar m |jm\rangle \\
 J_{\pm} |jm\rangle &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |jm \pm 1\rangle
 \end{aligned} \tag{229}$$

y al considerar el producto $\vec{J} \cdot \vec{A}$ entre el estado $|jm\rangle$, con las identidades anteriores, obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle jm | \vec{J} \cdot \hat{A} | jm \rangle &= \hbar m \langle jm | \hat{A}_0 | jm \rangle - \frac{\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle jm+1 | \hat{A}_{+1} | jm \rangle \\ &\quad + \frac{\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle jm-1 | \hat{A}_{-1} | jm \rangle. \end{aligned} \quad (230)$$

Del teorema de *Wigner-Eckart* obtenemos para las tres componentes esféricas del vector \hat{A} :

$$\begin{aligned} \langle jm | \hat{A}_0 | jm \rangle &= \langle j1; m 0 | jm \rangle \langle j || \hat{A} || j \rangle \\ \langle jm+1 | \hat{A}_{+1} | jm \rangle &= \langle j1; m 1 | jm+1 \rangle \langle j || \hat{A} || j \rangle \\ \langle jm-1 | \hat{A}_{-1} | jm \rangle &= \langle j1; m -1 | jm-1 \rangle \langle j || \hat{A} || j \rangle \end{aligned} \quad (231)$$

Reemplazando en la ecuación anterior:

$$\begin{aligned} \langle jm | \vec{J} \cdot \hat{A} | jm \rangle &= \{ \hbar m \langle j 1; m 0 | j m \rangle - \frac{\hbar}{2} \langle j 1; m 1 | j m+1 \rangle \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \\ &\quad + \frac{\hbar}{2} \langle j 1; m -1 | j m-1 \rangle \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \} \langle j || \hat{A} || j \rangle. \end{aligned} \quad (232)$$

Si cambiamos \hat{A} por \vec{J} , el término en el paréntesis no cambia y el elemento de matriz reducido $\langle j || \hat{A} || j \rangle$ se cambia por $\langle j || \vec{J} || j \rangle$. Haciendo la ??? de estas relaciones, se obtiene.

$$\frac{\langle jm | \vec{J} \cdot \hat{A} | jm \rangle}{\langle jm | \vec{J}^2 | jm \rangle} = \frac{\langle j || \hat{A} || j \rangle}{\langle j || \vec{J} || j \rangle}. \quad (233)$$

Usando el teorema de *Wigner-Eckart* para \vec{J}_q y \hat{A}_q

$$\frac{\langle jm' | \hat{A}_q | jm \rangle}{\langle jm' | \vec{J}_q | jm \rangle} = \frac{\langle j || \hat{A} || j \rangle}{\langle j || \vec{J} || j \rangle} \quad (234)$$

Por tanto:

$$\langle jm' | \hat{A}_q | jm \rangle = \frac{\langle jm | \vec{J} \cdot \hat{A} | jm \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle jm' | \vec{J}_q | jm \rangle. \quad (235)$$

En particular, para calcular $\langle jm | S_z | jm \rangle$ y teniendo en cuenta que $\vec{J} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$, tenemos:

$$\langle jm | S_z | jm \rangle = \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \hbar m, \quad (236)$$

Expresión que se usa en el efecto *Zeeman*.

6 Ecuación de Dirac y Klein Gordon

Erwin Schrödinger fue quien propuso la ecuación de *Klein-Gordon* usando el principio de correspondencia para la relación de momento-energía relativista

$$\begin{aligned} E &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} & \vec{p} &= -i\hbar \nabla \\ E^2 &= p^2 c^2 + m^2 c^4 \end{aligned} \quad (237)$$

donde

$$\begin{aligned} \left(\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4 \right) \phi(x) &= 0 \\ \left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi(x) &= 0 \end{aligned} \quad (238)$$

pero dicha ecuación no permitía una interpretación probabilística para la función de onda.

Multiplicando la anterior ecuación por ϕ^* y tomando el complejo conjugado y multiplicando por $\phi(x)$, al hacer la diferencia se obtiene

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (239)$$

donde

$$\begin{aligned} \rho &= \phi^* \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi - \phi \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi^* \\ \vec{J} &= \phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi \end{aligned} \quad (240)$$

donde $\rho(x)$ no es definida positiva para todo \vec{x}, t . Por tanto, no admite una interpretación probabilística. En 1926 O. Klein y W. Gordon la propusieron como una ecuación relativista para el electrón. Pero Actualmente, esta ecuación describe partículas de espín cero como el campo de Higgs o piones. La interpretación que se dio a ρ es de carga eléctrica, donde un factor es la contribución de las partículas y el otro de las antipartículas. Esta interpretación proviene porque la energía relativista

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (241)$$

tiene los dos signos en la raíz, los cuales hay que tenerlos en cuenta desde el punto de vista matemático, si queremos tener todas las soluciones posibles de la ecuación diferencial.

Esto posteriormente se interpretó como la energía de las partículas y las antipartículas.

En el laboratorio se han descubierto antipartículas como el positrón, el antiprotón, etc.

Partiendo de esta idea, Dirac propuso su ecuación. El asumió que sólo podría haber una sola derivada temporal para evitar el problema de la interpretación de la densidad de probabilidad, pero a su vez solo podría existir una derivada espacial para poder construir una ecuación que fuera invariante bajo transformaciones de Lorentz. Dirac propuso:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi &= \frac{\hbar c}{i} \vec{\alpha} \cdot \nabla \psi + \beta m c^2 \psi \\ &= H_D \psi \end{aligned} \quad (242)$$

$\vec{\alpha}$ no es un número trivial porque de lo contrario la ecuación no sería invariante bajo rotaciones. Como H_D se interpreta como un Hamiltoniano, entonces éste es la suma de dos términos, el cinético y la energía en reposo de la partícula. Para hacer la ecuación anterior consistente con la relación de momento-energía relativista, $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$, multiplicamos

a ambos lados por el operador $i\hbar \partial_t$ y H_D , obteniendo:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = \left[-\hbar^2 c^2 (\alpha \cdot \nabla)(\alpha \cdot \nabla) + \frac{\hbar m c^3}{i} (\beta \vec{\alpha} + \vec{\alpha} \beta) \cdot \nabla + \beta^2 m^2 c^4 \right] \psi \quad (243)$$

Si exigimos que cada componente de ψ satisface la ecuación de *Klein-Gordon*, la cual contiene la relación de momento-energía relativista, mediante el principio de correspondencia

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (-\hbar^2 c^2 p^2 + m^2 c^4) \psi \quad (244)$$

entonces

$$\begin{aligned} \alpha_i \alpha_j &= \frac{\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i}{2} = \delta_{ij} \\ \beta \alpha_i + \alpha_i \beta &= 0 \\ \alpha_i^2 &= \beta^2 = I \end{aligned} \quad (245)$$

como H_D es hermítico, entonces $\vec{\alpha}, \beta$ deben ser hermíticos, además con autovalores ± 1 porque son idempotentes, como se observa de la última identidad.

De la segunda ecuación se infiere

$$\begin{aligned} Tr(\alpha_i) &= -Tr(\beta \alpha_i \beta) = 0 \\ Tr(\beta) &= -Tr(\alpha_i \beta \alpha_i) = 0 \end{aligned} \quad (246)$$

Por tanto, al tener traza nula y autovalores ± 1 , éstas deben ser matrices de dimensión par.

Para $N = 2$, no hay solución porque podemos identificar las α_i con σ_i , pero no habría una matriz para β , excepto la identidad y ésta no satisface la segunda relación porque $\beta =$

I conmuta con todas las σ^i . Para $N = 4$, se puede demostrar que hay un conjunto de matrices que satisfacen dicha álgebra

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \quad (247)$$

Multiplicando la ecuación de Dirac por ψ^* a la izquierda y tomando el adjunto de la ecuación de Dirac, y multiplicando a la derecha por ψ y restando, obtenemos:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla_p \vec{J} = 0 \quad (248)$$

con

$$\rho = \psi^\dagger \psi \quad , \quad \vec{J} = c \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi \quad (249)$$

donde ρ admite una interpretación de densidad de probabilidad porque es definida positiva. Para partícula en reposo la ecuación se escribe en la forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \beta mc^2 \psi \quad (250)$$

es decir

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi^{(\alpha)} \\ \psi^{(\beta)} \end{pmatrix} &= \frac{mc^2}{i\hbar} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^{(\alpha)} \\ \psi^{(\beta)} \end{pmatrix} \\ \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} &= \frac{mc^2}{i\hbar} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (251)$$

donde

$$\begin{aligned} \psi^{(\alpha)} &= e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} \varphi^{(\alpha)} \\ 0 \end{pmatrix}, & \varphi^{(1)} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \psi^{(\beta)} &= e^{i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi^{(\beta)} \end{pmatrix}, & \varphi^{(2)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (252)$$

la cual admite soluciones de la forma:

$$\begin{aligned}
 \psi^1 &= e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \psi^2 &= e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 \psi^3 &= e^{i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \psi^4 &= e^{i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{253}$$

donde las dos primeras corresponden a partícula en reposo con energía positiva, $E = mc^2$, con espín arriba y abajo. Las dos últimas son partículas con energía negativa, $E = -mc^2$, o antipartículas con espín arriba y abajo. Las primeras corresponden a un electrón en reposo y las otras a un positrón en reposo, la antipartícula del electrón, con igual masa m .

Para acoplar un electrón a un campo electromagnético externo, se reemplaza

$$p^\mu \longrightarrow p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \tag{254}$$

donde $A^\mu = (\frac{\varphi}{c}, \vec{A})$ es el cuadri-potencial electromagnético.

En este caso la ecuación se reduce a:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[c \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta mc^2 + e\varphi \right] \psi \tag{255}$$

donde se define

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}. \tag{256}$$

Estudiemos el límite no-relativista de la ecuación de Dirac. Para ello, definimos ψ de la siguiente forma

$$\psi = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \varphi(x;t) \\ \chi(x;t) \end{pmatrix} \quad (257)$$

donde a la función de onda se le "subtrae" la dependencia fuente a la energía que depende de su energía en reposo, es decir φ, χ dependen del tiempo mediante la energía no-relativista donde se substrajo la energía en reposo. También la energía se puede ver como $Et = mc^2t + E_{no-relat}t$ donde la dependencia del tiempo en φ y χ es proporcional a

$E_{no-relat}t$. Al reemplazar en la ecuación se obtiene:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \vec{\alpha} \cdot \vec{\pi} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad (258)$$

teniendo en cuenta que $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x) \approx E_{no-relat} \varphi(x)$, $e\phi \ll mc^2$, la ecuación anterior se puede aproximar a:

$$c \vec{\alpha} \cdot \vec{\pi} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad (259)$$

usando la forma explícita de $\vec{\alpha}$ y la relación que sale del bloque inferior de la ecuación anterior obtenemos:

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2mc} \varphi \\ &\approx \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right) \varphi \end{aligned} \quad (260)$$

reemplazando en la ecuación (258) la componente χ y usando el bloque superior obtenemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi \approx \left[\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}}{2m} + e\phi \right] \varphi \quad (261)$$

la cual es la ecuación de Schrödinger-Pauli y se obtiene de la ecuación de Dirac en el límite no-relativista para la solución de energía negativa. La solución de energía negativa χ prácticamente se desprecia a bajas energía y por esta razón no se ven antipartículas.

7 Interacción \vec{L} , \vec{S} con \vec{B}

La ecuación de *Schrödinger-Pauli* para electrón con spin se escribe, del límite no-relativista de la ecuación de Dirac

$$H_0 = \frac{\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})}{2m} + \varphi(r) \quad (262)$$

donde \vec{A} es el potencial vectorial y $-e$ la carga del electrón. Usando la identidad para las matrices de Pauli

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (263)$$

el Hamiltoniano se escribe en la forma

$$H_0 = \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + i \left[\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) \times \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right) \right] \cdot \vec{\sigma} + \varphi(r). \quad (264)$$

calculemos $(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2$ el término cinético de la ecuación,

$$\begin{aligned} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 () &\approx \vec{p}^2 () - \frac{e}{c}\vec{p} \cdot \left(\vec{A} () \right) - \frac{e}{c}\vec{A} \cdot \vec{p} () \\ &\approx p^2 () - \frac{2e}{c}\vec{A} \cdot \vec{p} () \end{aligned} \quad (265)$$

donde se usó el gauge de Coulomb, i.e. $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, y se desprecia términos de orden \vec{A}^2 . Suponiendo un campo magnético constante, el potencial vectorial se escribe:

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} \quad (266)$$

y al reemplazar en el termino cinético, obtenemos:

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \frac{e}{c}\vec{B} \cdot \vec{L} \quad (267)$$

Para la otra expresión de H_D , el producto cruz escrito en componentes, tenemos:

$$\begin{aligned} i \left(p_i - \frac{e}{c}A_i\right) \left(p_j - \frac{e}{c}A_j\right) \sigma_k \epsilon^{ijk} &= i \left(-\frac{e}{c}\right) (A_i p_j) + p_i (A_j) \sigma_k \epsilon^{ijk} \\ &\approx -i \frac{e}{c} [(A_i p_j + A_j p_i) + (p_i A_j)] \sigma_k \epsilon^{ijk} \end{aligned} \quad (268)$$

donde las dos primeros términos son un tensor simétrico contraído por un *Levi-Civita*.

Por tanto:

$$\begin{aligned} i \left(p_i - \frac{e}{c}A_i\right) \left(p_j - \frac{e}{c}A_j\right) \sigma_k \epsilon^{ijk} &= i \left(-\frac{e}{c}\right) (A_i p_j) + p_i (A_j) \sigma_k \epsilon^{ijk} \\ &\approx -i \frac{e}{c} (\vec{p} \times \vec{A}) \cdot \vec{\sigma} \\ &\approx -\frac{\hbar e}{c} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} \\ &\approx -2 \frac{e}{c} \vec{B} \cdot \vec{J} \end{aligned} \quad (269)$$

Finalmente, H_0 se escribe como:

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{|e|\hbar}{2mc} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} + V_0(r) \\ &= H_0 + H_p \end{aligned} \quad (270)$$

Definimos el momento dipolar magnético como:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{|e|\hbar}{2mc} \vec{L}, \quad \vec{\mu}_s = -\frac{|e|\hbar}{mc} \vec{S} \quad (271)$$

donde definimos el *magnetn de Bohr* como

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (272)$$

Por tanto

$$\begin{aligned} H_p &= -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} - \vec{\mu}_L \cdot \vec{B} \\ &= -\mu_B (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} \end{aligned} \quad (273)$$

donde el factor 2 se conoce como factor de *Land* $g_s = 2$

8 Invarianza de Lorentz de la ecuación de Dirac

Redefiniendo las matrices $\vec{\alpha}$, β_0 como

$$\vec{\gamma} = \beta_0 \vec{\alpha}, \quad \gamma_0 = \beta_0 \quad (274)$$

el álgebra entre $\vec{\alpha}$, β_0 se reduce a una ecuación más compacta

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu} \quad (275)$$

donde $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. Las matrices γ_μ se conocen como matrices de Dirac y a la nueva álgebra se denomina álgebra de *Clifford*. Con esta nueva notación la matriz de Dirac se puede escribir más compacta en la forma:

$$\begin{aligned} \left(i\hbar\gamma_0 \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \vec{\gamma} \cdot \vec{p} - mc \right) \psi &= 0, \\ (i\hbar\gamma_\mu \partial^\mu - mc) \psi &= 0, \\ (i\hbar \not{\partial} - mc) \psi &= 0. \end{aligned} \quad (276)$$

Supongamos una transformación de Lorentz

$$x^{\mu'} = a^\mu_\nu x^\nu \quad (277)$$

la cual infinitesimalmente se puede escribir como

$$x^{\mu'} \approx (\delta^\mu_\nu + w^\mu_\nu) x^\nu \quad (278)$$

donde asumimos que realizamos una transformación de Lorentz infinitesimal. Imponiendo la invarianza de

$$x^{\mu'} x'_\mu = x^\mu x_\mu \quad (279)$$

obtenemos que

$$w_{\nu}^{\mu} = -w_{\nu}^{\mu} \quad (280)$$

es decir hay solo 6 parámetros independientes:

$$w^{0i} = -w^{i0} \quad (281)$$

$$w^{ij} = -w^{ji}$$

donde los tres primeros corresponden a boost los cuales mezclan espacio-tiempo y los tres últimos corresponden a rotaciones. Por otra parte, suponiendo que la función de onda transforma bajo Lorentz en la forma

$$\psi'(x') = S(a)\psi(x) \quad (282)$$

y reemplazando en la ecuación de Dirac, se tiene:

$$\begin{aligned} (i\hbar\partial - mc)\psi(x) &= (i\hbar S(a)\gamma^{\mu}S(a)^{-1}\partial_{\mu} - mc)\psi'(x') \\ &= (i\hbar S(a)\gamma^{\mu}S(a)^{-1}a_{\mu}^{\nu}\partial'_{\nu} - mc)\psi'(x') \\ &= (i\hbar\gamma^{\nu}\partial'_{\nu} - mc)\psi'(x') \end{aligned} \quad (283)$$

donde se definió

$$\begin{aligned} S(a)\gamma^{\mu}S(a)^{-1}a_{\mu}^{\nu} &= \gamma^{\nu} \\ S(a)\gamma^{\mu}S(a)^{-1} &= a_{\nu}^{\mu}\gamma^{\nu} \end{aligned} \quad (284)$$

considerando una transformación de Lorentz infinitesimal

$$\begin{aligned} x^{\mu'} &= x^{\mu} - w_{\nu}^{\mu}x^{\nu} \\ S(a) &\approx 1 - \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}w^{\mu\nu}. \end{aligned} \quad (285)$$

Reemplazando en la ecuación anterior obtenemos:

$$w^{\mu\rho} [g_{\mu}^{\nu}\gamma_{\rho} - g_{\rho}^{\nu}\gamma_{\mu}] = -\frac{i}{4}w^{\mu\rho} [\sigma_{\mu\rho}\gamma^{\nu} - \gamma^{\nu}\sigma_{\mu\rho}] \quad (286)$$

Como $w^{\mu\rho}$ son parámetros independientes, entonces se obtiene la identidad, donde $\sigma_{\mu\rho}$ son objetos desconocidos,

$$[\sigma_{\mu\rho}, \gamma_\nu] = 2i(g_{\nu\mu}\gamma_\rho - g_{\nu\rho}\gamma_\mu) \quad (287)$$

el cual tiene solución para $\sigma_{\mu\rho}$ de la forma:

$$\sigma_{\mu\rho} = \frac{i}{2}(\gamma_\mu\gamma_\rho - \gamma_\rho\gamma_\mu). \quad (288)$$

Un caso muy interesante sería una rotación alrededor del eje z , donde

$$w^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu} = w_{12}\sigma_{12} = \theta_3\Sigma_3 \quad (289)$$

y definiendo

$$w_{12} = \theta_3, \sigma_{12} = \Sigma_3 = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \quad (290)$$

se puede demostrar que la transformación de Lorentz para el espinor de Dirac se puede escribir de la forma:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{4}w_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}} &= e^{-\frac{i}{2}\theta_3\Sigma_3} \\ &= \sum_{n=par} (-i)^n \left(\frac{\theta_3}{2}\right)^n I + i \sum_{n=impar} (-i)^n \left(\frac{\theta_3}{2}\right)^n \Sigma_3 \\ &= \cos \frac{\theta_3}{2} - i\Sigma_3 \sin \frac{\theta_3}{2}. \end{aligned} \quad (291)$$

Para una rotación de $\theta_3 = 2\pi$ el espinor cambia de signo porque

$$e^{-\frac{i}{4}w_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}} = -I \quad (292)$$

y el espinor no es univaluado en $\theta = 0$ y $\theta = 2\pi$. Para una rotación de $\theta_3 = 4\pi$ la transformación de Lorentz se reduce a

$$e^{-\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}} = I \quad (293)$$

y en este caso el espinor en $\theta = 0$ y $\theta = 4\pi$ son iguales, una propiedad extraña de los espinores.

Para un boost en dirección x el parámetro diferente de cero es $w_{01} = -w_{10} = w$, la transformación de Lorentz $S(w)$ sería

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{4}w_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}} &= e^{-\frac{i}{2}w_{01}\sigma^{01}} = e^{-i\frac{w}{2}\alpha_1} \\ &= \cosh \frac{w}{2} \left[I - i\alpha_1 \tanh \frac{w}{2} \right] \end{aligned} \quad (294)$$

si realizamos un boost en dirección x , los espinores en reposo de energía positiva y negativa

$$U(p=0) = \begin{pmatrix} \varphi^\alpha \\ 0 \end{pmatrix} \quad v(p=0) = \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi^\alpha \end{pmatrix} \quad (295)$$

transforman como

$$u^\alpha(p_x) = \cosh \frac{w}{2} \begin{pmatrix} \varphi^\alpha \\ -i\sigma_1 \tanh \frac{w}{2} \varphi^\alpha \end{pmatrix}, \quad v^\alpha(p_x) = \cosh \frac{w}{2} \begin{pmatrix} -i\sigma_1 \tanh \frac{w}{2} \varphi^\alpha \\ \varphi^\alpha \end{pmatrix} \quad (296)$$

con $\alpha = 1, 2$ y

$$\begin{aligned} -\tanh \frac{w}{2} &= \frac{-\tan w}{1 + \sqrt{1 - \tanh^2 w}} = \frac{\frac{v_x}{c}}{1 + \sqrt{1 - \left(\frac{v_x}{c}\right)^2}} = \frac{-p_x c}{E + mc^2} \\ \cosh \frac{w}{2} &= \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \end{aligned} \quad (297)$$

Por tanto

$$u(p_x) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} \varphi^\alpha \\ \frac{\sigma_1 p_x c}{E + mc^2} \varphi^\alpha \end{pmatrix}, \quad v(p_x) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} \frac{\sigma_1 p_x c}{E + mc^2} \varphi^\alpha \\ \varphi^\alpha \end{pmatrix} \quad (298)$$

La solución general, para un boost en x, y, z , los espinores de Dirac se expresa

$$u^\alpha(p) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} \varphi^\alpha \\ \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E + mc^2} \varphi^\alpha \end{pmatrix}, \quad v^\alpha(p) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2mc^2}} \begin{pmatrix} \frac{c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E + mc^2} \varphi^\alpha \\ \varphi^\alpha \end{pmatrix} \quad (299)$$

Para partícula en reposo al aplicar el boost el producto de cuadvectores queda en la forma

$$\pm mc^2 t \longrightarrow \pm \vec{p} \cdot \vec{x} \quad (300)$$

Entonces un paquete de soluciones de la ecuación de Dirac se expresaría en la forma:

$$\psi(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \{a^\alpha(p) u^\alpha(p) e^{-ip \cdot x} + b^\alpha(p)^* v^\alpha(p) e^{ip \cdot x}\} \quad (301)$$

el cual considera partículas de espín $\alpha = 1, 2$ y estados de energía positiva $u^\alpha(p)$ y energía negativa $v^\alpha(p)$.

La ecuación de Dirac en la representación de los momentos se obtiene aplicando el operador $(i\not{D} - m)$, donde hacemos $\hbar = c = 1$, al paquete de onda. El operador entra a la integral sobre el momento y $(i\gamma^{mu}\partial_\mu) - mI$ la matriz de Dirac actúa sobre los espinores $u^\alpha(p)$ y $v^\alpha(p)$ y la derivada actúa sobre la exponencial

$$\begin{aligned} (i\not{D} - m) \psi(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \{a^\alpha(p) (\not{p} - m) u^\alpha(p) e^{-ip \cdot x} - b^\alpha(p)^* (\not{p} + m) v^\alpha(p) e^{ip \cdot x}\} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (302)$$

la cual implica que cada solución obedece la ecuación

$$\begin{aligned} (\not{p} - m) u^\alpha(p) &= 0, \\ (\not{p} + m) v^\alpha(p) &= 0 \end{aligned} \quad (303)$$

9 Paradoja de Klein

Consideremos un potencial de la forma

La partícula se lanza con momento k_1 y energía E y espín $+\frac{1}{2}$ hacia el pozo. Asumiendo que una porción se refleja y otra se transmite y ambos con dos componentes de espín. Hallar los coeficientes de reflexión y transmisión.

Proponemos las funciones de onda de la forma

$$\psi(x; t) = e^{-i(Et-kz)} U(k) \quad (304)$$

y la ecuación de Dirac en la forma

$$Eu(k) = (\alpha_3 k + V(z) + \beta m)U(k) \quad (305)$$

Para la región donde el potencial $V(z) = 0, V_0$ el espinor es de la forma:

$$u(k) = \begin{pmatrix} \varphi^{(\alpha)} \\ \frac{\sigma_3 k}{E+m} \varphi^{(\alpha)} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \varphi^{(\alpha)} \\ \frac{\sigma_3 k}{E-V_0+m} \varphi^{(\alpha)} \end{pmatrix} \quad (306)$$

Para la onda incidente escribimos.

$$\psi_{inc}(z) = Ae^{ik_1 z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{k_1}{E+m} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (307)$$

Para la onda reflejada, suponiendo espín arriba y abajo:

$$\psi_{ref}(z) = Be^{-ik_1 z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-k_1}{E+m} \\ 0 \end{pmatrix} + Ce^{-ik_1 z} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{k_1}{E+m} \end{pmatrix} \quad (308)$$

donde k_1 se obtiene exigiendo que ψ_{inc} satisfaga la ecuación de Dirac (305)

$$E = k_1 \cdot \frac{k_1}{E + m} + m \quad (309)$$

$$k_1 = \sqrt{E^2 - m^2}$$

Para la onda transmitida se propone

$$\psi_{inc}(z) = De^{ik_2z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{k_2}{E-V_0+m} \\ 0 \end{pmatrix} + Ee^{ik_2z} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-k_2}{E-V_0+m} \end{pmatrix} \quad (310)$$

y exigiendo que satisfaga la ecuación de Dirac (350)

$$E = k_2 \cdot \frac{k_2}{E - V_0 + m} + V_0 + m \quad (311)$$

$$k_2 = \sqrt{(E - V_0)^2 - m^2}$$

si imponemos la condición de continuidad en $Z = 0$

$$\psi_{inc}(z = 0) + \psi_{refl}(z = 0) = \psi_{trans}(z = 0) \quad (312)$$

considerando los dos primeras componentes de energía positiva,

tenemos:

$$A + B = D \quad (313)$$

$$C = E$$

y las otras dos componentes de energía negativa:

$$(A - B) \cdot \frac{k_1}{E + m} = D \frac{k_2}{E - V_0 + m} \quad (314)$$

$$C \frac{k_1}{E + m} = E \frac{-k_2}{E - V_0 + m}$$

De la tercera y cuarta ecuación se obtiene $C = E = 0$ es decir, en la onda reflejada y transmitida no hay flip del espín, la onda siempre conserva su espín arriba. Realizando un poco de álgebra se obtiene:

$$R = \frac{B}{A} = \frac{(1-r)^2}{(1+r)^2} \quad T = \frac{D}{A} = \frac{4r}{(1+r)^2} \quad (315)$$

donde

$$r = \frac{k_2}{k_1} \frac{E + m}{E - V_0 + m} \quad (316)$$

si $|E_1 - V_0| < mc^2$ entonces $k_2 = i|k_2|$ y la onda transmitida cae exponencialmente. Para si aumentamos el potencial de tal forma que $|E_2 - V_0| > mc^2$ entonces la onda no decae sino que sigue oscilatoria dentro del potencial.

ILUSTRACION – Pag – 62

Para el caso en el cual $V_0 > E + mc^2$, $r < 0$, $R > 1$ y $T < 0$. Es decir, hay una corriente transmitida negativa y la reflejada es mayor que la incidente.

10 Función de Green de la Ecuación de Dirac

La función de Green se define como el operador que satisface la ecuación

$$(i\partial' - m)S(x' - x) = i\delta^4(x' - x) \quad (317)$$

suponiendo que vale para todo el espacio, i.e., que no hay fronteras. La función delta de Dirac y la función de Green se pueden escribir en la forma:

$$\begin{aligned}\delta^4(x' - x) &= \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{-ip \cdot (x' - x)} \\ S(x' - x) &= \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} S(p) e^{-ip \cdot (x' - x)}\end{aligned}\tag{318}$$

y reemplazando en la ecuación de Dirac se obtiene

$$S(p) = \frac{i}{\not{p} - m} = \frac{i(\not{p} + m)}{p^2 - m^2 \pm i\epsilon}\tag{319}$$

donde el factor $+i\epsilon$ permite escoger el polo del propagador y definir físicamente la función de Green para determinar como se propagan los modos de energía positiva o negativa. El denominador se puede escribir en la forma

$$\begin{aligned}p^2 - m^2 \pm i\epsilon &= p_0^2 - \vec{p}^2 - m^2 \pm i\epsilon \\ &= p_0^2 - (\vec{p}^2 + m^2) \pm i\epsilon \\ &= p_0^2 - E^2 \pm i\epsilon \\ &= (p_0 - E \pm i)(p_0 + E \pm i\epsilon)\end{aligned}\tag{320}$$

y la función de Green:

$$S(x' - x) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int \frac{dp_0}{(2\pi)} \frac{e^{i\vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})} e^{-ip_0(t' - t)} i(\not{p} + m)}{(p_0 - E + i\epsilon)(p_0 + E - i\epsilon)}\tag{321}$$

donde solo escogimos dos formas posibles de escoger los polos. Están permiten una interpretación de la función de Green que tiene relación física con la propagación de las partículas hacia el futuro, $t' - t > 0$, y las antipartículas hacia el pasado, $t' - t < 0$.

Consideremos el caso donde $t' - t < 0$ y escogemos el camino de integración Ca . En este caso tenemos un polo en

$$z = -E + i\epsilon$$

y una z_a sobre el camino a es

$$z_a = \alpha + i\beta \quad \beta > 0$$

. Para realizar la integral sobre p_0 tomamos la extensión analítica en el plano complejo y realizamos la integral cerrada:

$$\oint \frac{dz}{2\pi} \frac{e^{-iz(t'-t)}}{(z - E + i\epsilon)(z + E - i\epsilon)} = \int_{Ca} \frac{dz}{2\pi} \frac{e^{-iz(t'-t)}}{z^2 - E^2} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \frac{e^{-ip_0(t'-t)}}{(p_0 - E + i\epsilon)(p_0 + E - i\epsilon)} \quad (322)$$

La integral sobre Ca es cero porque

$$e^{-iz_a(t'-t)} = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} e^{-i(\alpha+i\beta)(t'-t)} = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} e^{-i\alpha(t'-t)} e^{\beta(t'-t)} = 0 \quad (323)$$

usando el teorema del residuo evaluamos la integral $\oint dz$ en el polo $z = -E + i\epsilon$ i.e.

$$\begin{aligned} \int \frac{p_0}{2\pi} \frac{e^{-ip_0(t'-t)} i(\not{p} + m)}{p_0^2 - E^2} &= + \frac{2\pi i}{2\pi} \frac{e^{-iz(t'-t)} i(\not{p} + m)}{z - E} \Big|_{z=-E} \\ &= -\frac{1}{2E} e^{iE(t'-t)} (-E\gamma^0 - \vec{p} \cdot \vec{\gamma} + m) \end{aligned} \quad (324)$$

ILUSTRACION – Pag – 65

Para el caso donde $t' - t > 0$, escogemos el camino de integración Cb donde tenemos el polo en

$$z = E - i\epsilon \quad (325)$$

$$z_b = \alpha - i\beta \quad \beta > 0$$

realizando la integral cerrada y tomando la extensión analítica:

$$\oint \frac{dz}{2\pi} \frac{e^{-iz(t'-t)}}{(z-E+i\epsilon)(z+E-i\epsilon)} = \int \frac{dz}{2\pi} \frac{e^{-iz(t'-t)}}{z^2-E^2} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{2\pi} \frac{e^{-ip_0(t'-t)}}{(p_0-E+i\epsilon)(p_0+E-i\epsilon)} \quad (326)$$

La integral sobre el camino C^b es cero porque

$$e^{-iz_b(t'-t)} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} e^{-i(\alpha-i\beta)(t'-t)} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} e^{-i\alpha(t'-t)} e^{-\beta(t'-t)} = 0 \quad (327)$$

La integral cerrada se evalúa con el teorema del residuo en $z = E$

$$\begin{aligned} \int \frac{dp_0}{2\pi} \frac{e^{-ip_0(t'-t)} i(\not{p} + m)}{p_0^2 - E^2} &= -\frac{2\pi i}{2\pi} i \frac{e^{-iz(t'-t)} (\not{p} + m)}{z + E} \Big|_{z=E} \\ &= +\frac{1}{2E} e^{-iE(t'-t)} (E\gamma^0 - \vec{p} \cdot \vec{\gamma} + m) \end{aligned} \quad (328)$$

considerando la contribución de los dos polos para $t' - t > 0$ y $t' - t < 0$ y cambiando en la integral $d^3\vec{p}$ para $t' - t < 0$ el cambio de variable obtenemos:

$$S_F(x' - x) = \theta(t' - t) \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} e^{-i\vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})} \Lambda_+(p) + \theta(t - t') \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} e^{i\vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})} \Lambda_-(p) \quad (329)$$

donde se definieron los operadores de proyección

$$\Lambda_{\pm}(p) = \frac{\pm(\not{p} + m)}{2m} \quad (330)$$

donde $\Lambda_+(p)$ proyecta estados de energía positiva y $\Lambda_-(p)$ proyecta estados de energía negativa, i.e.,

$$\begin{aligned} \Lambda_+(p)u^{(\alpha)}(p) &= u^{(\alpha)}(p) & \Lambda_-(p)u^{(\alpha)}(p) &= 0 \\ \Lambda_+(p)v^{(\alpha)}(p) &= 0 & \Lambda_-(p)v^{(\alpha)}(p) &= v^{(\alpha)}(p) \end{aligned} \quad (331)$$

Por tanto, la función de Green propaga estados de energía positiva hacia el futuro y estados de energía negativa hacia el pasado.

11 Teoría de Perturbaciones Independientes del Tiempo

No degeneradas

Supongamos que el problema de mecánica cuántica asociado a H_0 está resuelto de forma analítica:

$$H_0 \varphi_n(x) = E_n^{(0)} \varphi_n(x) \quad (332)$$

lo llamaremos el problema no-perturbado y las autoenergías $E_n^{(0)}$ son no-degeneradas.

Si se introduce una perturbación pequeña, λ , donde el nuevo Hamiltoniano se escribe como:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_p \\ &= H_0 + \lambda W \quad \lambda < 1. \end{aligned} \quad (333)$$

y las autoenergías y autofunciones son corregidas igualmente, pero el nuevo Hamiltoniano no tiene solución exacta.

Se propone el problema cuántico de la forma:

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad (334)$$

donde la función de onda ψ_n se puede escribir en función de la base de H_0 , i.e., $\{\varphi_n(x)\}$.

Se hace una expansión perturbativa de ψ_n y E_n de tal forma que cuando $\lambda \rightarrow 0$ entonces $\psi_n, E_n \rightarrow \psi_n^{(0)}, E_n^{(0)}$. El método desarrollado solo vale para autofunciones $\varphi_n(x)$ no-degeneradas.

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k E_n^{(k)} \end{aligned} \quad (335)$$

$$\begin{aligned}
\psi_n &= \phi_n + \lambda \phi_n^{(1)} + \lambda^2 \phi_n^{(2)} + \dots \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \phi_n^{(k)}.
\end{aligned} \tag{336}$$

Reemplazando en el Hamiltoniano perturbado y teniendo en cuenta la solución cero, no-perturbada, el problema se puede resolver de forma perturbativa orden a orden en λ . Para que las series sean convergentes se requiere que $\lambda < 1$. Entonces del problema

$$H\psi_n = E_n\psi_n \tag{337}$$

obtenemos:

$$(H_0 + \lambda W) \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \psi_n^{(k)} = \left(\sum_{l=0}^{\infty} \lambda^l E_n^{(l)} \right) \left(\sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r \psi_n^{(r)} \right). \tag{338}$$

Resolvemos a orden λ , primer orden, y posteriormente a orden $k - Th$. Por notación, tenemos que $\psi_n^{(0)} \equiv \phi_n$. Expandiendo a ambos lados de la ecuación a orden λ ,

$$H_0\phi_n + \lambda (H_0\psi_n^{(1)} + W\phi_n) \approx E_n^{(0)}\phi_n + \lambda (E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\phi_n) \tag{339}$$

El orden λ del lado derecho viene del producto de dos series donde $l + r = 1$ el cual tiene dos soluciones: $l = 0, r = 1$ y $l = 1, r = 0$. Igualando los dos ordenes λ^0, λ^1 tenemos:

$$H_0\phi_n = E_n^{(0)}\phi_n \tag{340}$$

$$H_0\psi_n^{(1)} + W\phi_n = E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\phi_n.$$

Para simplificar el análisis tendremos en cuenta la siguiente aproximación:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_n | \psi_n \rangle &= \left\langle \phi_n \left| \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \psi_n^{(k)} \right. \right\rangle \\
 &= \langle \phi_n | \phi_n \rangle + \sum_{k=1}^{\infty} \langle \phi_n | \psi_n^{(k)} \rangle \\
 &= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \langle \phi_n | \psi_n^{(k)} \rangle \\
 &= 1
 \end{aligned} \tag{341}$$

Por tanto:

$$\langle \phi_n | \psi_n^{(k)} \rangle \approx 0 \quad \forall k = 1, 2, 3, \dots, \tag{342}$$

es decir, las correcciones a ϕ_n viven en un espacio ortogonal a ϕ_n .

Multiplicando la ecuación (340) por la base $\langle \phi_n |$, obtenemos:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_n | H_0 | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle &= E_n^{(0)} \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \phi_n | \phi_n \rangle \\
 E_n^{(0)} \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle &= E_n^{(1)} \langle \phi_n | \phi_n \rangle \\
 E_n^{(1)} &= \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle.
 \end{aligned} \tag{343}$$

Por tanto, la corrección a orden λ^1 a la energía es el valor esperado de la perturbación.

Para hallar la corrección a orden λ^1 a la función de onda, $\psi_n^{(1)}$, multiplicamos la ecuación

(340) por $\langle \phi_m |$ para $m \neq n$:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_m | H_0 | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_m | W | \phi_n \rangle &= E_n^{(0)} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \phi_m | \phi_n \rangle \\
 E_m^{(0)} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_m | W | \phi_n \rangle &= E_n^{(0)} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle
 \end{aligned} \tag{344}$$

Despejando obtenemos:

$$\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle = \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \tag{345}$$

Usando la relación de completez en la base $\{\phi_n(x)\}$, expandimos $\psi_n^{(1)}$ como:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} |\phi_m\rangle \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle \quad (346)$$

la suma sobre m se excluye porque $\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle \approx 0$. Por tanto, la corrección a la función de onda a primer orden es

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} |\phi_m\rangle \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (347)$$

La función de onda total sería:

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= |\phi_n\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} |\phi_m\rangle \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ &= |\phi_n\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} |\phi_m\rangle \frac{\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \end{aligned} \quad (348)$$

La condición de este esquema perturbativo solo vale para sistemas no-degenerados como se ve en el denominador para la función de onda donde $E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \neq 0 \forall m, n$.

Resolvamos el caso general para λ^k . Tomando el lado derecho de la pagina 61, tenemos:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^{r+l} E_n^{(l)} \psi_n^{(r)} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \lambda^k E_n^{(l)} \psi_n^{(k-l)} \quad (349)$$

donde de definió $r + l = k$ y se reemplaza $r = k - l$.

Regresando a la ecuación de la página 65

$$\sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k (H_0 \psi_n^{(k)} + W \psi_n^{(k-1)}) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \sum_{l=0}^k E_n^{(l)} \psi_n^{(k-l)} \quad (350)$$

igualando orden λ^k ambos lados de la ecuación:

$$\begin{aligned} H_0 \psi_n^{(k)} + W \psi_n^{(k-1)} &= \sum_{l=0}^k E_n^{(l)} \psi_n^{(k-l)} \\ &= E_n^{(0)} \psi_n^{(k)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(k-1)} + \dots + E_n^{(k-1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(k)} \psi_n^{(0)} \\ &= E_n^{(0)} \psi_n^{(k)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(k-1)} + \dots + E_n^{(k-1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(k)} \varphi_n. \end{aligned} \quad (351)$$

Para hallar la energía y función de onda a orden $k - Th$ i.e. $E_n^{(k)}$, $\psi_n^{(k)}$ multiplicamos por $\langle \phi_n |$ y $\langle \phi_m |$ con $m \neq n$, respectivamente. Se supone que el orden a ordenes anteriores ya están resueltos. Para el primer caso tenemos:

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | H_0 | \psi_n^{(k)} \rangle + \langle \phi_n | W | \psi_n^{(k-1)} \rangle &= E_n^{(0)} \langle \phi_n | \phi_n^{(k)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \phi_n | \phi_n^{(k-1)} \rangle + \dots + E_n^{(k-1)} \langle \phi_n | \phi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(k)} \\ \langle \phi_n | W | \psi_n^{(k-1)} \rangle &= E_n^{(1)} \langle \phi_n | \phi_n^{(k-1)} \rangle + \dots + E_n^{(k-1)} \langle \phi_n | \phi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(k)} \end{aligned} \quad (352)$$

teniendo en cuenta que $\langle \phi_n | \psi_n^{(k)} \rangle \approx 0$,

$$E_n^{(k)} \approx \langle \phi_n | W | \psi_n^{(k-1)} \rangle. \quad (353)$$

cuando se resuelve el caso para λ^k se supone que λ^{k-1} esta resuelto i.e. $|\psi_n^{(k-1)}\rangle$ es ya conocido. Veremos explícitamente para $k = 2$ usando $k = 1$.

Para calcular la función de onda usamos la relación de completez

$$|\psi_n^{(k)}\rangle = \sum_{m \neq n} |\phi_m\rangle \langle \phi_m | \psi_n^{(k)} \rangle \quad (354)$$

y multiplicando por $\langle \phi_m |$ entonces:

$$\begin{aligned} \langle \phi_m | H_0 | \psi_n^{(k)} \rangle + \langle \phi_m | W | \psi_n^{(k-1)} \rangle &= E_n^{(0)} \langle \phi_m | \psi_n^{(k)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \phi_m | \psi_n^{(k-1)} \rangle + \dots + E_n^{(k-1)} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(k)} \langle \phi_m | \psi_n^{(k)} \rangle \\ E_m^{(0)} \langle \phi_m | \psi_n^{(k)} \rangle + \langle \phi_m | W | \psi_n^{(k-1)} \rangle &= E_n^{(0)} \langle \phi_m | \psi_n^{(k)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \phi_m | \psi_n^{(k-1)} \rangle + \dots + E_n^{(k-1)} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle \end{aligned} \quad (355)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \langle \phi_m | \psi_n^{(k)} \rangle &= \langle \phi_m | W | \psi_n^{(k-1)} \rangle - \sum_{j=1}^{k-1} E_n^{(j)} \langle \phi_m | \psi_n^{(k-j)} \rangle \\ \langle \phi_m | \psi_n^{(k)} \rangle &= \frac{\langle \phi_m | W | \psi_n^{(k-1)} \rangle - \sum_{j=1}^{k-1} E_n^{(j)} \langle \phi_m | \psi_n^{(k-j)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \end{aligned} \quad (356)$$

Por tanto,

$$|\psi_n^{(k)}\rangle = \sum_{m \neq n} |\phi_m\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \{ \langle \phi_m | W | \psi_n^{(k-1)} \rangle - \sum_{j=1}^{k-1} E_n^{(j)} \langle \phi_m | \psi_n^{(k-j)} \rangle \}. \quad (357)$$

Calculemos el caso de $k = 2$ i.e. segundo orden en teoría de perturbaciones, donde el orden $k = 1$ es conocido. Primero hallemos la energía:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle \phi_m | W | \psi_n^{(1)} \rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_n | W | \phi_m \rangle \langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_n | W | \phi_m \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \end{aligned} \quad (358)$$

Para calcular la función de onda a segundo orden en perturbaciones, tenemos:

$$\begin{aligned} |\psi_n^{(2)}\rangle &= \sum_{m \neq n} \frac{|\phi_m\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \{ \langle \phi_m | W | \phi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle \} \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\phi_m\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle \phi_m | W - E_n^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \sum_{l \neq n} |\phi_m\rangle \frac{\langle \phi_m | W | \phi_l \rangle \langle \phi_l | W | \phi_m \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \sum_{m \neq n} \sum_{l \neq n} |\phi_m\rangle \frac{\langle \phi_n | W | \phi_n \rangle \langle \phi_m | \phi_l \rangle \langle \phi_l | W | \phi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} \\ &= \sum_{m \neq n} \sum_{l \neq n} |\phi_m\rangle \frac{\langle \phi_m | W | \phi_l \rangle \langle \phi_l | W | \phi_m \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \sum_{m \neq n} \sum_{l \neq n} |\phi_m\rangle \frac{\langle \phi_n | W | \phi_n \rangle \delta_{lm} \langle \phi_l | W | \phi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} \\ &= \sum_{m \neq n} \sum_{l \neq n} |\phi_m\rangle \frac{\langle \phi_m | W | \phi_l \rangle \langle \phi_l | W | \phi_m \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \sum_{m \neq n} |\phi_m\rangle \frac{\langle \phi_n | W | \phi_n \rangle \langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2} \end{aligned} \quad (359)$$

12 Pozo Infinito - Perturbación Constante

Consideremos un pozo de potencial infinito de ancho a e introducimos una perturbación constante de la forma:

$$V(x) = 0 \quad 0 \leq x \leq a; \quad \infty \quad x < 0 \cap x > a \quad (360)$$

$$H_p(x) = V_0 \quad 0 \leq x \leq a; \quad \infty \quad x < 0 \cap x > a \quad (361)$$

Resolver el problema del pozo a orden cero y calcular las correcciones a orden 1 y 2 debidos a $H_p(x)$.

Consideraciones generales:

El principio de incertidumbre establece que

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar \quad (362)$$

En el pozo de potencial el valor máximo para $\Delta x \approx a$. Por tanto, el valor mínimo de Δp es

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{a} \quad (363)$$

De igual manera la ??? energía cinética para una partícula en el pozo es:

$$\Delta E \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (364)$$

Por tanto, una partícula dentro del pozo no puede estar en reposo. Considerando la función de onda para el estado fundamental

$$\begin{aligned} \phi_n^{(0)} &= \sin \frac{n\pi}{a} x \\ E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \end{aligned} \quad (365)$$

implica que $n \neq 0$. Por tanto:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Entonces para el pozo de potencial tenemos la ecuación diferencial

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi = 0 \quad (366)$$

donde el potencial es cero en $0 \leq x \leq a$ e infinito en la frontera, lo cual impone condiciones de frontera

$$\phi(x=0) = \phi(x=a) = 0. \quad (367)$$

La solución de la ecuación diferencial se escribe en la forma:

$$\phi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (368)$$

Por tanto

$$\phi(x=0) = 0 \longrightarrow B = 0 \quad (369)$$

$$\phi(x=a) = 0 \longrightarrow \sin ka = 0 \quad ka = n\pi; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Para el orden cero, la función de onda y la energía son:

$$\phi_n(x) = A_n \sin \frac{n\pi}{a}x \quad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2 n^2}{2ma^2} \quad (370)$$

donde A_n se determina imponiendo la normalización de la función de onda i.e.

$$\int_0^a |\phi_n(x)|^2 dx = 1 \quad \longrightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (371)$$

Conociendo el orden cero, ahora podemos determinar la corrección a la energía a primer orden en teoría de perturbaciones

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle \phi_n(x) | H_p | \phi_n(x) \rangle \\ &= V_0 \langle \phi_n(x) | \phi_n(x) \rangle = V_0 \end{aligned} \quad (372)$$

Por tanto, la energía del n -estado corregida a primer orden es

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)}, \\ &= E_n^{(0)} + V_0. \end{aligned} \quad (373)$$

Para el segundo orden a la energía, tenemos:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_n | H_p | \phi_m \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{V_0 |\langle \phi_n | \phi_m \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \\ &= 0 \end{aligned} \quad (374)$$

Para la función de onda, la ecuación es:

$$\begin{aligned} \psi_n^{(1)} &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = V_0 \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = 0, \\ \psi_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{|\phi_m\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \{ \langle \phi_m | W - E_n^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle \}, \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\phi_m\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} V_0 \langle \phi_m | \phi_n \rangle = 0, \end{aligned} \quad (375)$$

13 Pozo Infinito con una Perturbación Periódica

Sea la perturbación de la forma $H_p = -A \sin \frac{\pi x}{a}$, $A = \frac{\hbar^2 \pi^3}{4ma^2}$.

A primer orden, la energía esta dada por:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle \phi_n | H_p | \phi_n \rangle \\ &= -A \left(\frac{2}{a} \right) \int_0^a \left(\sin \frac{n\pi x}{a} \right)^2 \sin \left(\frac{\pi x}{a} \right) dx \\ &= -\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \frac{4n^2}{4n^2 - 1} \end{aligned} \quad (376)$$

La energía total sería la suma del orden cero y el primer orden en perturbaciones:

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)}, \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{4}{4n^2 - 1} \right). \end{aligned} \quad (377)$$

La corrección a la función de onda a primer orden para $n = 1$ se calcula de la forma

$$\begin{aligned}
 \psi_{n=1}^{(1)}(x) &= \sum_{m \neq 1} \frac{|\phi_m^{(0)}\rangle}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle \phi_m^{(0)} | H_p | \phi_1^{(0)} \rangle \\
 &= - \sum_{m \neq 1} \frac{|\phi_m^{(0)}\rangle}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} A \left(\frac{2}{a} \right) \int_0^a \sin^2 \frac{\pi x}{a} \sin \left(m \frac{\pi x}{a} \right) dx \\
 &= - \frac{8A}{\pi} \sum_{m=3,5,\dots} \frac{1}{m(m^2 - 4)} \frac{1}{E_1^{(0)} - E_j^{(0)}} |\phi_m^{(0)}\rangle \\
 &= \frac{4}{\pi} \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{m=3,5,\dots} \frac{1}{m(m^2 - 4)(m^2 - 1)} \sin m \frac{\pi x}{a}
 \end{aligned} \tag{378}$$

14 Oscilador Armónico

Veamos otros ejemplos de perturbaciones asociadas con el oscilador armónico, pero antes desarrollemos el formalismo de los operadores escalera el cual es muy importante para estudiar la teoría cuántica de campos.

El Hamiltoniano está dado por la ecuación

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \tag{379}$$

donde las soluciones se conocen como polinomios de *Hermit*

$$\begin{aligned}
 \phi_n(x) &= C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \\
 x = \alpha_0 \xi &= \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \xi \quad C_n = (\sqrt{\pi} \alpha_0 2^n n!)^{-\frac{1}{2}} \\
 H_n(\xi) &= (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}
 \end{aligned} \tag{380}$$

y la energía esta dada por:

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \tag{381}$$

Veamos otra forma de resolver el oscilador armónico cuántico.

Introducimos los operadores "escalera" \hat{a} , \hat{a}^\dagger y para simplificar la notación omitiremos $\hat{\cdot}$.

Definimos los operadores \hat{x} y \hat{p} de la forma la cual es muy sugestiva por la hermiticidad de \hat{x} y \hat{p} :

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger), \\ p &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-a + a^\dagger). \end{aligned} \quad (382)$$

Reescribiendo el Hamiltoniano en función de a y a^\dagger obtenemos

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2, \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4}(+a a + a^\dagger a^\dagger - a a^\dagger - a^\dagger a) + \frac{\hbar\omega}{4}(a a + a^\dagger a^\dagger + a a^\dagger + a^\dagger a) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}(a^\dagger a + a a^\dagger). \end{aligned} \quad (383)$$

El principio de incertidumbre de *Heisenberg*, en función de los operadores a y a^\dagger , se escribe en la forma:

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] &= \frac{i\hbar}{2} [a + a^\dagger, -a + a^\dagger] \\ &= i\frac{\hbar}{2} \{-[a, a] + [a^\dagger, a^\dagger] + 2[a, a^\dagger]\} \\ &= i\hbar \end{aligned} \quad (384)$$

Para que se satisfaga, definiremos nuevas reglas de conmutación en función de los operadores a y a^\dagger :

Utilizando la última identidad en el Hamiltoniano, éste se escribe de una manera muy compacta:

$$H_0 = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (386)$$

lo cual es muy sugestiva porque permite otra formulación equivalente del oscilador armónico cuántico. Definamos el operador número de partículas

$$\hat{N} |n\rangle = a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle \quad (387)$$

donde el estado $|n\rangle$ contiene n -partículas y es una autofunción de \hat{N} y también de H_0 cuyo autovalor es

$$\begin{aligned} H_0 |n\rangle &= \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle, \\ &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle, \end{aligned} \quad (388)$$

es decir, recuperamos la energía del oscilador armónico,

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (389)$$

A \hat{N} se le llama el operador número de partículas porque el autovalor del estado $|n\rangle$ es n y decimos que su estado tiene n cuantos de energía $\hbar\omega$.

Veamos algunas relaciones útiles para poder dar una interpretación a los nuevos operadores escalera. Primero demostremos las relaciones

$$\begin{aligned} [N, a] &= -a, \\ [N, a^\dagger] &= a^\dagger. \end{aligned} \quad (390)$$

Realicemos la primera a modo de ejemplo:

$$\begin{aligned} [N, a] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a, \\ &= 0 - a, \\ &= -a. \end{aligned} \quad (391)$$

Usando estas relaciones veamos cuál es el autovalor del número de partículas de los estados $a|n\rangle$, $a^\dagger|n\rangle$:

$$\begin{aligned} N(a^\dagger|n\rangle) &= (a^\dagger + a^\dagger N)|n\rangle \\ &= (n+1)(a^\dagger|n\rangle) \end{aligned} \quad (392)$$

Es decir, el estado $a^\dagger|n\rangle$ es un estado con autovalor, del operador número de partículas, $n+1$, entonces decimos que el operador a^\dagger incrementa el número de partículas en una unidad. Por tanto, estos dos estados son proporcionales y escribimos:

$$a^\dagger|n\rangle = C_{n+1}|n+1\rangle. \quad (393)$$

Para hallar la constante C_{n+1} multiplicamos por el adjunto la ecuación anterior,

$$\begin{aligned} \langle n|a a^\dagger|n\rangle &= C_{n+1}^* C_{n+1} \langle n+1|n+1\rangle \\ &= \langle n|a^\dagger a + 1|n\rangle \\ &= n+1. \end{aligned} \quad (394)$$

Realizado un procedimiento similar con $a|n\rangle$, tenemos las dos identidades para los estados $a^\dagger|n\rangle$ y $a|n\rangle$:

$$\begin{aligned} a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle. \end{aligned} \quad (395)$$

Por esta razón a éstos dos operadores se les llama escalera porque suben ó bajan el número de partículas de un estado en una unidad.

Veamos algunos valores esperados de operadores que son de utilidad para ver el poderío del método de cuantización con dichos operadores, los cuales usaremos cuando desarrollemos la teoría de perturbaciones al oscilador cuántico. Para el operador posición

$$\langle m|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle m|a + a^\dagger|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1}\} \quad (396)$$

De esta relación se inferen los casos particulares:

$$\begin{aligned}
 \langle n | \hat{x} | n \rangle &= 0, \\
 \langle n+1 | \hat{x} | n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1}, \\
 \langle n-1 | \hat{x} | n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n}.
 \end{aligned} \tag{397}$$

otro ejemplo útil más adelante es:

$$\begin{aligned}
 \langle m | \hat{x}^2 | n \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle m | a a + a^\dagger a^\dagger + a^\dagger a + a a^\dagger | n \rangle, \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \{ (2n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} \}.
 \end{aligned} \tag{398}$$

La cuantización del oscilador armónico usando este método es muy poderoso en la cuantización de los campos. Supongamos una cuerda continua clásica. Dicha cuerda se puede reducir a un conjunto de N osciladores armónicos con N tendiendo a infinito, suponiendo que la masa de un oscilador armónico dividida por la distancia entre los dos, cuando esta tiende a cero, se aproxima a la densidad de masa longitudinal de la cuerda. Entonces podríamos ver una cuerda continua desde el punto de vista cuántico como una colección de N osciladores armónicos cuánticos. Para ilustrar uno de los problemas de la cuantización de los campos continuos, calculemos la energía cuántica de la cuerda asumiendo que es una colección de N osciladores cuánticas cuando $N \rightarrow \infty$,

$$E = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{i=1}^N \hbar\omega_i n_i + \sum_{i=1}^N \frac{\hbar\omega_i}{2} \right) \tag{399}$$

El primer término no necesariamente es infinito porque depende del número de ocupación n_i de cada oscilador de la cuerda, pero el segundo término es infinito y justo es uno de los problemas de la teoría cuántica de campos ó medios continuos. Si suponemos que no hay

estados excitados i.e. $n_i = 0$ entonces estamos en un estado cuántico de cero ocupación o cero partículas el cual se llama el estado vacío del sistema. Entonces la energía del estado vacío es

$$E = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N \frac{\hbar\omega_i}{2} \rightarrow \infty. \quad (400)$$

Una forma de resolver este problema de energía infinita del estado base es expresar la energía de los estados excitados respecto al vacío y de esta forma se cancela este infinito en todos los niveles.

15 Oscilador Armónico con Perturbación $q E \hat{x}$

El nuevo Hamiltoniano sería entonces

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_p, \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + qEx, \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \quad (401)$$

donde $y = x + \frac{qE}{m\omega^2}$. Dicha perturbación se puede resumir y el problema admite solución exacta. Sin embargo, tratemos el problema como una perturbación y comparemos con la solución exacta, como una manera de probar el método. La solución exacta predice que la energía es

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}. \quad (402)$$

Usando la teoría de perturbaciones tenemos

$$\begin{aligned}
 E_n^{(1)} &= qE \langle n | \hat{x} | n \rangle, \\
 &= qE \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left\{ \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n-1,n} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n+1,n} \right\}, \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{403}$$

Para el segundo orden en la energía, tenemos

$$E_n^{(2)} = q^2 E^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{x} | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{404}$$

donde debemos calcular los elementos de matriz $\langle m | \hat{x} | n \rangle$.

El valor esperado es diferente de cero para $m = n + 1, n - 1$, i.e.,

$$\begin{aligned}
 E_n^{(2)} &= q^2 E^2 \left\{ \frac{|\langle n-1 | \hat{x} | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} + \frac{|\langle n+1 | \hat{x} | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} \right\}, \\
 &= q^2 E^2 \left\{ \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \right)^2 \frac{1}{\hbar\omega} + \frac{1}{-\hbar\omega} \left(\sqrt{\frac{n+1}{2}} \right)^2 \right\} \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)^2, \\
 &= -\frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}.
 \end{aligned} \tag{405}$$

Por tanto, la corrección a la energía hasta segundo orden:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} \tag{406}$$

la cual coincide con la energía obtenida por la solución exacta del problema.

La corrección a la función de onda a primer orden es

$$\begin{aligned}
 \psi_n^{(1)} &= qE \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \hat{x} | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle, \\
 &= qE \left\{ \frac{\langle n+1 | \hat{x} | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} |\phi_{n+1}\rangle + \frac{\langle n-1 | \hat{x} | n \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} |\phi_{n-1}\rangle \right\}, \\
 &= \frac{qE}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{n} \phi_{n-1}(x) - \sqrt{n+1} \phi_{n+1}(x) \},
 \end{aligned} \tag{407}$$

y la solución a primer orden es la suma:

$$\psi_n(x) \approx \phi_n^{(0)}(x) + \phi_n^{(1)}(x) \tag{408}$$

A primer orden veamos que todos los estados cuánticos del oscilador armónico que reciben corrección debido a esta perturbación. Como debemos calcular el valor esperado $\langle m | \hat{x} | n \rangle$, veamos para que valores de n, m éste es diferente de cero. Consideramos las correcciones a los estados: $n - 1, n - 2, n + 1, n + 2$

$$\begin{aligned}
 \psi_{n-1}^{(1)}(x) &= \frac{qE}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{n-1} \phi_{n-2}(x) - \sqrt{n} \phi_n(x) \}, \\
 \psi_{n-2}^{(1)}(x) &= \frac{qE}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{n-2} \phi_{n-3}(x) - \sqrt{n-1} \phi_{n-1}(x) \}, \\
 \psi_{n+1}^{(1)}(x) &= \frac{qE}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{n+1} \phi_n(x) - \sqrt{n+2} \phi_{n+2}(x) \}, \\
 \psi_{n+2}^{(1)}(x) &= \frac{qE}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \sqrt{n+2} \phi_{n+1}(x) - \sqrt{n+3} \phi_{n+3}(x) \},
 \end{aligned} \tag{409}$$

La nueva autofunción a primer orden es:

$$\psi_n(x) = A_n(\phi_n(x) + \psi_n^{(1)}(x)) \tag{410}$$

donde A_n es el factor de normalización dado por la expresión

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_n | \psi_n \rangle &= A_n^2 [\langle \phi_n | \phi_n \rangle + 2 \langle \psi_n^{(1)} | \phi_n \rangle + \langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle], \\
 &= A_n^2 \left[1 + \left(\frac{qE}{\hbar\omega} \right)^2 \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) \right]
 \end{aligned} \tag{411}$$

es decir

$$A_n = \frac{1}{\left[1 + \frac{(qE)^2}{2m\omega^3\hbar} (2n+1) \right]^{\frac{1}{2}}}. \tag{412}$$

Supongamos la partícula en el estado inicial $\phi_n(x)$ y aplicamos la perturbación, cuáles son las transiciones cuánticas a los nuevos autoestados de energía?.

Dichas transiciones son diferentes de cero a los estados $\psi_{n-1}(x)$, $\psi_n(x)$, $\psi_{n+1}(x)$ y las am-

plitudes de transición están dadas por:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{n-2} | \phi_n \rangle &= A_{n-2} \langle \psi_{n-2}^{(1)} | \phi_n \rangle, \\
&= \sqrt{n-2} \langle \phi_{n-3} | \phi_n \rangle - \sqrt{n-1} \langle \phi_{n-1} | \phi_n \rangle, \\
&= 0, \\
\langle \psi_{n-1} | \phi_n \rangle &= A_{n-1} \langle \psi_{n-1}^{(1)} | \phi_n \rangle, \\
&= -\frac{qE\sqrt{n}}{\sqrt{2m\omega^3\hbar}} A_{n-1}, \\
\langle \psi_n | \phi_n \rangle &= A_n \langle \phi_n + \phi_n^{(1)} | \phi_n \rangle, \\
&= A_n, \\
\langle \psi_{n+1} | \phi_n \rangle &= A_{n+1} \langle \phi_{n+1} + \psi_{n+1}^{(1)} | \phi_n \rangle, \\
&= A_{n+1} \frac{qE\sqrt{n+1}}{\sqrt{2m\omega^3\hbar}}, \\
\langle \phi_{n+2} | \phi_n \rangle &= 0.
\end{aligned} \tag{413}$$

Todos los estados de energía se corren la misma cantidad, la diferencia de energía de los estados sucesivos no cambia con el problema original.

Ilustracion Pag.86

En la anterior ilustración, las flechas indican las transiciones al aplicar la perturbación.

Las diferencias de energía entre diferentes estados son:

$$\begin{aligned}
E_n - E_n^{(0)} &= -\frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} \\
E_{n-1} - E_n^{(0)} &= -\hbar\omega - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} \\
E_{n+1} - E_n^{(0)} &= \hbar\omega \left(n + 1 + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} - \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \\
&= \hbar\omega - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}.
\end{aligned} \tag{414}$$

La otra transición sería

$$\begin{aligned}
 \varepsilon &= E_{n-1} - E_{n-2}^{(0)} \\
 &= \hbar\omega \left(n - 1 + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} - \hbar\omega \left(n - 2 + \frac{1}{2} \right) \\
 &= \hbar\omega - \frac{q^2 E^2}{2m\omega^2}.
 \end{aligned} \tag{415}$$

16 Átomo con Dos Electrones

Consideramos un átomo con dos electrones y supongamos que el potencial electrostático de interacción entre los electrones es una perturbación. Entonces el Hamiltoniano no perturbado corresponde al de cada electrón interactuando con el núcleo, i.e.,

$$H_0 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_2} \right) \tag{416}$$

La energía de n -ésimo nivel es dos veces la energía del átomo de Hidrógeno y la función de onda es el producto de funciones de onda. Para simplificar el problema consideramos los electrones en el primer nivel de energía, i.e. $n = 1$,

$$\begin{aligned}
 E_{n=1}^{(0)} &= -\frac{mZ^2e^4}{\hbar^2} \\
 \phi_{n=1}(r_1, r_2) &= (\pi a_0^3)^{-1} e^{-\frac{r_1}{a_0}} e^{-\frac{r_2}{a_0}}
 \end{aligned} \tag{417}$$

donde $a_0 = \frac{\hbar}{mZ\alpha c}$ y $\alpha c = \frac{e^2}{\hbar}$

El potencial electrostático entre los dos electrones del átomo de Helio genera la perturbación, de la forma:

$$H_p = \frac{e^2}{r_{12}} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \tag{418}$$

Por tanto, la corrección a la energía del estado base a primer orden en la teoría de pertur-

baciones es:

$$\begin{aligned}
E_{n=1}^{(1)} &= \langle \phi_{n=1}(r_1, r_2) | H_p | \phi_{n=1}(r_1, r_2) \rangle \\
&= \frac{e^2}{(\pi a_0^3)^2} \iint e^{-\frac{2(r_1+r_2)}{a_0}} \frac{1}{r_{12}} d^3 r_1 d^3 r_2 \\
&= \frac{e^2}{(\pi a_0^3)^2} (4\pi)^2 \int dr_1 r_1^2 e^{-\frac{2r_1}{a_0}} \left[\int_0^{r_1} \frac{e^{-\frac{2r_2}{a_0}}}{r_{12}} r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{2r_2}{a_0}}}{r_{12}} r_2^2 dr_2 \right].
\end{aligned} \tag{419}$$

En la primera integral sobre r_2 asumimos que $r_1 > r_2$ y usamos la "aproximación" $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \approx r_1$, para poder hallar una forma analítica a la integral. Para la segunda integral sobre r_2 , suponemos $r_2 > r_1$ y, por tanto, $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = r_{12} \approx r_2$. Con éstas aproximaciones las integrales son triviales y se obtiene:

$$E_{n=1}^{(0)} \approx \frac{5}{82} (mZ\alpha c)^2. \tag{420}$$

Para diferentes átomos, suponiendo que son Hidrogenoides se obtiene

	$-E_1^{(0)}$	$E_1^{(1)}$	$-E_1$	$-E_1 \quad \text{exp}$
He	108.87	34.01	74.82	79.08
Li	244.88	51.02	193.87	198.08
C	979.57	102.04	877.54	881.88

17 Teoría de Perturbaciones Degeneradas

Entendamos porque existe la degeneración en la energía en los sistemas físicos. Dichas degeneraciones están asociadas con simetrías en los sistemas físicos. Consideremos que un operador \hat{A} conmuta con el Hamiltoniano

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0 \tag{421}$$

y supongamos dos autofunciones del Hamiltoniano ψ, ψ' con autoenergías E, E' , respectivamente, tal que estas dos funciones están relacionadas de la forma:

$$\psi' = \hat{A}\psi. \quad (422)$$

Entonces $E = E'$ y por tanto son estados degenerados.

La demostración es muy simple:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi' &= E'\psi & \hat{H}\psi &= E\psi \\ \hat{H}\psi' &= \hat{H}(\hat{A}\psi) = \hat{A}(\hat{H}\psi) = E\hat{A}\psi = E\psi' \end{aligned} \quad (423)$$

Por tanto, $E = E'$.

Un ejemplo de operador \hat{A} es el momento angular \vec{L} en el átomo de Hidrógeno. El Hamiltoniano del átomo de Hidrógeno conmuta con L^2 y L_z

$$\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\} \quad (424)$$

Por esta razón hay degeneración para diferentes valores de l y m . Para un espacio de funciones ψ_{nlm} con un valor fijo de l hay $2l + 1$ funciones con diferente valor de m , las cuales son degeneradas porque estas funciones de diferente m se pueden conectar con los operadores escalera \hat{L}_+, \hat{L}_- , los cuales conmutan con \hat{H} ,

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{L}_\pm] &= 0, \\ \psi_{nlm\pm 1} &\approx \hat{L}_\pm \psi_{nlm} \end{aligned} \quad (425)$$

Pero como $[\hat{H}, \hat{L}_\pm] = 0$ entonces las dos tienen la misma energía $E_n^{(0)}$. De igual forma cualquier potencia de los operadores \hat{L}_\pm

$$\psi_{nlm\pm r} \approx (\hat{L}_\pm)^r \psi_{nlm} \quad (426)$$

la cual es cero cuando $m \pm (r + 1) = \pm l$. Antes de presentar la teoría de perturbaciones degeneradas, estudiaremos el problema de autovalores para una matriz 2×2 . El problema cuántico se reduce a diagonalizar una matriz y resolver el problema de autovalores. Entonces:

$$\begin{aligned} M \vec{X} &= \lambda \vec{X} \\ (M - \lambda I) \vec{X} &= 0 \end{aligned} \tag{427}$$

Tiene solución \vec{X} no trivial, es decir, $\vec{X} \neq \vec{0}$ si y solo si

$$\begin{aligned} \det(M - \lambda I) &= 0 \\ \det \begin{bmatrix} a - \lambda & b \\ b & c - \lambda \end{bmatrix} &= 0 \end{aligned} \tag{428}$$

El polinomio característico es de grado igual a la dimensión de la matriz. En este caso e

$$\begin{aligned} \lambda^2 - (a + c)\lambda + ac - b^2 &= 0 \\ 2 \lambda_{1,2} &= a \pm c \pm [(a - c)^2 + 4b^2]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{429}$$

Para un valor dado de λ debemos hallar el respectivo autovector y con cada uno de ellos se repite el mismo procedimiento. Hagamos lo para λ_i ,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(i)} \\ x_2^{(i)} \end{pmatrix} &= \lambda_i \begin{pmatrix} x_1^{(i)} \\ x_2^{(i)} \end{pmatrix}, \\ (a - \lambda_i)x_1^{(i)} + bx_2^{(i)} &= 0, \\ bx_1^{(i)} + (c - \lambda_i)x_2^{(i)} &= 0. \end{aligned} \tag{430}$$

Se puede demostrar que las dos ecuaciones no son independientes porque $\det(M - \lambda I) = 0$.

Entonces usando únicamente la primer ecuación

$$\begin{aligned} x_1^{(i)} &= -\frac{a - \lambda_i}{b} x_2^{(i)}, \quad i = 1, 2 \\ \vec{X}^{(i)} &= x_2^{(i)} \begin{pmatrix} \frac{\lambda_i - a}{b} \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (431)$$

donde $x_2^{(i)}$ se puede determinar exigiendo la normalización de $\vec{X}^{(i)}$ i.e.,

$$\begin{aligned} \vec{X}^{(i)} \cdot \vec{X}^{(i)} &= 1 = x_2^{(i)^2} \left(\left(\frac{\lambda_i - a}{b} \right)^2 + 1 \right) \\ \vec{X}^{(i)} &= \frac{1}{\sqrt{(\lambda_i - a)^2 + b^2}} \begin{pmatrix} \lambda_i - a \\ b \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (432)$$

Consideremos un caso general para entender el problema de autovalores. Una peonza vista desde dos sistemas de referencia. Uno de ellos se llama ejes principales y están en la dirección de los autovectores.

Ilustracion – Pag. 92

La peonza se describe por una superficie definida por el polinomio

$$p = ax^2 + by^2 + 2cxy + dz^2 + 2ezx + 2fzy, \quad (433)$$

y escrito en forma matricial tenemos:

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a & c & e \\ c & b & f \\ e & f & d \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \\ &= \vec{X}^T M_p \vec{X}. \end{aligned} \quad (434)$$

Si pasamos a ejes principales mediante una rotación de los ejes de \vec{x} a \vec{x}' ,

$$\vec{X}' = U\vec{X} \quad (435)$$

podemos rotar la matriz M_p a la forma diagonal

$$\begin{aligned} p &= \vec{X}' U^T M_p U \vec{X}' \\ &= \vec{X}'^T M_{p,D} \vec{X}' \\ &= \begin{pmatrix} x' & y' & z' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & & \\ & B & \\ & & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} \\ &= Ax'^2 + By'^2 + Cz'^2 \end{aligned} \quad (436)$$

El problema de autovalores se plantea de la forma siguiente:

$$\begin{aligned} M_p \vec{X}' &= \lambda \vec{X}' \\ (M_p - \lambda I) \vec{X}' &= 0 \end{aligned} \quad (437)$$

$$\det(M_p - \lambda I) = 0 \quad \vec{X}' \neq \vec{0}.$$

como la matriz es 3×3 el determinante produce un polinomio de grado 3 y por tanto tiene

3 raíces $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, las cuales satisfacen la ecuación:

$$(a - \lambda) [(b - \lambda)(d - \lambda) - f^2] - c[c(d - \lambda) - fe] + e[cf - e(b - \lambda)] = 0 \quad (438)$$

Encontradas las raíces, tomamos una de ellas λ_i y regresamos al problema de autoval-

ores para este λ_i en particular donde obtenemos dos ??? lineales independientes. La tercer

ecuación sería combinación lineal de las otras dos debido a que $\det(M - \lambda I) = 0$.

Entonces:

$$(a - \lambda_i)x'_i + cy'_i + ez'_i = 0 \quad (439)$$

$$cx'_i + (b - \lambda_i)y'_i + fz'_i = 0 \quad (440)$$

Resolvemos x'_i, y'_i en función de z'_i de tal forma que el vector (x'_i, y'_i, z'_i) se normaliza a 1 i.e.

$$x'^2_i + y'^2_i + z'^2_i = 1. \quad (441)$$

El sistema de ecuaciones se puede resolver mediante el procedimiento $(-c)(439) + (a - \lambda_i)(440)$ y $(-f)(439) + (b - \lambda_i)(440)$, obteniendose

$$\begin{aligned} y'_i &= \frac{ce - (a - \lambda_i)f}{-c^2 + (b - \lambda_i)(a - \lambda_i)} z'_i \\ x'_i &= \frac{f^2 - (d - \lambda_i)(b - \lambda_i)}{-fc + (b - \lambda_i)e} z'_i. \end{aligned} \quad (442)$$

otra forma es hacer $z'_i = 1$ y ??? el vector de la forma

$$\vec{x}'_i = v_i \begin{pmatrix} \frac{f^2 - (d - \lambda_i)(b - \lambda_i)}{-fc + (b - \lambda_i)e} \\ \frac{ce - (a - \lambda_i)f}{-c^2 + (b - \lambda_i)(a - \lambda_i)} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (443)$$

Para resolver el problema en dos dimensiones, sería considerar una transformación ó rotación unitaria 2×2 la cual se expresa en forma de *senos* y *cosenos* de la forma:

$$U = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (444)$$

considerando el problema de autovalores dado por la matriz

$$M_p = \begin{bmatrix} a & c \\ c & b \end{bmatrix} \quad (445)$$

simétrica la cual tiene autovalores reales. Entonces el polinomio característico está dado por

$$(a - \lambda_i)(b - \lambda_i) - c^2 = 0, \quad (446)$$

y el ángulo de rotación se determina de:

$$UM_pU^T = \begin{bmatrix} c_\theta & s_\theta \\ -s_\theta & c_\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & c \\ c & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_\theta & -s_\theta \\ s_\theta & c_\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (447)$$

igualando la entrada $_{12}$ de las matrices obtenemos

$$(-a + b)s_\theta c_\theta + (c_\theta^2 - s_\theta^2)c = 0, \quad i.e. \quad (448)$$

$$\boxed{\tan 2\theta = \frac{2c}{a-b}}$$

consideremos un conjunto de autofunciones degeneradas del Hamiltoniano H_0 con energía $E_n^{(0)}$,

$$H_0\phi_{n\alpha} = E_n^{(0)}\phi_{n\alpha} \quad (449)$$

con

$$\phi_{n\alpha} = \{\phi_{n1}, \dots, \phi_{nf}\} \quad (450)$$

donde f es el grado de degeneración.

El formalismo de teoría de perturbaciones ya desarrollado no se puede aplicar porque tendríamos $E_n^{(0)}_{\alpha_i} - E_n^{(0)}_{\alpha_j} = 0$ y vimos que la corrección a primer orden de la función de onda no estaría bien definida. Introduzcamos una perturbación H_p y planteemos el nuevo problema de autovalores, el cual no tiene solución exacta,

$$H\psi_n = (H_0 + H_p)\psi_n = E_n\psi_n. \quad (451)$$

El conjunto de funciones degeneradas forman una base de un espacio vectorial, por tanto, podemos expandir la función ψ_n como la combinación lineal

$$\psi_n = \sum_{\alpha=1}^f a_{\alpha} \phi_{n\alpha}. \quad (452)$$

Para simplificar suponemos que estas autofunciones están normalizadas,

$$\langle \phi_{n\alpha} | \phi_{n\beta} \rangle = \delta_{\alpha,\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, f. \quad (453)$$

y las funciones ψ_n satisfacen:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_n \rangle &= \sum_{\alpha=1}^f \sum_{\beta=1}^f a_{\alpha}^* a_{\beta} \langle \phi_{n\alpha} | \phi_{n\beta} \rangle \\ &= \sum_{\alpha=1}^f |a_{\alpha}|^2 \\ &= 1. \end{aligned} \quad (454)$$

Propongamos la energía total como

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \quad (455)$$

y reemplazando E_n y ψ_n en el problema de autovalores, tenemos

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^f a_{\alpha} (E_n^{(0)} + H_p) \phi_{n\alpha} &= \sum_{\alpha} a_{\alpha} (E_n^{(0)} + E_n^{(1)}) \phi_{n\alpha}; \\ \sum_{\alpha=1}^f (H_p - E_n^{(1)}) a_{\alpha} \phi_{n\alpha} &= 0. \end{aligned} \quad (456)$$

Multiplicando por el *bra* $\langle \phi_{n\beta} |$ en la ecuación anterior, obtenemos

$$\sum_{\alpha=1}^f (\langle \phi_{n\beta} | H_p | \phi_{n\alpha} \rangle - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta}) a_{\alpha} = 0. \quad (457)$$

Entonces para tener soluciones no-nulas, es decir, $a_{\alpha} \neq 0$ se debe cumplir la condición

$$\det(H_p - I E_n^{(1)}) = 0 \quad (458)$$

la cual determina los autovalores $E_n^{(1)}$. Definiendo los elementos de matriz del Hamiltoniano

$$\langle \phi_{n\alpha} | H_p | \phi_{n\beta} \rangle = H_{p\alpha\beta} \quad (459)$$

la ecuación de autovectores se puede plantear en forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} H_{p11} - E_n^{(1)} & H_{p12} & \cdot & \cdot & \cdot & H_{p1f} \\ H_{p21} & H_{p22} - E_n^{(1)} & \cdot & \cdot & \cdot & H_{p2f} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{pf1} & H_{pf2} & \cdot & \cdot & \cdot & H_{pff} - E_n^{(1)} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_f \end{pmatrix} = 0. \quad (460)$$

Lo primero que tenemos que resolver es el polinomio característico de grado f . En general este se puede escribir en la forma

$$b_f(H_{p\alpha\beta})(E_n^{(1)})^f + \dots + b_1(H_{p\alpha\beta})E_n^{(1)} + b_0(H_{p\alpha\beta}) = 0 \quad (461)$$

el cual tiene f -raíces, $E_n^{(1)}_{\alpha}$. Para cada raíz en particular $E_n^{(1)}_i$, se escribe un conjunto de ecuaciones $f - 1$ independientes y resolvemos para $a_1^{(i)}, a_2^{(i)}, \dots, a_{f-1}^{(i)}$ en función de $a_f^{(i)}$ la cual se determina usando la condición de normalización,

$$\left| a_1^{(i)} \right|^2 + \dots + \left| a_f^{(i)} \right|^2 = 1. \quad (462)$$

El conjunto de ecuaciones a resolver para determinar $a_1^{(i)}, \dots, a_{f-1}^{(i)}$ son:

$$\begin{bmatrix} H_{p_{11}-E_n^1} & h_{p_{12}} \\ & \\ & \\ & \\ & \\ & \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_f \end{pmatrix} = 0 \quad (463)$$

$$f-1 \left\{ \begin{array}{l} (H_{p_{11}} - E_n^{(1)})a_1^{(i)} + H_{p_{12}}a_2^{(i)} + \dots + H_{p_{1f}}a_f^{(i)} = 0 \\ (H_{p_{11}} - E_n^{(1)})a_1^{(i)} + H_{p_{12}}a_2^{(i)} + \dots + H_{p_{1f}}a_f^{(i)} = 0 \\ (H_{p_{11}} - E_n^{(1)})a_1^{(i)} + H_{p_{12}}a_2^{(i)} + \dots + H_{p_{1f}}a_f^{(i)} = 0 \\ (H_{p_{11}} - E_n^{(1)})a_1^{(i)} + H_{p_{12}}a_2^{(i)} + \dots + H_{p_{1f}}a_f^{(i)} = 0 \\ H_{p_{f-1,1}}a_1^{(i)} + H_{p_{f-1,2}}a_2^{(i)} + \dots + (H_{p_{f-1,f}})a_f^{(i)} = 0 \end{array} \right. \quad (464)$$

donde la ecuación

$$H_{p_{f,1}}a_1^{(i)} + \dots + (H_{p_{ff}} - E_n^{(1)})a_f^{(i)} = 0 \quad (465)$$

no se considera porque es combinación lineal de las anteriores por la condición $\det(H - E_n^{(1)}I) = 0$.

18 Efecto Stark

Consideremos el átomo de Hidrógeno para $n = 2$ el cual es degenerado para $l = 0, 1$ porque $l \leq n - 1$. Por tanto, tenemos valores de $m = 0; +1, 0, -1$, es decir, cuatro funciones

degeneradas $\psi_{200}(\vec{r})$, $\psi_{211}(\vec{r})$, $\psi_{210}(\vec{r})$ y $\psi_{21-1}(\vec{r})$. Usaremos la notación de Dirac

$$|nlm\rangle \longrightarrow \{|200\rangle, |211\rangle, |210\rangle, |21-1\rangle\} \quad (466)$$

La energía para el átomo de Hidrógeno con $n = 2$ es:

$$E_{n=2}^{(0)} = -\frac{me^4}{4 \cdot 2\hbar^2} = -\frac{13.6}{4}eV \quad (467)$$

Supongamos que introducimos un campo eléctrico externo constante el cuál al interactuar con la nube electrónica induce una interacción efectiva tipo dipolo. Entonces

$$\begin{aligned} H_p &= -\vec{\alpha} \cdot \vec{E} \\ &= -(e\vec{r}) \cdot \vec{E} \\ &= -e z E \end{aligned} \quad (468)$$

donde $\vec{\alpha}$ se refiere al momento dipolar eléctrico. Asumimos que el campo eléctrico está en la dirección z . Como el átomo de Hidrógeno tiene simetría rotacional, podemos orientar los ejes coordenados arbitrariamente. En este caso, se considera el eje z en la dirección del campo \vec{E} . Al introducir el campo externo $\vec{E} = E\hat{R}$ se rompe dicha simetría y sólo hay simetría bajo rotaciones en dirección z , i.e. se debe romper la degeneración del átomo de Hidrógeno. Tenemos que el momento angular conmuta con H_0 por ser el potencial Coulombiano de la forma $\frac{1}{r}$ y por tanto no depende de ángulos, es decir,

$$[H_0, L_i] = 0 \quad [H_0, L^2] = 0. \quad (469)$$

Al introducir el campo eléctrico, la única componente que conmuta con el nuevo Hamiltoniano es $[H, L_z] = 0$, y las únicas autofunciones degeneradas son aquellas que se conectan

mediante el operador \hat{L}_z . Para hacer las correcciones a la energía del átomo de Hidrógeno debemos calcular los elementos de matriz de H_p :

$$\langle 2lm | H_p | 2l'm' \rangle \quad (470)$$

y para ello necesitamos las funciones de onda del átomo de Hidrógeno.

$$|nlm\rangle = \psi_{nlm}(r\theta\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta\varphi) \quad (471)$$

donde

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) &= C_{nl} r^l e^{-\frac{r}{a_0}} Q_{n-l-1}^{2l+1}(r), \\ Q_k^{2l+1}(r) &= e^r r^{-(2l+1)} \frac{d^k}{dr^k} (e^{-r} r^{k+2l+1}) \\ C_{nl} &= \frac{2}{n^2} \left(\frac{\frac{Z^3}{a_0^2}}{(n-l-1)!(n+l)!} \right)^{\frac{1}{2}} \\ Y_{lm}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} (-1)^m P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \\ E_n &= -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \\ a_0 &= \frac{\hbar^2}{me^2} \end{aligned} \quad (472)$$

Entonces

$$\begin{aligned} \langle 2l'm' | H_p | 2lm \rangle &= -eE \langle 2l'm' | z | 2lm \rangle \\ &= -eE \langle 2l'm' | r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\theta\varphi) | 2lm \rangle \end{aligned} \quad (473)$$

donde se utilizó $z = r \cos \theta = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}$.

Para que el elemento de matriz sea diferente de cero se requiere

$$\begin{aligned} l' &= l + 1, \quad l = l' + 1 \\ m' &= m \end{aligned} \quad (474)$$

Por tanto

$$\langle 2l+1m | H_p | 2lm \rangle \neq 0 \quad (475)$$

Los únicos elementos de matriz que cumplen con esta condición son:

$$\langle 200 | H_p | 210 \rangle, \quad \langle 210 | H_p | 200 \rangle \quad (476)$$

Los demás son cero. Como H_p es real, entonces

$$\begin{aligned} \langle 200 | H_p | 210 \rangle &= \langle 210 | H_p | 200 \rangle \\ &= \int_0^\infty R_{20}^*(r) R_{21}(r) r^3 dr \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int Y_{00}^*(\Omega) Y_{10}(\Omega) d\Omega \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{3}{4\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \cos^2 \theta d(\cos \theta) d\varphi - 3\sqrt{3} \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right) \\ &= -3a_0 \end{aligned} \quad (477)$$

donde las funciones de onda radiales son:

$$\begin{aligned} R_{20}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}, \\ R_{21}(r) &= \frac{1}{\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{2a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}. \end{aligned} \quad (478)$$

Entonces en la base mencionada la matriz Hamiltoniana queda en la forma:

$$H_p = -3a_0 eE \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (479)$$

La perturbación no afecta los estados $\{|211\rangle, |21-1\rangle\}$. Si reescribimos la matriz en los estados perturbados $\{|200\rangle, |210\rangle\}$ entonces

$$\tilde{H}_p = -3a_0 eE \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = b \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (480)$$

y la perturbación, la cual es invariante bajo rotación en dirección z , solo mezcla estados con $m = 0$. Por tanto, el polinomio característico se reduce a la forma:

$$\det(\tilde{H}_p - E_n^{(1)}) = \begin{vmatrix} -E_n^{(1)} & b \\ b & -E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (481)$$

donde las autofunciones son

$$(E_n^{(1)})^2 = b^2 = 0, \quad E_n^{(1)} = \pm b = \mp 3a_0 eE. \quad (482)$$

Para hallar los autovectores, tenemos para el autovalor $E_n^{(1)} = +b$, la ecuación que relaciona las coordenadas x_1 y x_2 :

$$-bx_1 + bx_2 = 0 \quad i.e. \quad x_1 = x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (483)$$

Resumiendo, hay dos vectores que siguen degenerados porque el campo eléctrico en dirección z no los mezcla:

$$|211\rangle, |21-1\rangle \quad E_{211}^{(0)} = E_{21-1}^{(0)}, \quad (484)$$

y otros dos autoestados de H_0 original se mezclan rompiendo la degeneración y las nuevas autofunciones son combinación lineal de estos:

$$|200\rangle, |210\rangle \longrightarrow \frac{|200\rangle + |210\rangle}{\sqrt{2}}, \quad \frac{|200\rangle - |210\rangle}{\sqrt{2}} \quad (485)$$

con energías: $E_{211}^{(0)} - 3a_0 eE$, $E_{211}^{(0)} + 3a_0 eE$. Gráficamente se puede representar en la forma:

19 Interacción \vec{L} , \vec{S} con \vec{B}

Cuando estudiemos la ecuación de Diraca en el límite no-relativista se obtuvo la ecuación de Schrödinger-Pauli para un electrón con espín, y se escribe en la forma de una matriz 2×2 usando las matrices de Pauli:

$$H_0 = \frac{\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)}{2m} + V_0(r) \quad (486)$$

donde \vec{A} es el potencial vectorial y $-e$ es la carga del electrón. Usando la identidad

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (487)$$

el Hamiltoniano se escribe en la forma

$$H_0 = \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} + i \left[\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \times \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right] \cdot \vec{\sigma} + V_0(r). \quad (488)$$

Calculando el operador $(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2$ el cual actúa sobre una función de onda

$$\begin{aligned} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2() &\approx \vec{p}^2() - \frac{e}{c} \vec{p} \cdot (\vec{A}()) - \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{p}() \\ &\approx p^2() - \frac{2e}{c} \vec{A} \cdot \vec{p}() \end{aligned} \quad (489)$$

donde se usó el gauge de Coulomb i.e. $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ y se desprecia términos de orden \vec{A}^2 .

Suponiendo un campo magnético constante, el potencial vectorial magnético se escribe

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \quad (490)$$

y reemplazando, tenemos el acople de campo magnético con el momento angular donde de la partícula

$$\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2() \approx p^2() - \frac{e}{c} \vec{B} \cdot \vec{L}() \quad (491)$$

Para el otro operador de H tenemos:

$$\begin{aligned}
 i(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})_i(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})_j\sigma_k\epsilon_{ijk}\psi &= i\sigma_k\epsilon_{ijk}\left(-\frac{e}{c}\right)(A_ip_j\psi + p_i(A_j\psi)) \\
 &= i\sigma_k\epsilon_{ijk}\left(-\frac{e}{c}\right)\{A_ip_j + (p_iA_j)\psi + A_j(p_i\psi)\} \\
 &= -i\frac{e}{c}\epsilon_{ijk}\sigma_k(p_iA_j)\psi; \quad \text{dado que } (A_ip_j + A_jp_i)\epsilon_{ijk} = 0 \\
 &= i\frac{e}{c}(\vec{p} \times \vec{A}) \cdot \vec{\sigma}\psi \\
 &= -\frac{\hbar e}{c}\vec{B} \cdot \vec{\sigma}\psi \\
 &= -\frac{2e}{c}\vec{B} \cdot \vec{S}\psi \text{ donde } \vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}.
 \end{aligned} \tag{492}$$

Por tanto:

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{|e|\hbar}{2mc}(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} + V_0(r) \\
 &= H_0 + H_p
 \end{aligned} \tag{493}$$

Definiendo el momento dipolar magnético angular y de espín

$$\vec{\mu}_L = -\frac{|e|\hbar}{2mc}\vec{L} \quad , \quad \vec{\mu}_s = -\frac{|e|\hbar}{2mc}(2\vec{S}) \tag{494}$$

entonces

$$H_p = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} - \vec{\mu}_L \cdot \vec{B} = \mu_B(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} \tag{495}$$

donde $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ conocido como *magnetn de Bohr*. El factor 2 en el acople con el espín se conoce como factor de *Land*.

Para el otro operador de H_0 , tenemos

Por tanto:

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{|e|\hbar}{2mc}(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} + V_o(r) \\ &= H_0 + H_p \end{aligned} \quad (497)$$

Definiendo el momento dipolar magnético y el momento dipolar de espín como:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{|e|\hbar}{2mc}\vec{L} \quad , \quad \vec{\mu}_s = -\frac{|e|\hbar}{mc}\vec{S} \quad (498)$$

donde es conveniente definir el magnetón de *Bohr* μ_B el cual da el orden de magnitud de la interacción a nivel atómico $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$.

Por tanto, el Hamiltoniano de interacción se escribe

$$\begin{aligned} H &= -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} - \vec{\mu}_L \cdot \vec{B}, \\ &= \mu_B(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} \end{aligned} \quad (499)$$

donde el factor 2 se conoce como factor de *Land* $g_s = 2$.

20 Estructura Fina del Átomo de Hidrógeno

El átomo de Hidrógeno con potencial de Coulomb tiene solución exacta. Sin embargo, esta solución no considera el espín del electrón y debido a los movimientos relativos entre el electrón y el núcleo se inducen campos magnéticos débiles los cuales producen interacciones de la forma $\vec{S} \cdot \vec{B}$ desdoblado el nivel de energía dependiendo a la componente de espín del electrón. También se podrían considerar correcciones débiles, perturbaciones proporcionales a p^4 las cuales corresponden a correcciones no relativistas. Estos dos efectos se conocen como la corrección de estructura fina, la cual hereda el nombre de la constante que lleva este nombre, del orden de $\alpha \approx e^2$.

Existen otros efectos que se han estudiado en astrofísica como la interacción $\vec{S}_n \cdot \vec{S}_e$ del espín del nucleón con el espín del electrón ó equivalentemente dipolo-dipolo. Dicho efecto se conoce como estructura hiperfina y se ha podido medir en radiación de átomos de Hidrógeno en las nebulosas por el efecto de los choques entre átomos que rotan los espines.

Otro efecto del mismo orden que genera una perturbación y produce correcciones o desdoblamiento a los niveles de energía del átomo de Hidrógeno es el efecto *Lamb*, el cual se produce por fluctuaciones del vacío y se puede interpretar como una fluctuación del potencial escalar.

21 Espín-Órbita

El movimiento relativo del protón alrededor del electrón inducen un campo magnético de la forma

$$\vec{B} = -\frac{\vec{p} \times \vec{E}}{mc} \quad (500)$$

donde m es la masa del electrón y \vec{E} es el campo electrostático,

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \frac{1}{mc} \frac{e\hat{r}}{r^2} \times \vec{p} \\ &= \frac{e}{mc} \frac{1}{r^3} \vec{L} \end{aligned} \quad (501)$$

Dicho campo magnético interactúa con el espín del electrón induciendo una interacción de la forma

$$\begin{aligned} H_{SO} &= -2\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} \\ &= \frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B} \end{aligned} \quad (502)$$

donde el subíndice SO significa interacción espín-órbita. Dicha interacción se puede inferir de la ecuación de Dirac y ésta predice el mismo Hamiltoniano con un factor adicional $\frac{1}{2}$:

$$H_{SO} = \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}. \quad (503)$$

Calculemos las correcciones a los niveles de energía del átomo de Hidrógeno debida a la corrección no-relativista espín-órbita. El estado del electrón se describe por la función de onda del átomo de Hidrógeno, la parte orbital, y la función de onda del espín. Es decir, se presenta una adición del momento angular entre \vec{L} y \vec{S} donde la función de onda total del electrón se escribe como un producto directo:

$$|nlm\rangle \otimes |sm_s\rangle = |lsm_l m_s\rangle \longrightarrow |mlm_s\rangle \quad (504)$$

donde omitimos el número cuántico principal para simplificar la notación y $|mlm_s\rangle$ es autofunción de los operadores

$$\{L^2, S^2, L_z, S_z\} \quad (505)$$

la cual llamaremos la base antigua. Al realizar la adición de momento angular definimos el momento angular total como

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (506)$$

Entonces ahora definimos el conjunto de operadores que conmuta entre sí los siguientes operadores

$$\{J^2, J_z, L^2, S^2\} \quad (507)$$

donde las nuevas autofunciones serían

$$|lsjm_j\rangle \longrightarrow |jm_j\rangle, \quad (508)$$

a estas autofunciones las llamaremos la base nueva.

Para determinar la corrección a la energía al átomo de Hidrógeno debido al efecto no-relativista espín-órbita $\vec{L} \cdot \vec{S}$, usamos la identidad:

$$\begin{aligned} J^2 &= L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}, \\ \vec{L} \cdot \vec{S} &= \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \end{aligned} \quad (509)$$

Por tanto, el Hamiltoniano lo podemos expresar en la forma:

$$H_{SO} = \frac{e^2}{4m^2c^2} \frac{1}{r^3} (J^2 - L^2 - S^2) \quad (510)$$

La corrección a primer orden es el valor esperado de H_{SO} .

el cual en la nueva base $|lsjm\rangle$ es trivial porque ésta es autofunción de J^2 , L^2 , S^2 . Recordando de adición de momento angular, el momento angular toma dos valores

$$j = l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \quad (511)$$

donde la autofunción está dada por:

$$\left| nl \frac{1}{2} jm_j \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}} Y_l^{m_j - \frac{1}{2}} \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}} Y_l^{m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (512)$$

El índice superior corresponde a $j = l + \frac{1}{2}$ y el índice inferior a $j = l - \frac{1}{2}$. Por tanto, la corrección a la energía a primer orden es:

$$E_{nSO}^{(1)} = \langle nljm_j | H_{SO} | nljm_j \rangle = \frac{e^2}{4m^2c^2} \hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)) \langle jm_j | jm_j \rangle \langle nl | \frac{1}{r^3} | nl \rangle \quad (513)$$

donde la parte radial se integra como

$$\int R_{nl}^*(r) \frac{1}{r^3} R_{nl}(r) r^2 dr = \frac{2}{n^3 l(l+1)(2l+1) a_0^3} \quad (514)$$

y la expresión final para la corrección es:

$$E_{nSO}^{(1)} = \frac{e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{n^3 l(l+1)(2l+1) a_0^3} \quad (515)$$

donde a_0 se conoce como radio de *Bohr*, el cual se define como

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} = \frac{\hbar}{m c \alpha} \quad (516)$$

y α la constante de estructura fina la definimos como

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}. \quad (517)$$

La energía de átomo de Hidrógeno para el n -ésimo nivel de energía está dada por:

$$E_n^{(0)} = -\frac{e^4 m}{2 \hbar^2 n^2} = -\frac{\alpha^2 m c^2}{2 n^2} \approx \mathcal{O}(\alpha^2). \quad (518)$$

Usando las expresiones anteriores, la corrección a la energía se puede expresar como:

$$\begin{aligned} E_{nSO}^{(1)} &= \frac{\alpha^4 m_e c^2}{2 n^3} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} m \\ &\approx \mathcal{O}(|E_n^{(0)}| \alpha^2) \end{aligned} \quad (519)$$

es decir, es una corrección al n -ésimo nivel de la energía del orden de $\alpha^2 \approx 5.32 \times 10^{-5}$.

Para $j = l \pm \frac{1}{2}$ la energía se expresa en la forma

$$\begin{aligned} E_{nSO}^{(1)} &= \frac{\alpha^4 m c^2}{2 m^3} \frac{1}{(l+1)(2l+1)} \quad j = l + \frac{1}{2} \\ E_{nSO}^{(1)} &= -\frac{\alpha^4 m c^2}{2 n^3} \frac{1}{l(2l+1)} \quad j = l - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (520)$$

Para el estado base del átomo de Hidrógeno $n = 1$ y $l = 0$. Solo existe corrección para

$j = \frac{1}{2}$ y el nivel de energía se hace menos negativo en un factor de $1 + 5 \times 10^{-5}$.

22 Corrección Relativista

Si definimos la energía cinética del electrón y usamos el límite no-relativista,

$$\begin{aligned}
 E_{cin} &= E_{rel} - mc^2 \\
 &= \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \\
 &\approx \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}.
 \end{aligned} \tag{521}$$

El factor proporcional a p^4 es una perturbación y puede producir a los niveles de energía del átomo de Hidrógeno, i.e.,

$$H_p = -\frac{p^4}{8m^3 c^2}. \tag{522}$$

Como este Hamiltoniano no depende del espín, se puede usar la base vieja para calcular el valor esperado de la perturbación

$$\begin{aligned}
 E_{nR}^{(1)} &= \langle nlm | H_p | nlm \rangle \\
 &= -\frac{1}{8m^3 c^2} \int R_{nl}(r) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \right)^4 R_{nl}(r) r^2 dr \int |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega
 \end{aligned} \tag{523}$$

Integrando por aportes dos veces, la parte radial se puede expresar

$$\hbar^4 \int_0^\infty \left| \frac{\partial^2}{\partial r^2} R_{nl} \right| r^2 dr = \frac{m^4 e^8}{\hbar^4 n^4} \left(\frac{8n}{2l+1} - 3 \right) \tag{524}$$

y usando la definición de α y $E_n^{(0)}$ entonces la contribución no-relativista p^4 se escribe en la forma:

$$E_n^{(1)} = -\frac{\alpha^2 |E_n^0|}{4n^2} \left(\frac{8n}{2l+1} - 3 \right). \tag{525}$$

Podemos observar que las dos correcciones son del mismo orden, $E_{nSO}^{(1)} \approx E_{nNR}^{(1)}$.

Definimos la corrección a la energía al átomo de Hidrógeno de estructura finita a la corrección debida a estos dos efectos: Espín-Órbita y corrección no-relativista de la energía

cinética. Al sumarlos, obtenemos

$$\begin{aligned}
 E_{nFS}^{(1)} &= E_{nSO}^{(1)} + E_{nR}^{(1)} \\
 &= \frac{\alpha^4 mc^2}{2n^3} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} - \left(\frac{2}{2l+1} - \frac{3}{4n} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{526}$$

Si en la expresión anterior calculamos para los dos casos $j = l \pm \frac{1}{2}$ o equivalentemente

$l = j \mp \frac{1}{2}$ y reemplazamos en la expresión anterior, obtenemos

$$\begin{aligned}
 E_{nFS}^{(1)} &= \frac{\alpha^4 mc^2}{8n^4} \left(3 - \frac{4n}{j + \frac{1}{2}} \right) \\
 &= \frac{\alpha^2 E_n^{(0)}}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right)
 \end{aligned} \tag{527}$$

observamos que la corrección de estructura fina es independiente del número cuántico l ,

solo depende del momento angular total. Por tanto:

$$\begin{aligned}
 E_{njm_j} &= E_n^{(0)} + E_{nFS}^{(1)} \\
 &= E_n^{(0)} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1} - \frac{3}{4n} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{528}$$

donde el factor extra hace que la energía sea más negativa, es decir, baja los niveles de energía del átomo de Hidrógeno. La energía es degenerada para el mismo valor de j , pero dicha degeneración se rompe para diferentes valores del momento angular total. Para igual j igual energía.

23 Efecto Lamb

Si el potencial presenta fluctuación entonces la energía electrostática no será constante y presentará fluctuaciones. Estas situaciones se pueden ver mejor desde la teoría cuántica de campos. Si pensamos un campo continuo como una colección infinita de osciladores

armónicos, entonces un campo eléctrico se podría escribir en la forma

$$\hat{\vec{E}} \approx \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega} \vec{E}(p) [\hat{a}e^{-i(\vec{p}\cdot\vec{r}-\omega t)} + \hat{a}^\dagger e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-\omega t)}], \quad (529)$$

si calculamos el valor esperado en el vacío de campo eléctrico y su desviación respecto a este valor esperado, tenemos

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\vec{E}} | 0 \rangle &= 0 \\ \sigma_E^2 &= \langle 0 | \hat{\vec{E}}^2 | 0 \rangle - (\langle 0 | \hat{\vec{E}} | 0 \rangle)^2 \\ &\approx \langle 0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \\ &\approx \langle 1 | 1 \rangle \neq 0 \end{aligned} \quad (530)$$

Por tanto, el campo eléctrico producido presenta fluctuación, aún en el estado vacío, sin fotones. Estas fluctuaciones son responsables de las fluctuaciones del $V(r)$ porque pueden producir fluctuaciones en la posición del electrón. Correcciones de la teoría cuántica de campos pueden generar correcciones a la masa y carga del electrón produciendo también esta fluctuación \vec{r} . Por tanto

$$\langle V(\vec{r} + \delta\vec{r}) \rangle = V(r) + \langle \delta x_i \partial_{x_i} V(\vec{r}) \rangle + \frac{1}{2} \langle \delta x_i \delta x_j \partial_{x_i} \partial_{x_j} V(\vec{r}) \rangle + \dots \quad (531)$$

Haciendo una aproximación *naive* y suponiendo simetría esférica entonces podemos aproximar:

$$\begin{aligned} \langle \delta x_i \delta x_j \partial_i \partial_j V(r) \rangle &\approx \frac{1}{3} \langle \delta \vec{r}^2 \rangle \nabla^2 V(r), \\ &\approx \frac{1}{3} \lambda_c^2 (4\pi e^2 \delta(r)) \end{aligned} \quad (532)$$

donde $\lambda_c \approx \frac{\hbar}{mc}$ es la longitud de onda de *Compton* del electrón y $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$. Por tanto:

$$\langle V(\vec{r} + \delta\vec{r}) \rangle = V(r) + \frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} 4\pi Z e^2 \delta(r) + \dots \quad (533)$$

la perturbación que se genera debido a la fluctuación se escribe en la forma

$$H_p = \frac{\pi Z \hbar^2 c^2}{2m^2 c^2} \delta(\vec{r}) \quad (534)$$

donde se cambio el factor $\frac{1}{6}$ por $\frac{1}{8}$ que predice un cálculo más detallado. Calculando el valor esperado

$$\begin{aligned} \langle nlm | H_p | nlm \rangle &= \frac{\pi Z \hbar^2 c^2}{2m^2 c^2} |\psi_{nl}(0)|^2 \\ &= \frac{\pi Z \hbar^2 c^2}{2m^2 c^2} \frac{4}{n^3} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \delta_{l0} \frac{1}{4\pi} \\ &= E_n^{(0)} \left(-\frac{Z^2 \alpha^2}{n} \delta_{l0} \right) \end{aligned} \quad (535)$$

Por tanto, la energía del n -ésimo nivel de energía del átomo de Hidrógeno se puede escribir en la forma

$$E_{nj} = E_n^{(0)} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4n} \left(\frac{4}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{n} \right) - \frac{Z^2 \alpha^2}{n} \delta_{l0} \right] \quad (536)$$

La teoría de Dirac predice una energía para el átomo de Hidrógeno como la suma de los dos primeros términos de E_{nj} , donde se observa que la degeneración es para igual j diferente a lo que predice la teoría de Schrödinger. Los estados $2s$, $2p$ son degenerados sin embargo, las correcciones de estructura fina rompen esta degeneración y se crea un corrimiento a la energía

$$E_{2p_{3/2}} - E_{2s_{1/2}, 2p_{1/2}} = \hbar \nu \quad \nu \approx 10.950 MHz, \quad (537)$$

donde se usa la notación E_{nlj} . En 1937 W.V. Houston y 1938 R.C. Willians observaron experimentalmente que los niveles de energía $2s_{1/2}$ y $2p_{1/2}$ no eran degenerados. En 1947 W.E. Lamb y R.C. Retherford pudieron medir con precisión esta diferencia, estimulando la transición dipolar eléctrica entre los estados $2s_{1/2}$ y $2p_{1/2}$ usando microondas.

$$E_n^{(0)} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \quad E_3^{(0)} - E_2^{(0)} = 1.88 \text{ eV} \quad (538)$$

Los valores de la corrección de estructura fina para los niveles de energía $n = 2, 3$ y diferente $j = 1/2, 3/2, 5/2$ son:

$$\begin{aligned}
 E_{n=2FS}^{(1)} &= -5.66 \times 10^{-5} \text{ eV} \quad j = 1/2 \quad E_{n=3FS}^{(1)} = -2.01 \times 10^{-5} \text{ eV}, \\
 &= -1.13 \times 10^{-5} \text{ eV} \quad j = 3/2 \quad E_{n=3FS}^{(1)} = -0.67 \times 10^{-5} \text{ eV}, \\
 &= -1.13 \times 10^{-5} \text{ eV} \quad j = 5/2 \quad E_{n=3FS}^{(1)} = -0.22 \times 10^{-5} \text{ eV}.
 \end{aligned} \tag{539}$$

Transiciones de energía de $E_{n=3}$ a $E_{n=2}$ para diferentes valores de j son:

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{j1/2 \rightarrow 3/2} &= 8.8 \times 10^{-6} \text{ eV} \quad \Delta E_{j1/2 \rightarrow 1/2} = 36.5 \times 10^{-6} \text{ eV} \\
 \Delta E_{j3/2 \rightarrow 3/2} &= 4.6 \times 10^{-6} \text{ eV} \quad \Delta E_{j3/2 \rightarrow 1/2} = 49.9 \times 10^{-6} \text{ eV} \\
 \Delta E_{j5/2 \rightarrow 3/2} &= 9.1 \times 10^{-6} \text{ eV} \quad \Delta E_{j5/2 \rightarrow 1/2} = 54.4 \times 10^{-6} \text{ eV}
 \end{aligned} \tag{540}$$

es decir, decae del nivel $n = 3$ al nivel $n = 2$ donde en la primera fila consideramos todos los valores posibles de $j = 1/2, 3/2, 5/2$ decayendo al nivel $j = 3/2$. En la segunda fila los niveles $j = 1/2, 3/2, 5/2$ del estado $n = 3$ decayendo a $j = 1/2$ del nivel $n = 2$.

Imagen Pagina 115

La teoría de Dirac predice para la energía cuántica relativista del átomo de Hidrógeno la expresión

$$E_{nj} = \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{n - (j+1/2) + \sqrt{(j+1/2)^2 - \alpha^2}} \right)^2}} - 1 \right] mc^2 \tag{541}$$

y considerando el límite de α muy pequeño se obtiene

$$\approx -\frac{mc^2\alpha^2}{2n^2} + \frac{mc^2\alpha^4}{2n^4} \left(-\frac{n}{j+1/2} + \frac{3}{4} \right) \tag{542}$$

la cual coincide con la estructura fina calculada con teoría de perturbaciones

24 Estructura Hiper del Átomo de Hidrógeno

Las nubes galácticas de Hidrógeno producen una línea de longitud de onda de 21 *cm* y frecuencia de 1.490 *Mhz*. El protón del núcleo y el electrón son partículas de espín 1/2 y entre ellas forman un sistema de espín total 0 y 1, es decir, un estado singlete y un triplete. Los choques entre átomos pueden producir giros de estos espines y generan transiciones del estado triplete al singlete produciendo los fotones con energía 5.9×10^{-6} eV, los cuales han sido detectados en la tierra.

Imagen Lateral – Pagina 116

La línea 21 *cm* del átomo de Hidrógeno fue observada por primera vez por H. Ewen y E.M. Purcell en 1951. La predicción fue hecha por H. C. van de Hulst en 1944.

El momento magnético del espín del protón $\vec{\mu}_p$ genera un campo magnético el cual interactúa con el espín del electrón de la forma

$$\begin{aligned}
 H_p &= -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B}_p \\
 &= -\mu_e \cdot \nabla \times \vec{A}_p \\
 &= -\vec{\mu}_e \cdot \nabla \times \left(\nabla \times \frac{\vec{\mu}_p}{r} \right)
 \end{aligned} \tag{543}$$

donde los momentos dipolares magnéticos para el protón y el electrón son:

$$\begin{aligned}
 \vec{\mu}_p &= \frac{e}{Mc} g_p \vec{S}_p = \frac{\hbar e}{2Mc} g_p \vec{\sigma}_p \equiv \mu_p \vec{\sigma}_p \\
 \vec{\mu}_e &= \frac{e}{mc} g_e \vec{S}_e = \frac{\hbar e}{2mc} g_e \vec{\sigma}_e \equiv \mu_e \vec{\sigma}_e
 \end{aligned} \tag{544}$$

donde definimos los *magnetones* de Bohr:

$$\mu_p = \frac{\hbar e}{2Mc} g_p \quad \mu_e = \frac{\hbar e}{2mc} g_e \tag{545}$$

donde los factores de *Land* del protón y electrón son:

$$g_p = 2 \times 2.7828 \quad g_e = 2. \quad (546)$$

Si consideramos el electrón como partícula puntual, su factor giro magnético se obtiene de la ecuación de Dirac en el límite no relativista. Pero para el protón no se puede considerar como partícula fundamental. Esta constituido de dos quarks *up* y un quark *down*, además de un mar cuántico de gluones y quarks.

Usando identidades vectoriales, el Hamiltoniano se escribe en la forma:

$$\begin{aligned} H_p &= -\mu_e \mu_p \vec{\sigma}_e \cdot \nabla \times \left(\nabla \times \left(\frac{\vec{\sigma}_p}{r} \right) \right) \\ &= -\mu_e \mu_p \vec{\sigma}_e \cdot \left[\nabla \left(\vec{\sigma}_p \cdot \nabla \left(\frac{1}{r} \right) \right) - \vec{\sigma}_p \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) \right] \\ &= -\mu_e \mu_p \left[\sigma_e^i \sigma_p^j \partial_i \partial_j \left(\frac{1}{r} \right) - \vec{\sigma}_e \cdot \vec{\sigma}_p \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) \right] \end{aligned} \quad (547)$$

usando la aproximación $\partial_i \partial_j \approx \frac{1}{3} \delta_{ij} \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right)$, entonces

$$H_p = -\frac{8\pi}{3} \mu_e \mu_p \vec{\sigma}_e \cdot \vec{\sigma}_p \delta(\vec{r}). \quad (548)$$

Para el sistema $p - e$ en el átomo de Hidrógeno, el espín total es

$$\vec{S} = \vec{S}_e + \vec{S}_p \quad \text{con} \quad S = 0, 1. \quad (549)$$

Para el estado $S = 1$, tenemos un triplete $|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle$ y para el estado $S = 0$, el estado es $|00\rangle$. Dichos estados se pueden escribir en la base antigua i.e. $|m_z e, m_z p\rangle$

$$\left\{ \frac{1}{2} \left(\left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right) \right\}; \quad \left\{ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle, \frac{1}{2} \left(\left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right), \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle \right\} \quad (550)$$

$$\begin{aligned}
S^2 &= S_e^2 + S_p^2 + 2S_e S_p, \\
&= \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{1}{2} \vec{\sigma}_e \cdot \vec{\sigma}_p \right) \hbar^2, \\
&= \hbar^2 S(S+1)
\end{aligned} \tag{551}$$

despejamos $\vec{\sigma}_e \cdot \vec{\sigma}_p$ y reemplazamos en H_p :

$$H_p = -\frac{8\pi}{3} \mu_e \mu_p (2S(S+1) - 3) \delta(\vec{r}). \tag{552}$$

la corrección a primer orden es:

$$\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \langle nlm | H_p | nlm \rangle \\
&= -\frac{8\pi}{3} \mu_e \mu_p (2(S+1)S - 3) |\psi_{nlm}(0)|^2, \\
&= -\frac{8\pi}{3} \mu_e \mu_p (2S(S+1) - 3) \frac{1}{4\pi} \frac{4}{n^3} \left(\frac{7}{a_0}\right)^3 \delta_{l0}, \\
&= -E_n^{(0)} \frac{4\partial_p}{3n} \alpha^2 \frac{m_e}{M} (2S(S+1) - 3) \delta_{l0}.
\end{aligned} \tag{553}$$

la diferencia de energía entre el estado triplete y singlete es

$$\begin{aligned}
\Delta E_n^{(1)} &= E_n^{(1)(S=1)} - E_n^{(1)(S=0)} \\
&= 5.89 \times 10^{-6} \text{ eV} \\
&= h\nu = \frac{hc}{\lambda}
\end{aligned} \tag{554}$$

obtenemos los valores para la longitud de onda e la frecuencia del fotón en la transición

del estado triplete al estado siguiente:

$$\lambda = 21 \text{ cm} \quad \nu = 1.49 \times 10^9 \text{ Hz} \tag{555}$$

25 Efecto Zeeman

Se debe al descubrimiento del físico Holandés P. Zeeman. Divide una línea espectral en varias debido a la presencia del campo magnético. Este efecto permite medir intensidad de campos magnéticos en el sol, estrellas o plasmas. Tiene aplicaciones en la espectroscopía de la resonancia nuclear magnética, resonancia magnética, efecto *Mssbauer*, etc. El efecto Zeeman anómalo hace referencia cuando el campo que interactúa con el espín del electrón es del orden de los generados atómicamente resumandose con estructura fina, y fue descubierto por el físico irlandés T. Preston. Cuando el campo magnético externo es muy fuerte comparado con el campo interno del átomo el efecto se conoce como *Paschen-Back*. EN este caso la interacción espín orbita $\vec{L} \cdot \vec{S}$ es despreciable. EL efecto Zeeman débil corresponde al caso donde el campo magnético externo es del orden del campo interno y la interacción espín-orbita $\vec{S} \cdot \vec{L}$ es importante.

26 Campo Fuerte Efecto Paschen - Back

El campo magnético es fuerte y se desprecia la interacción espín-órbita. El átomo de Hidrógeno se describe por el Hamiltoniano ordinario y usamos la función de onda $|nlm_l m_s\rangle$, la cual corresponde a $|nlm_l\rangle \otimes |sm_s\rangle$.

Suponiendo que el campo externo está en dirección z e interactúa con el electrón entonces

$$H_p = \frac{e\hbar B}{2mc}(L_z + 2S_z) \quad (556)$$

con lo cual

$$\langle nlm_l m_s | H_p | nlm_l m_s \rangle = \frac{e\hbar B}{2mc}(m_l + 2m_s). \quad (557)$$

La energía total sería

$$E_{nlm_l m_s} = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} + \mu_B B(m_l + 2m_s). \quad (558)$$

Para el átomo de Hidrógeno la degeneración del nivel de energía E_n esta dada por

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m_l=-l}^l \sum_{m_s=-1/2}^{1/2} 1 = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2. \quad (559)$$

Al aplicar el campo magnético externo se rompe la degeneración y solo los estados con el mismo valor de $m_l + 2m_s$ son degenerados.

26.1 Campo Magnético Débil

En este caso suponemos que $\mu B_{ext} \lesssim F_{FS}^{(1)}$, es decir, es del orden de la corrección de la energía debida a la estructura fina. En este caso supongamos que el Hamiltoniano no perturbado es la suma del átomo de Hidrógeno y la corrección de estructura fina:

$$\mathcal{H}_0 = H_0 + H_{FS} \quad (560)$$

donde la autofunción corresponde a la suma de momento angular y espín, i.e., expresando en la base nueva:

$$|nlsjm_j\rangle. \quad (561)$$

Por tanto, la corrección a la energía es

$$E_z^{(1)} = \langle nlsjm_j | H_p | nlsjm_j \rangle = \frac{e\hbar}{2mc} \langle nlsjm_j | J_z + S_z | nlsjm_j \rangle \quad (562)$$

donde suponemos el campo externo en dirección z i.e. $\vec{B} = B\hat{k}$. Usando el teorema de Wigner-Eckart se calcula el elemento de matriz S_z en la base $\langle nlsjm_j |$.

$$\langle nls \ j m_j | S_Z | nls j m_j \rangle = \frac{\langle nls \ j m_j | \vec{J} \cdot \vec{S} | nls j m_j \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle nls \ j m_j | J_z | nls j m_j \rangle \quad (563)$$

usando la identidad

$$\vec{J} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \quad (564)$$

la corrección a la energía se puede expresar como:

$$\begin{aligned} E_z^{(1)} &= \frac{e\hbar B}{2mc} \left[1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right] m_j \\ &\equiv g_j \mu_B B m_j \end{aligned} \quad (565)$$

donde se define el factor de Landé g_j como

$$\begin{aligned} g_j &= \left[1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right] m_j \\ g_j &= \frac{2l+1}{2l+1}; \quad j = l + 1/2 \\ g_j &= \frac{2l}{2l+1}; \quad j = l - 1/2 \end{aligned} \quad (566)$$

La energía total al introducir el campo externo sería

$$E = E_{nj} (FS) + E_z^{(1)} \quad (567)$$

donde E_{nj} es degenerada para diferentes valores de $m_j = -j, \dots, j$, es decir, $2j + 1$. Para $j = l + 1/2$ la degeneración de E_{nj} es $2l + 2$ y para $j = l - 1/2$ la degeneración de E_{nj} es $2l$. Al aplicar el campo B externo estas degeneraciones se rompen, porque se corrige la energía E_{nj} proporcional a $\mu_B B m_j$.

Para $j = l + 1/2$ la diferencia de energía entre dos estados sucesivos de m_j , $\Delta m_j = 1$, es

$$\Delta E_z^{(1)} = \mu_B B \frac{2l+2}{2l+1} \quad j = l + 1/2 \quad (568)$$

donde tenemos $2l+2$ estados que se van a desdoblar según el valor de $m_j = -(l+1/2), \dots, (l+1/2)$.

Para $j = l - 1/2$ la diferencia de energía entre los estados sucesivos de m_j , $\Delta m_j = 1$, es

$$\Delta E_z^{(1)} = \mu_B B \frac{2l}{2l+1} \quad (569)$$

donde hay $2l$ estados degenerados los cuales se desdoblan según el valor $m_j = -(l - 1/2), \dots, (l - 1/2)$.

Se llama *efecto Zeeman anómalo* porque estas dos diferencias de energía para $j = l + 1/2$ y $j = l - 1/2$ son diferentes

Imagen Inferior – Pagina 122

Imagen Pagina Completa – Pagina 123

$$\Delta E_1 \neq \Delta E_2 \longrightarrow \text{Anmalo} \quad E_z^{(1)} = \mu_B B g_j m_j \quad (570)$$

Imagen Pagina Completa – Pagina 124

27 Efecto de Aharonov-Bohm

Imagen Lateral – Pagina 125

El Hamiltoniano para electrón interactuando con campo magnético:

$$H = \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2}{2m} \quad (571)$$

donde el potencial vectorial para \vec{B} constante se expresa como

$$\begin{aligned}\vec{A} &= \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} \\ \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A}\end{aligned}\tag{572}$$

El campo \vec{B} es invariante bajo la transformación

$$\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} f.\tag{573}$$

Para que la ecuación de Schrödinger sea invariante bajo la transformación de gauge se requiere que el potencial vectorial y la función de onda transformen como:

$$\begin{aligned}\vec{A}' &= \vec{A} + \vec{\nabla} f \\ \psi' &= \psi e^{\frac{ie}{\hbar c}f}\end{aligned}\tag{574}$$

Aharonov – Bohm *PR*115, 485(1959) mostraron que la función de onda del electrón es afectada por el campo magnético sin que el electrón experimente el campo. Consideremos la geometría de la figura superior, donde los electrones siguen el camino 1 y 2 después de salir de la doble rendija y llegan al detector. La probabilidad de llegar al detector es:

$$p = |\psi_1 + \psi_2|^2\tag{575}$$

Fuera del solenoide el campo \vec{B} vale cero, entonces escogamos $\vec{A}' = 0$, por tanto

$$\begin{aligned}0 &= \vec{A} + \vec{\nabla} f, \\ &= \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} + \oint \vec{\nabla} f \cdot d\vec{l}, \\ &= \int (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{S} + \oint \vec{\nabla} f \cdot d\vec{l}, \\ &= \int \vec{B} \cdot \hat{n} dS + \oint \vec{\nabla} f \cdot d\vec{l},\end{aligned}\tag{576}$$

de manera que

$$B\pi a^2 = -(f(2\pi) - f(0)). \quad (577)$$

Para los electrones por la trayectoria 1, la función de onda se escribe

$$\psi_1 = \psi e^{-\frac{ie}{\hbar c} f(\phi=0)} \quad (578)$$

y para los electrones que van por la trayectoria 2, la función de onda es

$$\psi_2 = \psi e^{-\frac{ie}{\hbar c} f(\phi=2\pi)} \quad (579)$$

Por tanto la probabilidad de detectar electrones en la pantalla es la suma de amplitudes de probabilidad por el camino 1 y 2:

$$\begin{aligned} P &= |\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi|^2 \left| 1 + e^{-\frac{ie}{\hbar c} (f(2\pi) - f(0))} \right|^2 \\ &= |\psi|^2 \left| 1 + e^{\frac{ie}{\hbar c} B\pi a^2} \right|^2 \\ &= 2|\psi|^2 \left\{ 1 + \cos^2 \left(\frac{eB\pi a^2}{\hbar c} \right) \right\} \\ &= 4|\psi|^2 \cos^2 \left(\frac{eB\pi a^2}{2\hbar c} \right) \end{aligned} \quad (580)$$

Fuera del solenoide por donde van los electrones, el campo magnético es cero, es decir, los electrones no interactúan con el campo. Sin embargo, dentro del solenoide el campo es diferente de cero. *M. Peshkin, A. Tonomura: Phys 340 Sprgnger (1989)*, ajustando la corriente del solenoide podemos hacer que el campo tome los valores

$$B = \frac{\hbar c}{ea^2}; \quad B = \frac{2\hbar c}{ea^2} \quad (581)$$

En el primer caso la Probabilidad vale cero y en el segundo es máxima.

28 Ejemplo de Teoría de Perturbaciones Degeneradas

Consideremos una partícula en un espacio bidimensional sometida a un potencial armónico

$$H_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2) \quad (582)$$

La cual experimenta una perturbación de la forma:

$$\begin{aligned} H_p &= m\omega^2\beta x \quad y \text{ donde } \beta < 1 \\ &= \beta W \end{aligned} \quad (583)$$

Hallar la energía y función de onda H_0 y $H = H_0 + H_p$ a primer orden en teoría de perturbaciones. Para el caso no perturbado tenemos

$$\begin{aligned} \psi_n^{(0)}(xy) &= \psi_{n_1}^{(0)}(x)\psi_{n_2}^{(0)}(y) \\ &= \langle x|n_1\rangle \langle y|n_2\rangle \end{aligned} \quad (584)$$

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega (n_1 + n_2 + 1), \quad n_1 + n_2 = n$$

Veamos cual es la degeneración de este estado. Si $n_1 = 0, 1, \dots, n$ entonces $n_2 = n, n - 1, \dots, 0$. Es decir, la degeneración es

$$n + 1. \quad (585)$$

Al introducir la perturbación los $n + 1$ niveles de energía degenerados se desdoblan en $n + 1$ estados.

Para encontrar la corrección a la energía debemos resolver el problema de autovalores

$$\det(H_p - \lambda I) = 0; \quad (H_p - \lambda I)A = 0 \quad (586)$$

donde H_p es una matriz de dimensión $g \times g$. Para simplificar los cálculos de los elementos de matriz de H_p , usemos el formalismo del espacio de *Fock* $|n\rangle$ y los operadores escalera a^\dagger, a .

Despejando n_2 :

$$n_2 = n - n_1 \quad (587)$$

entonces el estado $|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle$ se puede definir como:

$$\begin{aligned} |n_1\rangle |n_2\rangle &= |n_1\rangle |n - n_1\rangle \\ &= |i\rangle |n - i\rangle \quad n_1 = i = 0, 1, \dots, n \end{aligned} \quad (588)$$

Para hacer el sandwich definamos

$$\begin{aligned} |n'_1\rangle |n'_2\rangle &= |n'_1\rangle |n - n'_1\rangle \\ &= |j\rangle |n - j\rangle \quad n_1 = j = 0, 1, \dots, n \end{aligned} \quad (589)$$

Entonces el elemento de matriz es

$$\begin{aligned} \langle n'_1 n'_2 | H_p | n_1 n_2 \rangle &= \langle j | \langle n - j | H_p | i \rangle | n - i \rangle, \\ &= m\omega^2 \beta \langle j | x | i \rangle \langle n - j | y | n - i \rangle \\ &\equiv H_{pji}. \end{aligned} \quad (590)$$

usando el valor esperado para \hat{x} e \hat{y} el elemento de matriz de H_p se escribe en la forma:

$$H_{pji} = \frac{\hbar\omega}{2} \beta \{ \sqrt{i+1} \delta_{j,i+1} + \sqrt{i} \delta_{j,i-1} \} \{ \sqrt{n-i+1} \delta_{n-j,n-i+1} + \sqrt{n-i} \delta_{n-j,n-i-1} \} \quad (591)$$

$$H_{pji} = \frac{\hbar\omega}{2} \beta \{ \sqrt{i(n-i+1)} \delta_{j,i-1} + \sqrt{(n-i)(i+1)} \delta_{j,i+1} \}. \quad (592)$$

En forma matricial tenemos:

$$H_{pji} = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{n} & 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 \\ \sqrt{n} & 0 & \sqrt{2}\sqrt{n-1} & . & & & & . & . \\ 0 & \sqrt{2}\sqrt{n-1} & 0 & \sqrt{3}\sqrt{n-2} & & & & . & . \\ . & . & \sqrt{3}\sqrt{n-2} & 0 & & & & . & . \\ . & & & & . & & & & \\ . & & & & & . & & & \\ . & & & & & & . & & \\ 0 & & & & & & & 0 & \sqrt{n} \\ 0 & & & & & & & \sqrt{n} & 0 \end{bmatrix} \frac{\hbar\omega}{2}\beta. \quad (593)$$

En forma general es complicado resolver el problema de autovalores y no ilustra nada.

Consideremos un caso particular para $n = 4$, donde H_p queda en la forma

$$H_{pji} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (594)$$

Usando *Mathematica package* hallamos de forma simple el problema de autovalores. Para los autovalores de energía tenemos

$$E_n^{(1)} = \{-4, 4, -2, 2, 0\} \frac{\hbar\omega}{2} \quad (595)$$

donde la energía total sería $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$. Para los autovectores en la base

$\{|0\rangle|4\rangle, |1\rangle|3\rangle, |2\rangle|2\rangle, |3\rangle|1\rangle, |4\rangle|0\rangle\}$ se expresan en la tabla

$$\psi_n = \begin{pmatrix} \{ |0\rangle |1\rangle & |1\rangle |3\rangle & |2\rangle |2\rangle & |3\rangle |1\rangle & |4\rangle |0\rangle \} \\ |I\rangle & \frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{6}}{4} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ |II\rangle & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{6}}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ |III\rangle & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ |IV\rangle & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ |V\rangle & \frac{1}{2\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (596)$$

donde los niveles de energía se desdoblan en la forma:

Imagen Al Inicio de la Hoja – Pagina 130

y las energías totales son:

$$E_n = \{7\hbar\omega, 6\hbar\omega, 5\hbar\omega, 4\hbar\omega, 3\hbar\omega\}. \quad (597)$$

29 Ejercicios Teoría de Perturbaciones

Consideremos una partícula sumergida en un pozo de potencial tridimensional e introduci-
mos una perturbación H_p :

$$V_0(x, y, z) = 0 \text{ en } 0 \leq x, y, z \leq a; \quad \infty \text{ en } a < x, y, z. \quad (598)$$

$$H_p(x, y, z) = \lambda xy \text{ en } 0 \leq x, y, z \leq a; \quad 0 \text{ en } a < x, y, z. \quad (599)$$

Calculemos la función de onda y la energía para el sistema no-perturbado. Hallar la corrección a la energía al estado base y el primer estado excitado debido a H_p .

Para resolver la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi(x, y, z) = E \phi(x, y, z) \quad (600)$$

usamos separación de variables. Para ello definamos

$$\begin{aligned} \phi(x, y, z) &= \phi_x(x) \phi_y(y) \phi_z(z) = \prod_{i=1}^3 \phi_{x_i}(x_i) \\ E &= E_x + E_y + E_z = \sum_{i=1}^3 E_i \end{aligned} \quad (601)$$

se reemplaza en la ecuación de Schrödinger obtenemos tres ecuaciones las cuales escribimos de forma compacta como:

$$\left(\frac{d^2}{dx_i^2} + k_i^2 \right) \phi_{x_i}(x_i) = 0; \quad k_i^2 = \frac{2mE_i}{\hbar^2} \quad (602)$$

donde cada ecuación diferencial para $x_i = x, y, z$ tiene una solución de la forma:

$$\phi_{x_i}(x_i) = A_i \sin k_i x_i + B_i \cos k_i x_i \quad (603)$$

como el potencial es infinito en $x, y, z = 0, a$ entonces la función de onda se anula en estos puntos. Por tanto:

$$\begin{aligned} \phi_{x_i}(x_i = 0) &= B_i = 0 \quad i = x, y, z \\ \phi_{x_i}(x_i = a) &= A_i \sin k_i a \\ &= 0 \quad i = x, y, z. \end{aligned} \quad (604)$$

es decir,

$$k_i a = n_i \pi \quad n_i = n_x, n_y, n_z. \quad (605)$$

La función de onda y la energía se escriben en la forma:

$$\begin{aligned}\phi(x, y, z) &= A_{n_x, n_y, n_z} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right) \\ E_{n_x, n_y, n_z} &= E_x + E_y + E_z \\ &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\end{aligned}\tag{606}$$

La constante A_{n_x, n_y, n_z} se encuentra imponiendo la normalización a la función de onda:

$$\begin{aligned}\int |\phi(x, y, z)|^2 dx dy dz &= |A_{n_x, n_y, n_z}|^2 \left| \int_0^a \phi_{n_x}(x) dx \right|^3 \\ &= |A|^2 (a/3)^3 = 1 \\ A_{n_x, n_y, n_z} &= \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}.\end{aligned}\tag{607}$$

Para el estado base tenemos, no-degenerado,

$$E_{111}^{(0)} = 3E, \quad E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.\tag{608}$$

Para el primer estado excitado hay una degeneración, donde la energía esta dada por:

$$E_{211}^{(0)} = E_{121}^{(0)} = E_{112}^{(0)} = 6E\tag{609}$$

y las funciones de onda

$$|211\rangle, |121\rangle, |112\rangle.\tag{610}$$

Para imponer una condición sobre λ para que sea válida la teoría de perturbaciones, calculemos la corrección al estado base:

$$\begin{aligned}E_{111}^{(1)} &= \langle 111 | H_p | 111 \rangle \\ &= \left(\frac{2}{a}\right)^3 \lambda \int_0^a x \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \times \int_0^a y \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) dy \times \int_0^a z \sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right) dz \\ &= \lambda \left(\frac{2}{a}\right)^3 \left(\frac{a^2}{4}\right)^2 \frac{a}{2} \\ &= \frac{\lambda a^2}{4}\end{aligned}\tag{611}$$

Imponiendo la condición

$$E_{111}^{(1)} < E_{111}^{(0)} \quad (612)$$

por tanto

$$\lambda < \frac{6\pi^2\hbar^2}{ma^4} < 1 \quad (613)$$

Calculemos la corrección a la energía y las nuevas autofunciones para el primer estado excitado degenerado en la base $|211\rangle, |121\rangle, |112\rangle$. Entonces planteamos el problema:

$$(H_p - \lambda I)\vec{a} = 0 \quad (614)$$

donde $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$ en la base degenerada. primero hallamos los autovalores i.e.

$$\det(H_p - \lambda I) = 0 \quad (615)$$

Para ello es necesario calcular los elementos de matriz de H_p . Tenemos en cuenta que H_p

es real entonces $\langle a | H_p | b \rangle = \langle b | H_p | a \rangle$. Para los elementos de la diagonal

$$\begin{aligned} \langle 211 | H_p | 211 \rangle &= \langle 121 | H_p | 121 \rangle = \langle 112 | H_p | 112 \rangle \\ &= \lambda A^2 \int_0^a x \sin^2 \left(\frac{2\pi x}{a} \right) dx \int_0^a y \sin^2 \left(\frac{2\pi y}{a} \right) dy \int_0^a z \sin^2 \left(\frac{2\pi z}{a} \right) dz \\ &= \lambda \left(\frac{2}{a} \right)^3 \left(\frac{a^2}{4} \right)^2 \left(\frac{a}{2} \right) \\ &= \frac{a^2}{4} \end{aligned} \quad (616)$$

ahora calculamos los elementos de matriz fuera de la diagonal.

$$\begin{aligned}
\langle 211 | H_p | 121 \rangle &= \langle 121 | H_p | 211 \rangle, \\
&= \lambda A^2 \int_0^a x \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \times \int y \sin\frac{\pi y}{a} \sin\frac{2\pi y}{a} dy \times \int_0^a \sin^2\frac{\pi z}{a} dz, \\
&= \lambda \left(\frac{2}{a}\right)^3 \left(-\frac{8}{9} \frac{a^2}{\pi^2}\right)^2 \frac{a}{2}, \\
&= \lambda \left(\frac{16}{9\pi^2}\right)^2 a^2,
\end{aligned} \tag{617}$$

$$\begin{aligned}
\langle 211 | H_p | 112 \rangle &= \lambda A^2 \int_0^a x \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \times \int x \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) dy \times \int_0^a \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right) \sin\frac{2\pi z}{a} dz, \\
&= 0
\end{aligned} \tag{618}$$

$$\begin{aligned}
\langle 121 | H_p | 112 \rangle &= \langle 112 | H_p | 121 \rangle, \\
&= \lambda A^2 \int_0^a x \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \times \int_0^a y \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) dy \times \int_0^a \sin\left(\frac{\pi z}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi z}{a}\right) dz, \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{619}$$

Por tanto, el Hamiltoniano en la base $\{|211\rangle, |121\rangle, |112\rangle\}$ es queda en la forma:

$$H_p = \begin{bmatrix} \alpha & \alpha\beta & 0 \\ \alpha\beta & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix} \tag{620}$$

donde

$$\alpha = \frac{\lambda a^2}{4}, \quad \beta = \left(\frac{3z}{9\pi^2}\right)^2. \tag{621}$$

El polinomio característico se calcula de $\det(H_p - \alpha I) = 0$, i.e.,

$$(\alpha - \lambda)((\alpha - \lambda)(\alpha - \lambda) - (\alpha\beta)^2) = 0 \quad (622)$$

donde los autovalores están dados por:

$$\lambda_1 = \alpha; \quad \lambda_2 = \alpha(1 + \beta); \quad \lambda_3 = \alpha(1 - \beta). \quad (623)$$

Para el valor $\lambda_1 = \alpha$ la función de onda $|112\rangle$ queda desconectada de $\{|121\rangle, |211\rangle\}$ y por tanto esta no se corrige, pero si hay corrección a la energía de este estado

$$\begin{aligned} &= E_{112}^{(0)} + E_{112}^{(1)} \\ &= \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{\lambda a^2}{4}. \end{aligned} \quad (624)$$

Para los estados $|121\rangle, |211\rangle$ hay corrección a la energía y mezcla entre ellos. Para ello debemos hallar las nuevas-autofunciones asociadas a $\lambda_{2,3}$. Usando la base de estos estados, podemos escribir cualquier función de onda en la forma

$$a_1 |211\rangle + a_2 |121\rangle = (a_1, a_2) \quad (625)$$

donde el problema de autovectores se escribe en la forma

$$\begin{pmatrix} \alpha & \alpha\beta \\ \alpha\beta & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (626)$$

$$\begin{aligned} (\alpha - \lambda)a_1 + \alpha\beta a_2 &= 0 \\ a_1 &= \frac{\alpha\beta}{\lambda - \alpha} a_2 \end{aligned} \quad (627)$$

Para $\lambda_2 = \alpha(1 + \beta)$, tomemos:

$$a_1^{(2)} = a_2^{(2)} \quad (628)$$

y usando la condición de normalización

$$\begin{aligned} \left| a_1^{(2)} \right|^2 + \left| a_2^{(2)} \right|^2 &= 1 \\ a_1^{(2)} &= a_2^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (629)$$

Por tanto, la autofunción respectiva es:

$$\frac{|211\rangle + |121\rangle}{\sqrt{2}} \quad (630)$$

y la energía total:

$$E_2 = E_{211}^{(0)} + \frac{\lambda a^2}{4} \left(1 + \left(\frac{32}{9\pi^2} \right)^2 \right) \quad (631)$$

Para $\lambda_3 = \alpha(1 - \beta)$, obtenemos

$$a_1^{(3)} = -a_2^{(3)} \quad (632)$$

y la función de onda y autoenergía esta dados por

$$\frac{|211\rangle - |121\rangle}{\sqrt{2}}; \quad E_3 = E_{211}^{(0)} + \frac{\lambda a^2}{4} \left(1 - \left(\frac{32}{9\pi^2} \right) \right) \quad (633)$$

Imagen Al Final de la Hoja – Pagina 137

30 Método Variacional

Supongamos que tenemos un Hamiltoniano que no tiene solución exacta y tampoco se puede escribir en la forma $H_0 + H_p$. Entonces el método variacional ó de *Rayleigh-Ritz* consiste en proponer una función de onda $\psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ y se calcula el valor esperado del Hamiltoniano

$$E(\alpha_1, \alpha_2, \dots) = \langle \psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots) | H | \psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \rangle \quad (634)$$

donde ψ se asume normalizada, y se impone la condición de que $E(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ sea minimal para ese conjunto de parámetros, i.e.,

$$\begin{aligned}\delta E(\alpha_1, \alpha_2, \dots) &= 0, \\ \sum_{i=1}^n \frac{\partial E(\alpha_1, \alpha_2, \dots)}{\partial \alpha_i} \delta \alpha_i &= 0, \\ \frac{\partial E(\alpha_1, \alpha_2, \dots)}{\partial \alpha_i} &= 0. \quad i = 1, \dots, n.\end{aligned}\tag{635}$$

Veamos algunos ejemplos:

30.1 Oscilador Armónico

Calcular la energía y la función de onda para el estado base y el primer estado excitado.

Como el potencial es $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ para $-\infty < x < \infty$ entonces propongamos una función que converja en $x = I\infty$ y que sea par i.e.

$$\psi_0(x, \alpha) = Ae^{-\alpha x^2}\tag{636}$$

El primer paso es normalizar la función de onda

$$\begin{aligned}\langle \psi_0(x, \alpha) | \psi_0(x, \alpha) \rangle &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx, \\ &\equiv \frac{A^2}{\sqrt{2\alpha}} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{-1/2} dt, \\ A &= \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{1/4}.\end{aligned}\tag{637}$$

donde se hizo el cambio de variable

$$x = \frac{t^{1/2}}{\sqrt{2\alpha}}\tag{638}$$

y se usó la función Gamma para realizar la integral

$$\Gamma(n) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{n-1} dt,\tag{639}$$

además se tiene en cuenta que $\Gamma(1/2)\sqrt{\pi}$. Ahora calculamos el valor esperado del Hamiltoniano para este estado:

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= \langle \psi(x\alpha) | H | \psi(x\alpha) \rangle \\ &= \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \right] e^{-\alpha x^2} dx. \end{aligned} \quad (640)$$

Después de realizar la derivada e integrar, usando de nuevo la función Gamma, entonces

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{m\omega^2}{4\alpha}. \quad (641)$$

Por tanto, minimizando la energía en función del parámetro α :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} &= \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{4\alpha^2} = 0, \\ \alpha_0 &= \frac{m\omega}{2\hbar}. \end{aligned} \quad (642)$$

Evalutando la energía en el valor minimal,

$$E(\alpha_0) = \frac{\hbar\omega}{2}, \quad \psi(x, \alpha_0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}. \quad (643)$$

los cuales coinciden con la energía y la función de onda del estado base del oscilador armónico.

Para calcular el primer estado excitado supongamos que la función de onda converge para $x = \pm\infty$, que es función impar y es ortogonal al estado base, i.e.

$$\psi_0(x, \beta) = B x e^{-\alpha x^2} \quad (644)$$

La condición de ortogonalidad se cumple por ser función para e impar. Ahora entonces normalicemos la función de onda

$$\begin{aligned} \langle \psi_1(x, \beta) | \psi_1(x, \beta) \rangle &= B^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\beta x^2} dx, \\ &= |B|^2 \frac{1}{(2\alpha)^{3/2}} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{1/2} dt, \\ &= 1. \end{aligned} \quad (645)$$

Entonces

$$B = \left(\frac{32\alpha^3}{\pi} \right)^{1/4} \quad (646)$$

La energía para el primer estado excitado se calcula

$$\begin{aligned} E_1(x, \beta) &= \langle \psi_1(x, \beta) | H | \psi_1(x, \beta) \rangle, \\ &= \frac{3\hbar^2}{2m} \beta + \frac{3m\omega^2}{8\beta} \end{aligned} \quad (647)$$

e imponiendo la condición de mínimo de la energía

$$\frac{\partial E_1(x, \beta)}{\partial \beta} = \frac{3\hbar^2}{2m} - \frac{3m\omega^2}{8\beta^2} = 0 \quad (648)$$

encontramos que se satisface cuando el parámetro β vale:

$$\beta_0 = \frac{m\omega}{2\hbar}. \quad (649)$$

Por tanto, la energía y la función de onda para β_0 sería

$$E_1(x, \beta_0) = \frac{3}{2}\hbar\omega, \quad \psi_1(x, \beta_0) = \left(\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega^2 x^2}{2\hbar}}. \quad (650)$$

Otro ejemplo de interés para probar la validez del método variacional es usar el Hamiltoniano del átomo de Hidrógeno, encontrar la energía y función de onda del estado base y primer estado excitado. El estado base es completamente simétrico, entonces pensemos que la función de onda únicamente depende de r y es convergente en $r = \infty$, Por tanto

$$\psi(r, \alpha) = A e^{-\frac{r}{\alpha}} \quad (651)$$

Normalizando la función de onda y usando la función Gamma

$$\langle \psi_1(r, \alpha) | \psi_1(r, \alpha) \rangle = |A|^2 \int e^{-2\frac{r}{\alpha}} r^2 dr d\Omega = 1, \quad (652)$$

tenemos,

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha^3}}. \quad (653)$$

Calculando el valor esperado del Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} E_p(\alpha) &= \langle \psi(r, \alpha) | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} | \psi(r, \alpha) \rangle, \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\alpha^2} - \frac{e^2}{\alpha} \end{aligned} \quad (654)$$

y minimizando la energía:

$$\frac{\partial E_1(\alpha)}{\partial \alpha} = 0, \quad \alpha_1 = \frac{\hbar^2}{me^2} \equiv a_0. \quad (655)$$

donde a_0 es el radio de Bohr. Evaluando la energía y la función de onda en α_1 , tenemos

$$E_1(\alpha_1) = -\frac{me^4}{2\hbar^2}, \quad \psi(x, \alpha_1) = \left(\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r/a_0}, \quad (656)$$

la cual coincide con las obtenidas en la ecuación de Schrödinger.

Para el primer estado excitado se propone:

$$\psi_2(r, \beta, \gamma) = A \left(1 - \beta \frac{r}{a_0}\right) e^{-\gamma \frac{r}{a_0}} \quad (657)$$

La condición de normalización y ortogonalidad con el estado base implican dos condi-

ciones:

$$\begin{aligned} \langle \psi_2(r, \beta, \gamma) | \psi_2(r, \beta, \gamma) \rangle &= 1 \longrightarrow A^2 = \frac{3\gamma^5}{\pi a_0^3 (\gamma^2 - \gamma + 1)} \\ \langle \psi_2(r, \beta, \gamma) | \psi_0(r) \rangle &= 1 \longrightarrow \beta = \frac{1 + \gamma}{2} \end{aligned} \quad (658)$$

Reemplazando y hallando el valor esperado del Hamiltoniano,

$$\begin{aligned} E_2(\beta, \gamma) &= \langle \psi_2(r, \beta, \gamma) | H | \psi_2(r, \beta, \gamma) \rangle \\ &= -e^2 \left(\frac{\gamma}{2(-\gamma + 1)} + \frac{7}{6}\gamma + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (659)$$

Minimizando la energía respecto a $a\gamma$:

$$\frac{\partial E_2}{\partial \gamma} = 0, \quad \gamma_0 = \beta_0 = \frac{1}{2}. \quad (660)$$

y evaluado en este punto encontramos la energía y la función de onda:

$$\begin{aligned} E_2(\beta_0, \gamma_0) &= -\frac{e^2}{8a_0} = \frac{E_1}{2^2}, \\ \psi_2(\beta_0, \gamma_0) &= \frac{1}{(8\pi a_0^3)^{1/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \end{aligned} \quad (661)$$

las cuales coinciden con las obtenidas de la ecuación de Schrödinger.

30.2 Potencial Lineal

Una partícula se mueve en una dimensión y está sometida al potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x \leq 0 \\ Fx & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (662)$$

Estimar la energía del estado base.

La función debe ser nula para $x \leq 0$ y para continuidad debe ser $\psi(x = 0) = 0$, de igual manera para $x \rightarrow \infty$. Entonces probemos una función de la forma:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq 0 \\ xe^{-\lambda x} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (663)$$

Para $x > 0$ el Hamiltoniano tiene la forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + Fx. \quad (664)$$

Primero normalicemos la función de onda:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(x, \lambda) | \psi(x, \lambda) \rangle &= N^2 \int_0^\infty x^2 e^{-2\lambda x} dx, \\
 &= \frac{N^2}{(2\lambda)^3} \int_0^\infty e^{-t} t^2 dt, \\
 \frac{N^2}{4\lambda^3} &= 1, \\
 N &= 2\lambda^{3/2}.
 \end{aligned} \tag{665}$$

Entonces la energía se calcula del valor esperado de H

$$\begin{aligned}
 E(\lambda) &= \langle \psi(x, \lambda) | H | \psi(x, \lambda) \rangle, \\
 &= 4\lambda^3 \int_0^\infty x e^{-\lambda x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + Fx \right) x e^{-\lambda x} dx, \\
 &= \frac{1}{2m} \left[\hbar^2 \lambda^2 + \frac{3mF}{\lambda} \right]
 \end{aligned} \tag{666}$$

y minimizando la energía:

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = 0, \quad \lambda_0 = \left(\frac{3mF}{2\hbar^2} \right)^{1/3}. \tag{667}$$

$$E(\lambda_0) = \left(\frac{3}{2} \right)^{5/3} \left(\frac{\hbar^2 F^2}{m} \right)^{1/3}. \tag{668}$$

30.3 Átomo de Helio

En primer lugar, con miras a simplificar el álgebra, se considera $\hbar = m = 1$.

$$H = \sum_{i=1,2} -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{2}{r_i} + \frac{1}{r_{12}} \tag{669}$$

$$r_{12} = (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta)^{1/2}$$

Propongamos como función de onda:

$$\begin{aligned}\phi(r_1, r_2) &= \phi(r_1)\phi(r_2) \\ &= \frac{\eta^3}{\pi} e^{-\eta(r_1+r_2)}\end{aligned}\tag{670}$$

donde la función ya se normalizo i.e.

$$\int |\phi(r_1, r_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2 = 1\tag{671}$$

Entonces calculemos

$$E(\eta) = \langle \phi(r_1, r_2) | H | \phi(r_1, r_2) \rangle\tag{672}$$

Propongamos un Hamiltoniano de la forma:

$$\begin{aligned}H &= \left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{\eta}{r_1} \right) + \left(-\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{\eta}{r_2} \right) + \left(\frac{\eta-2}{r_1} + \frac{\eta-2}{r_2} \right) + \frac{1}{r_{12}} \\ \hat{H}\phi &= \hat{h}_1\phi + \hat{h}_2\phi + \hat{h}_3\phi\end{aligned}\tag{673}$$

$$\text{usando } \nabla_1^2 = \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left(r_1^2 \frac{\partial}{\partial r_1} \right)$$

Entonces

$$\hat{h}_1\phi = \hat{h}_2\phi = -\frac{\eta^2}{2} \left(\frac{\eta^3}{\pi^2} \right) e^{-\eta(r_1+r_2)}\tag{674}$$

entonces:

$$E(\eta) = \frac{\eta^6}{\pi^2} \int e^{-2\eta(r_1+r_2)} \left[-\eta^2 + \frac{\eta-2}{r_1} + \frac{\eta-2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] d^3r_1 d^3r_2\tag{675}$$

Usando la definición de la función Gamma

$$\int e^{-t} t^{n-1} dt = \Gamma(n)\tag{676}$$

Reemplazando en las integrales $2\eta r_1 = t_1$, $2\eta r_2 = t_2$

$$\begin{aligned}
\int e^{-2\eta(r_1+r_2)} d^3r_1 d^3r_2 &= \int e^{-2\eta(r_1+r_2)} r_1^2 dr_1 d\Omega_1 r_2^2 dr_2 d\Omega_2 \\
&= (4\pi)^2 \left(\int_0^\infty e^{-2\eta r_1} r_1^2 dr_1 \right)^2 \\
&= \frac{\pi^2}{\eta^6}
\end{aligned} \tag{677}$$

$$\begin{aligned}
\int \frac{1}{r_1} e^{-2\eta(r_1+r_2)} d^3r_1 d^3r_2 &= (4\pi)^2 \int e^{-2\eta(r_1+r_2)} r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \\
&= \frac{\pi^2}{\eta^5}
\end{aligned} \tag{678}$$

$$\int \frac{1}{r_2} e^{-2\eta(r_1+r_2)} d^3r_1 d^3r_2 = \frac{\pi^2}{\eta^5} \tag{679}$$

$$\int \frac{1}{r_{12}} e^{-2\eta(r_1+r_2)} d^3r_1 d^3r_2 = \frac{5}{8} \frac{\pi^2}{\eta^5} \tag{680}$$

En donde se ha usado la técnica de integración que se usó en Teoría de Perturbaciones.

Entonces

$$E(\eta) = \eta^2 - \frac{27}{8}\eta \tag{681}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E(\eta)}{\partial \eta} &= 0 \longrightarrow \eta_0 = \frac{27}{16} \\
E(\eta_0) &= - \left(\frac{27}{16} \right)^2
\end{aligned} \tag{682}$$

Para el Helio

$$E_{n=1}^{(0)} = -\frac{mZ^2e^4}{\hbar^2} = -Z^2 \tag{683}$$

Pero si tenemos Helio ionizado, es decir, le faltan electrones, entonces:

$$E_{He^+} = -\frac{Z^2}{2} = -\frac{2^2}{2} = -2 \quad (684)$$

$$He \longrightarrow He^+ + 1e^-$$

usando el resultado anterior la energía del He es:

$$E_{He} = -\left(\frac{27}{16}\right)^2 \quad (685)$$

Entonces la energía de ionización sería

$$\begin{aligned} E_I &= E_{He^+} - E_{He}; \quad \text{energía necesaria para sacar el electrón} \\ &= -\left(\frac{27}{16}\right)^2 - (-2) \\ &= 23.066 \text{ eV} \end{aligned} \quad (686)$$

$$E_{I_{exp}} = 24.5 \text{ eV}$$

31 Método Variacional Lineal

Supongamos que proponemos un conjunto de funciones de prueba reales

$$\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\} \quad (687)$$

entonces

$$\psi = \sum_{j=1}^n c_j \psi_j \quad (688)$$

donde los coeficientes c_j son los a determinar. Para normalizar la función de onda establecemos:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_i \sum_j c_i^* c_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle \\ &= \sum_i \sum_j c_i^* c_j a_{ij} \end{aligned} \quad (689)$$

donde las funciones ψ_i, ψ_j no son necesariamente ortogonales. La energía la escribimos en la forma:

$$\begin{aligned} E_\phi \equiv E(c_1, c_2, \dots, c_n) &= \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \\ &= \frac{\sum_i \sum_j c_i^* c_j \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle}{\sum_{ij} c_i^* c_j a_{ij}} \\ &= \frac{\sum_i \sum_j c_i^* c_j H_{ij}}{\sum_i \sum_j c_i^* c_j a_{ij}} \end{aligned} \quad (690)$$

como H es hermítico satisface:

$$H_{ij} = H_{ji}^* = H_{ji} \quad (691)$$

El método variacional establece que

$$\frac{\partial E_\phi}{\partial c_i} = 0 \quad i = 1, \dots, n \quad (692)$$

Consideremos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial c_i} \left(\sum_k \sum_j c_k^* c_j a_{kj} E_\phi \right) &= \frac{\partial}{\partial c_i} \left(\sum_k \sum_j c_k^* c_j H_{kj} \right) \\ 2 \sum_j c_j a_{ij} E_\phi + \langle \psi | \psi \rangle \frac{\partial E_\phi}{\partial c_i} &= 2 \sum_j c_j H_{ij} \end{aligned} \quad (693)$$

Por tanto

$$\sum_j (H_{ij} - a_{ij} E_\phi) c_j = 0 \quad (694)$$

$$(H - E_\phi a) C = 0$$

tiene solución no trivial si

$$\det(H - E_\phi a) = 0 \quad (695)$$

Este determinante corresponde a un polinomio de grado n para E_ϕ . Supongamos entonces

$$E_\phi^{(1)} \leq E_\phi^{(2)} \dots \leq E_\phi^{(n)}. \quad (696)$$

Para un valor dado de $E_\phi^{(i)}$ se calculan los $\{C_1^{(j)}, \dots, C_n^{(j)}\}$

$$\sum_j (H_{ij} - E_\phi^{(k)} a_{ij}) c_j^{(k)} = 0 \quad (697)$$

La respectiva función de onda asociada a $E_\phi^{(k)}$ sería

$$\psi^{(k)} = \sum_j c_j^{(k)} f_j \quad (698)$$

Ejemplo: Efecto Stark

Un átomo de Hidrógeno sumergido en un campo eléctrico constante.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} + Er \cos \theta \quad (699)$$

usemos dos funciones de onda de $H_0 = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r}$ i.e.

$$\psi_{1s} = \pi^{-1/2} e^{-r/a_0} a_0^{-3/2}; \quad \psi_{2po} = (8a_0^2 \pi)^{-1/2} \frac{r}{2a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta \quad (700)$$

ya normalizadas. Para simplificar los cálculos tengamos en cuenta que

$$\begin{aligned} H_0 \psi_{1s} &= E_1^{(0)} \psi_{1s} & E_1^{(0)} &= -\frac{e^2}{2a_0} \\ H_0 \psi_{2po} &= E_2^{(0)} \psi_{2po} & E_2^{(0)} &= \frac{E_1^{(0)}}{4} \end{aligned} \quad (701)$$

Debemos calcular los elementos de matriz

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle \\ H_{11} &= \int \psi_{1s}^* H \psi_{1s} d^3 r; \quad H_{12} = H_{21} = \int \psi_{1s}^* H \psi_{2po} d^3 r \\ H_{22} &= \int \psi_{2p}^* H \psi_{2p} d^3 r \end{aligned} \quad (702)$$

Realizando las integrales obtenemos

$$\begin{aligned}
 H_{11} &= E_1^{(0)} \int |\psi_{1s}^2| d^3r = E_1^{(0)}, \\
 H_{22} &= E_2^{(0)} \int |\psi_{1po}^2| d^3r = E_2^{(0)}, \\
 H_{12} &= H_{21} = \int \psi_{1s}^* (H_0 + Er \cos \theta) \psi_{2po} d^3r, \\
 &= E \int \psi_{1s}^* r \cos \theta \psi_{2po} d^3r, \\
 &= \frac{256}{\sqrt{2243}} E a_0.
 \end{aligned} \tag{703}$$

Para calcular la ecuación secular requerimos a_{ij} ,

$$\begin{aligned}
 a_{11} &= \langle \psi_{1s} | \psi_{1s} \rangle = 1 \quad a_{22} = \langle \psi_{2po} | \psi_{2po} \rangle = 1 \\
 a_{12} &= a_{21} = \langle \psi_{1s} | \psi_{1po} \rangle = 0.
 \end{aligned} \tag{704}$$

El problema de autovalores se reduce a

$$\begin{pmatrix} H_{11} - E_\phi^{(k)} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} - E_\phi^{(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(k)} \\ c_2^{(k)} \end{pmatrix} = 0 \tag{705}$$

Para el autovalor

$$\begin{aligned}
 E_\phi^{(k)} &= \frac{1}{2} \left[+ (H_{11} + H_{22} \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4H_{12}^2}) \right] \\
 &\approx \frac{1}{2} \left\{ H_{11} + H_{22} \pm |H_{11} - H_{22}| \pm \frac{2H_{12}^2}{|H_{11} - H_{22}|} \right\} \\
 &\approx E_\phi(E=0) - \frac{1}{2} \alpha E^2
 \end{aligned} \tag{706}$$

donde α es la polarizabilidad eléctrica, definida como:

$$\begin{aligned}
 \frac{a_0}{e^2} E_\phi(E) &\approx 0.50 - \frac{1}{2} 3 \left(\frac{E a_0}{e} \right)^2 \dots \\
 \alpha &\approx 3
 \end{aligned} \tag{707}$$

De la ecuación de autovalores obtenemos $c_1^{(k)}, c_2^{(k)}$:

$$(H_{11} - E_\phi^{(k)})c_1 + H_{12}c_2 = 0 \longrightarrow c_1^{(k)} = \frac{H_{12}c_2^{(k)}}{E_\phi^{(k)} - H_{11}}.$$

$$\psi^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{H_{12}^2 + (E_\phi^{(k)} - H_{11})^2}} \begin{pmatrix} H_{12} \\ E_\phi^{(k)} - H_{11} \end{pmatrix} \quad (708)$$

32 Teoría de Perturbaciones Dependientes del Tiempo

Son importantes para estudiar radiación-materia donde la perturbación depende del tiempo como es el caso de los campos electromagnéticos. En este caso el Hamiltoniano se escribe en la forma:

$$H = H_0 + V(t) \quad (709)$$

donde el orden cero se define como

$$H_0\phi_n = E_{(0)\phi_n}, \quad (710)$$

y escribimos el problema de autovalores en general

$$H\psi = E\psi \quad (711)$$

Antes, desarrollemos los cuadros de Schrödinger, el tradicional, el de Heisenberg y el cuadro de interacción. Formulaciones equivalentes de la mecánica cuántica.

El cuadro de Schrödinger la dinámica ó evolución del sistema está en la función de onda y los operadores son independientes del tiempo. La ecuación de Schrödinger determina la evolución del sistema

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_s(t) = H\psi_s(t) \quad (712)$$

Supongamos que existe un operador evolución temporal, el cual tiene la propiedad de evolucionar temporalmente la función de onda

$$\psi_s(t) = U(t, t_0)\psi_s(t_0) \quad (713)$$

entonces reemplazando en la ecuación de Schrödinger obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0). \quad (714)$$

Dicha ecuación diferencial tiene una solución formal:

$$U(t, t_0) = e^{-i \frac{\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} \quad (715)$$

El conjunto de dichos operadores forman un grupo:

$$\begin{aligned} U(t, t_0)U(t_0, t_1) &= U(t, t_1) \\ U(t, t_0)U(t, t_0)^{-1} &= U(t, t_0)U(t, t_0)^\dagger = I \\ U(t, t_0)^{-1} &= U(t_0, t) = U(t_0, t)^\dagger \end{aligned} \quad (716)$$

además, el operador de evolución es unitario porque $U^{-1} = U^\dagger$ lo cual se deriva de la hermiticidad del Hamiltoniano H . Definamos el cuadro de Heisenberg. Este formalismo tiene la evolución del sistema en los operadores y la función de onda no contiene la dinámica del sistema. Entonces definimos la función de onda en el cuadro de Heisenberg como

$$\psi_s(t_0) = \psi_H; \quad \frac{\partial}{\partial t} \psi_H = 0 \quad (717)$$

Supongamos que el valor esperado de un operador es el mismo en los dos cuadros. Entonces:

$$\begin{aligned} \langle \psi_s(t) | A_s | \psi_s(t) \rangle &= \langle \psi_s(0) | U(t, t_0)^\dagger A_s U(t, t_0) | \psi_s(0) \rangle \\ &= \langle \psi_H | A_H(t) | \psi_H \rangle \end{aligned} \quad (718)$$

donde se define el operador dependiente del tiempo en el cuadro de Heisenberg como:

$$A_H(t) = U(t, t_0)^\dagger A_s U(t, t_0) \quad (719)$$

El cual contiene la dinámica del sistema. Para determinar la evolución temporal del sistema ya no usaremos la ecuación de Schrödinger. Veamos como evoluciona en el tiempo los operadores, es decir, la evolución temporal del sistema. Derivando el operador respecto al tiempo obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_H(t) &= \frac{d}{dt} (U(t, t_0)^\dagger A U(t, t_0)) \\ &= \left(\frac{d}{dt} U(t, t_0)^\dagger \right) A U(t, t_0) + U(t, t_0)^\dagger A \frac{d}{dt} U(t, t_0) \\ &= \frac{i}{\hbar} H U(t, t_0)^\dagger A U(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} U(t, t_0)^\dagger A U(t, t_0) H \\ &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, A_H(t)], \end{aligned} \quad (720)$$

donde esta se conoce como la ecuación de Heisenberg y hace el papel de la ecuación de Schrödinger porque contiene la evolución temporal del sistema.

Veamos un ejemplo donde es útil el esquema de Heisenberg. Consideremos una partícula con espín $\vec{S}(t)$ sumergida en un campo magnético, i.e., cuyo Hamiltoniano se escribe en la forma:

$$H = -\mu_B \vec{S}(t) \cdot \vec{B} = -\mu_B S_z(t) B \quad (721)$$

donde se consideró el campo magnético en la dirección z.

Entonces usando la ecuación de Heisenberg; tenemos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \vec{S}_H(t) &= [S_H(t), H] \\ &= -\mu_B B [S_H(t), S_z(t)] \end{aligned} \quad (722)$$

Para la componente z del espín $\vec{S}_H(t)$, tenemos que conmuta con el Hamiltoniano

$$[S_z(t), H(t)] = -\mu_B B [S_z(t), S_z(t)] = 0 \quad (723)$$

y por tanto, el espín en dimensión z es una constante de movimiento, i.e.,

$$\frac{d}{dt} S_z(t) = 0. \quad (724)$$

Para las componentes x, y del espín, teniendo en cuenta el algebra de Lie de espín, obtenemos:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} S_x(t) &= -\mu_B B [S_x(t), S_z(t)] \\ &= i\hbar \mu_B B S_y(t) \\ i\hbar \frac{d}{dt} S_y(t) &= -\mu_B B [S_y(t), S_z(t)] \\ &= -i\hbar \mu_B B S_x(t) \end{aligned} \quad (725)$$

son dos ecuaciones diferenciales acopladas. Una solución fácil de realizar es usar la base

$$S_{\pm}(t) = \frac{S_x(t) \pm iS_y(t)}{\sqrt{2}} \quad (726)$$

donde; en dicha base las ecuaciones se desacoplan:

$$\frac{dS_{\pm}(t)}{dt} = \mp i\mu_B B S_{\pm}(t) \quad (727)$$

La solución es

$$S_{\pm}(t) = \sqrt{2} S_{\pm} e^{\mp i\mu_B B t} \quad (728)$$

y las componentes S_x y S_y se escriben en la forma:

$$\begin{aligned}
 S_x &= S_x^0 e^{-i\mu_B B t} + S_-^0 e^{i\mu_B B t} \\
 &= S_x^0 \cos \mu_B B t \\
 S_y &= -\frac{S_+^0}{i} e^{-i\mu_B B t} + \frac{S_-^0}{i} e^{i\mu_B B t} \\
 &= S_y^0 \sin \mu_B B t
 \end{aligned} \tag{729}$$

donde se consideró que las amplitudes iniciales son iguales $S_+^0 = S_-^0$. Como vemos, el campo externo B hace que el espín rote alrededor del campo B , con una función $\omega = \mu_B B$

$$\omega = g_s \frac{e\hbar}{2m} B. \tag{730}$$

donde $g_s = 2$ para electrones.

33 Cuadro de Interacción

Desarrollemos un formalismo donde la ecuación de evolución temporal no contenga el problema cero, i.e., H_0 . Para ello redefinimos la función de onda

$$\psi_I(t) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} \psi(t) \tag{731}$$

y reemplazando en la ecuación de Schrödinger obtenemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \psi_I(t) \right) = (H_0 + V(t)) e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \psi_I(t) \tag{732}$$

Realizando las derivadas y multiplicando por $e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}}$, obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_I(t) = V_I(t) \psi_I(t) \tag{733}$$

donde:

$$V_I(t) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} V(t) e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \quad (734)$$

En este cuadro la función de onda y el potencial dependen del tiempo. Para cualquier otro operador $A(t)$ se puede definir la forma similar $A_I(t)$, i.e.,

$$A_I(t) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} A(t) e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \quad (735)$$

Para hallar la ecuación de evolución del operador $A_I(t)$ derivamos respecto al tiempo, i.e.,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_I(t) &= \frac{d}{dt} (U(t)^\dagger A(t) U(t)); \quad U(t) = e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \\ &= \frac{i}{\hbar} H_0 U(t)^\dagger A(t) U(t) - \frac{i}{\hbar} U(t)^\dagger A(t) U(t) H_0 + U(t)^\dagger \frac{\partial A(t)}{\partial t} U(t) \\ &= \frac{i}{\hbar} (H_0 A_I(t) - A_I(t) H_0) + U(t)^\dagger \frac{\partial A(t)}{\partial t} U(t) \\ &= \frac{i}{\hbar} [H_0, A_I(t)] + \left(\frac{\partial A(t)}{\partial t} \right)_I. \end{aligned} \quad (736)$$

Por tanto,

$$\boxed{\frac{d}{dt} A_I(t) = \frac{i}{\hbar} [H_0, A_I(t)] + \left(\frac{\partial A(t)}{\partial t} \right)_I}$$

veamos la ecuación de movimiento para el operador de evolución en el cuadro de interacción. Consideremos $U(t, t_i)_I$ de la forma:

$$U_I(t, t_i) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} U(t, t_i) e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}} \quad (737)$$

Teniendo en cuenta la función de onda:

$$\psi(t) = U(t, t_i) \psi(t_i) \quad (738)$$

y multiplicando a la izquierda por $e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}}$ e insertando el operador identidad $e^{-i\frac{H_0 t_i}{\hbar}} e^{i\frac{H_0 t_i}{\hbar}} =$

I , tenemos

$$e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} \psi(t) = e^{i\frac{H_0 t}{\hbar}} U(t, t_i) e^{-i\frac{H_0 t_i}{\hbar}} e^{i\frac{H_0 t_i}{\hbar}} \psi(t_i) \quad (739)$$

tenemos

$$\begin{aligned}
 \psi_I(t) &= U_I(t, t_i) \psi_I(t_i) \\
 U_I(t, t_i) &= e^{i \frac{H_0 t}{\hbar}} U(t, t_i) e^{-i \frac{H_0 t_i}{\hbar}} \\
 \psi(t_i) &= e^{i \frac{H_0 t_i}{\hbar}} \psi(t_i).
 \end{aligned} \tag{740}$$

Derivando respecto al tiempo y usando la ecuación de evolución de $\psi_I(t)$, tenemos:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \psi_I(t)}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial U_I(t, t_i)}{\partial t} \psi_I(t_i) \\
 &= V_I(t) \psi_I(t) \\
 &= V_I(t) U_I(t, t_i) \psi_I(t_i).
 \end{aligned} \tag{741}$$

Igualando la primera y tercera ecuación, obtenemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t_i) = V_I(t) U_I(t, t_i) \tag{742}$$

la cual tiene una solución formal:

$$U_I(t, t_i) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t V_I(t') U_I(t', t_i) dt' \tag{743}$$

donde se uso la condición $U(t_i, t_i) = I$.

Suponiendo que $V(t)$ es una perturbación, se puede hallar una serie perturbativa para

$U_I(t, t_i)$ de la forma, A orden cero despreciamos la perturbación y obtenemos:

$$U_I^{(0)}(t, t_i) = I. \tag{744}$$

Para obtener a primer orden, reemplazamos el orden cero $U_I^{(0)}$ en el término del potencial,

entonces definimos:

$$U_I^{(1)}(t, t_i) \approx I \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t V_I(t') dt'. \tag{745}$$

Para hallar el segundo orden en perturbaciones reemplazamos $U_I^{(1)}$ en la solución formal de $U_I(t, t_i)$ y obtenemos:

$$\begin{aligned} U_I^{(2)}(t, t_i) &\approx I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t V_I(t'') U_I^{(1)}(t'', t_i) dt'' \\ &\approx I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t V_I(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_i}^t V_I(t') dt' \times \int_{t_i}^{t'} V_I(t'') dt'' \end{aligned} \quad (746)$$

De forma inductiva se puede inferir, *la serie de Dyson*,

$$U_I^{(n)}(t, t_i) \approx I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t V_I(t') dt' + \dots + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_i}^t V_I(t_1) dt_1 \times \int_{t_i}^{t_1} V_I(t_2) dt_2 \times \dots \times \int_{t_i}^{t_{n-1}} V_I(t_n) dt_n \quad (747)$$

34 Probabilidad de Transición

Supongamos un chorro de partículas incidentes las cuales son dispersadas por un blanco.

La interacción se produce de forma adiabática, es decir, para $t \rightarrow \pm\infty$ la partícula se considera como libre la cual obedece un Hamiltoniano H_0 con solución. Para un tiempo $t_i \rightarrow -\infty$ y $t_f \rightarrow \infty$ la partícula satisface

$$H_0 \psi_i = E_i \psi_i \quad H_0 \psi_f = E_f \psi_f \quad (748)$$

Calculamos la probabilidad de dispersión para ir del estado ψ_i al estado ψ_f experimentando un potencial $V(t)$ adiabático y perturbativo. Sea:

$$\begin{aligned} P_{if}(t_f) &= |\langle \psi_f | \psi_i \rangle|^2 \\ &= |\langle \psi_f | U_I(t_f, t_i) | \psi_i \rangle|^2 \\ &= \left| \langle \psi_f | e^{i \frac{H_0 t_f}{\hbar}} U(t_f, t_i) e^{-i \frac{H_0 t_i}{\hbar}} | \psi_i \rangle \right|^2 \\ &= |\langle \psi_f(t_f) | U(t_f, t_i) | \psi_i(t_i) \rangle|^2 \\ &= |\langle \psi_f(t_f) | \psi_i(t_f) \rangle|^2 \end{aligned} \quad (749)$$

donde ψ_i, ψ_f son los estados estacionarios de H_0 en $t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow \infty$. $\psi_i(t_i) \psi_f(t_f)$ son las soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo $\psi_i(t_f)$ es la función inicial evolucionada al tiempo final t_f y se proponga a la partícula inicial $\psi_i(t_i)$ al tiempo final t_f mediante el operador de evolución $U(t_f, t_i)$ y se calcula la probabilidad

$$|\langle \psi_f(t_f) | \psi_i(t_f) \rangle|^2 \quad (750)$$

si el potencial de dispersión es cero entonces

$$U(t_f, t_i) = I \quad V(t) = 0 \quad (751)$$

y en este caso $\psi_i(t_f) = \psi_i(t_i) = \psi_f(t_f)$ y la probabilidad de dispersión es cero, i.e.,

$$P_{fi}(t_f) = 1 \quad (752)$$

la cual corresponde a propagación de partícula libre.

Para un potencial perturbado podemos usar la serie de *Dyson* para $U(t_f, t_i)_I$ y calculamos la probabilidad perturbativa de la forma:

$$P_{if}(t_f) \approx \left| \langle \psi_f | I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} V_I(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_i}^{t_f} V_I(t') dt' \times \int_{t_i}^{t'} V_I(t'') dt'' + \dots | \psi_i \rangle \right|^2 \quad (753)$$

usando la definición de V_I en el cuadro de interacción:

$$\begin{aligned} P_{if}(t_f) &= \left| \langle \psi_f | I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} e^{i\frac{H_0 t'}{\hbar}} V(t') e^{-i\frac{H_0 t'}{\hbar}} dt' + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \times \int_{t_i}^{t_f} e^{i\frac{H_0 t_1}{\hbar}} V(t_1) e^{-i\frac{H_0 t_1}{\hbar}} dt_1 \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \right. \\ &\quad \times \int_{t_i}^{t_1} e^{i\frac{H_0 t_2}{\hbar}} V(t_2) e^{-i\frac{H_0 t_2}{\hbar}} dt_2 + \dots | \psi_i \rangle \left. \right|^2 \\ &= \left| \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} e^{i\frac{(E_f - E_i)t'}{\hbar}} \langle \psi_f | U(t') | \psi_i \rangle dt' + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_n \int_{t_i}^{t_f} e^{+i\frac{(E_f - E_n)t_1}{\hbar}} \langle \psi_f | V(t_1) | \psi_n \rangle dt_1 \right. \\ &\quad \times \int e^{i\frac{(E_n - E_i)t_2}{\hbar}} \langle \psi_n | V(t_2) | \psi_i \rangle dt_2 + \dots \left. \right|^2 \end{aligned} \quad (754)$$

35 Rata de Transmisión (Transmission rate)

Como ejemplo, consideremos dos casos, potencial constante y un potencial armónico o periódico en el tiempo. Para potencial constante y suponiendo que los estados iniciales y finales son diferentes; la probabilidad de transmisión a primer orden en teoría de perturbaciones

$$\begin{aligned}
 P_{if}(t) &\approx \frac{1}{2} \left| \int_0^t e^{i \frac{(E_f - E_i)t'}{\hbar}} dt' \right|^2 \\
 &\approx \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_i | V(\vec{r}) | \psi_f \rangle|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{\omega_{fi}} \right|^2 \\
 &\approx \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_i | V(\vec{r}) | \psi_f \rangle|^2 \left(\frac{\sin \frac{\omega_{fi}}{2} t}{\frac{\omega_{fi}}{2}} \right)^2
 \end{aligned} \tag{755}$$

donde $\omega_{fi}\hbar = E_f - E_i$. Usando la representación de la función delta de Dirac

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 yt}{\pi y^2 t} = \delta(y) \tag{756}$$

la probabilidad se puede escribir en la forma:

$$P_{if}(t) = |\langle \psi_f | V(\vec{r}) | \psi_i \rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} t \delta(E_f - E_i) \tag{757}$$

y dividiendo por el tiempo t ;

$$\Gamma_{if} \equiv \frac{P_{if}(t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | V(\vec{r}) | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \tag{758}$$

donde Γ se define como la rata de transmisión y es la probabilidad de transmisión por unidad de tiempo. Para una dispersión elástica, la energía se conserva, i.e., $E_f = E_i$ lo cual se expresa mediante la función delta. Si la colisión es inelástica, $E_f \neq E_i$, el sistema absorbe partículas incidentes y el potencial se escribe en la forma:

$$V(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) e^{-i \frac{\delta t}{\hbar}} \tag{759}$$

en este caso la rata de transmisión es similar pero cambiando la expresión para la energía en la delta de Dirac

$$E_f = E_i + \delta \quad (760)$$

lo cual indica que no es una colisión elástica. Suponiendo un detector que recibe partículas con energía en el rango

$$dE_f, \quad E_f + dE_f \quad (761)$$

Si las partículas que llegan al detector tienen un espectro de energía determinado por $\rho(E_f)$, entonces las que llegan en este rango de energía son

$$\rho(E_f)dE_f \quad (762)$$

Por tanto, la rata de dispersión total de partículas que llegan al detector son

$$\begin{aligned} d\omega_{fi} &= \Gamma_{if} \rho(E_f) dE_f \\ \omega_{fi} &= \int_{E_f} d\omega_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | V(\vec{r}) | \psi_i \rangle|^2 \rho(E_i) \end{aligned} \quad (763)$$

Dicha expresión se conoce como regla de oro de Fermi. Para un potencial que varía armónicamente en el tiempo, este se escribe en la forma:

$$V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})e^{i\omega t} + V(\vec{r})e^{-i\omega t} \quad (764)$$

En particular, para ondas electromagnéticas, el potencial vectorial es de la forma:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \approx e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (765)$$

Al aplicar el operador de *D'Almabert* ($\square A(\vec{r}, t) = 0$) en el vacío, se debe cumplir la condición $|\vec{k}|_c = \omega$, la cual se conoce como relación de dispersión. Para este caso la probabilidad

de transmisión está dada por:

$$P_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle \int_0^t e^{i \frac{(E_f - E_i + \hbar\omega)t'}{\hbar}} dt' + \langle \psi_f | V(\vec{r}) | \psi_i \rangle \int_0^t e^{i \frac{(E_f - E_i - \hbar\omega)t'}{\hbar}} dt' \right|^2 \quad (766)$$

donde, al elevar al cuadrado, tenemos términos ??? los cuales oscilan con frecuencia $\omega_{fi} + \omega$ y $\omega_{fi} - \omega$, $\omega_{fi}\hbar = E_f - E_i$, los cuales en promedio son nulos. Por tanto,

$$P_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_f | V(\vec{r}) | \psi_i \rangle|^2 \left| \frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} \right|^2 + \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_f | V(\vec{r}) | \psi_i \rangle|^2 \left| \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (767)$$

En el límite $t \rightarrow \infty$, se hace un análisis similar para P_{fi} con potencial constante cambiando $E_f - E_i \pm \hbar\omega$. Por tanto la rata de transmisión es:

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | V(\vec{r}) | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) + \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | V(\vec{r}) | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (768)$$

la cual indica que para tener una rata de transmisión diferente de cero se satisface

$$E_f - E_i \pm \hbar\omega = 0 \quad (769)$$

Para el caso

$$E_f = E_i + \hbar\omega \quad (770)$$

$$E_f > E_i$$

correspondería a un salto cuántico de energía E_i a un estado final de mayor energía E_f con absorción de fotón.

Para el caso

$$E_f + \hbar\omega = E_i \quad (771)$$

$$E_f < E_i$$

En este caso el sistema decae en una energía inicial E_i a una energía final menor E_f con la emisión de un fotón. Gráficamente se puede representar como

Ilustracion Pagina 166

Ejemplo: Consideremos un pozo de potencial cuadrático con $x \in (0, a)$. En $x = 0, a$ el potencial es infinito y la función de onda se anula. En $t = 0$, la partícula está en el estado base y queremos calcular la probabilidad de transmisión al primer estado excitado cuando aplicamos un potencial de la forma:

$$V(t) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (772)$$

Las autoenergías y autofunciones están dadas por H_0 , i.e., el potencial infinito en $x = 0, a$

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right). \quad (773)$$

La probabilidad de transmisión debido al potencial externo es:

$$\begin{aligned} P_{12} &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty \langle \phi_2 | V(x, t) | \phi_1 \rangle e^{i \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} dt \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{2}{a} \right)^2 \left(\frac{m\omega^2}{2} \right)^2 \left| \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \right|^2 \times \left| \int_0^t e^{i\omega_{21}t - \frac{t}{\tau}} dt \right|^2 \\ &= \frac{m^2 \omega^4}{4\hbar^2} \left(\frac{16a^2}{9\pi^2} \right)^2 \frac{1 - e^{-\frac{2t}{\tau}} - 2e^{-\frac{t}{\tau}} \cos(\omega_{21}t)}{\omega_{21}^2 + \frac{1}{\tau^2}} \end{aligned} \quad (774)$$

Para $t/\tau \gg 1$, donde τ es el tiempo de relajación del potencial; la probabilidad de transmisión está dada por:

$$P_{12} \approx \left(\frac{16m^2 \omega^2 a^4}{27\pi^4 \hbar^2} \right)^2 \quad (775)$$

donde usamos para la frecuencia de transmisión ω_{12} la expresión:

$$\omega_{12} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3\pi^2 \hbar}{2ma^2} \quad (776)$$

Podríamos considerar un problema similar, donde la perturbación es un campo eléctrico constante, i.e.,

$$V(x, t) = qExe^{-\frac{t}{\tau}} \quad (777)$$

La solución es similar al anterior, cambiando $qE \longleftrightarrow \frac{1}{2}m\omega^2$.

y la integral en x se cambia $x^2 \longrightarrow x$. Por tanto, para $t \longrightarrow \infty$ y τ muy grande

$$P_{12} \longrightarrow \left(\frac{32a^2mqE}{24\pi^4\hbar^2} \right)^2. \quad (778)$$

Ejercicio: Cuadro de Schrödinger y Heisenberg. Una partícula es un pozo de potencial infinito $x \in (0, a)$, en el estado, para $t = 0$,

$$\psi(x, 0) = \frac{\phi_1(x) + \phi_3(x)}{\sqrt{2}} \quad (779)$$

donde las funciones de onda corresponden a las de un potencial infinito en $x = 0, a$

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (780)$$

En el cuadro de Schrödinger, la función de onda $\psi(x, t)$, para un tiempo arbitrario, se escribe:

$$\psi_S(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1(x)e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \phi_3(x)e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}} \right). \quad (781)$$

En el cuadro de Heisenberg dicha función de onda se puede tomar para $t = 0$, i.e.,

$$\psi_H(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x) + \phi_3(x)) \quad (782)$$

calcular los valores esperados de la posición y momento en dicho estado

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle_S &= \langle x \rangle_H ; \langle p \rangle_S = \langle p \rangle_H \\
 \langle x \rangle_S &= \int_0^a \psi_S^*(x, t) x \psi_S(x, t) dx = \frac{a}{2} \\
 \langle x^2 \rangle_S &= \frac{a^2}{72\pi^2} \left(-20 + 24\pi^2 + 27 \cos \left(\frac{4\pi^2 \hbar}{a^2 m} t \right) \right) \\
 &= 0.343 a^2 \quad \langle \cos(t) \rangle = 0
 \end{aligned} \tag{783}$$

donde suponemos que el promedio temporal de $\cos \left(\frac{4\pi^2 \hbar}{a^2 m} t \right)$ es cero.

Ilustracion Pagina 169

Para el momento el valor promedio está dado por:

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle_S &= \int_0^a \psi_S^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_S(x, t) dx \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{784}$$

y para el momento al cuadrado tenemos

$$\langle p^2 \rangle_S = 5 \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 . \tag{785}$$

Calcular el valor esperado:

$$\langle x_H(t) \hat{p} \rangle_3 . \tag{786}$$

Entonces, por definición tenemos:

$$x_H(t) = e^{i\frac{Ht}{\hbar}} \hat{x} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} , \tag{787}$$

y reemplazando:

$$\begin{aligned}
\langle x_H(t) \hat{p} \rangle_3 &= \langle \phi_3(x) | x_H(t) \hat{p} | \phi_3(x) \rangle \\
&= \int_0^a \phi_3^*(x) e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}} x e^{i\frac{E_3 t}{\hbar}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi_3(x) dx \\
&= -i\hbar \left(\frac{2}{a} \right) \left(\frac{3\pi}{a} \right) \int_0^a \sin \left(\frac{3\pi x}{a} \right) \cos \left(\frac{3\pi x}{a} \right) dx \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{788}$$

Ej. Considere el oscilador armónico cuántico: Calcular el valor esperado:

$$\begin{aligned}
\langle n | p_H(t) \hat{p} | n \rangle &= \langle n | e^{i\frac{Ht}{\hbar}} \hat{p} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \hat{p} | n \rangle \\
&= e^{i\frac{E_n t}{\hbar}} \langle n | \hat{p} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \hat{p} | n \rangle
\end{aligned} \tag{789}$$

donde usando el formalismo de los operadores escalera:

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^\dagger - a) \tag{790}$$

al actuar sobre un estado $|n\rangle$, tenemos:

$$\begin{aligned}
\hat{p}|n\rangle &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})|n\rangle \\
&= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\{\sqrt{n+1}|n+1\rangle - \sqrt{n}|n-1\rangle\}
\end{aligned} \tag{791}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned}
\langle n | \hat{p}_H(t) \hat{p} | n \rangle &= e^{i\frac{E_n t}{\hbar}} \frac{m\omega\hbar}{2} \{(\sqrt{n+1}\langle n+1| - \sqrt{n}\langle n-1|)e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}(\sqrt{n+1}|n+1\rangle - \sqrt{n}|n-1\rangle)\} \\
&= e^{i\frac{E_n t}{\hbar}} \frac{m\omega\hbar}{2} \{(n+1)e^{-i\frac{E_{n+1}t}{\hbar}} + ne^{-i\frac{E_{n-1}t}{\hbar}}\} \\
&= \frac{m\omega\hbar}{2} \{(n+1)e^{-i\omega t} - ne^{i\omega t}\}
\end{aligned} \tag{792}$$

36 Interacción Radiación Materia

Para estudiar la interacción radiación-materia consideramos una aproximación muy sencilla, suponemos que los átomos de la materia son hidrogenoides y la radiación corresponde a campo libre en el vacío. La materia se representa por función de onda del átomo de Hidrógeno, i.e.,

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V_0(r) \quad (793)$$

y para la radiación el potencial vectorial es solución de la ecuación

$$\square \vec{A}(\vec{r}, t) = 0. \quad (794)$$

El término de interacción radiación-materia se define por el acoplamiento mínimo, i.e.,

$$\vec{p} \longrightarrow \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t). \quad (795)$$

Por tanto, nuestro Hamiltoniano está dado por:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}, t)\right)^2}{2m} + V_0(r) \\ &\approx H_0 + \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \vec{p} + \mathcal{O}(\vec{A} \cdot \vec{A}) \end{aligned} \quad (796)$$

donde no se consideró el Hamiltoniano de la radiación libre. Además, se consideró

el gauge de Coulomb, i.e.,

$$\nabla \cdot \vec{A} = 0 \quad (797)$$

el cual fue necesario para calcular la expresión de Hamiltoniano

$$\begin{aligned} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p})\psi &= \vec{p} \cdot (\vec{A}\psi) + \vec{A} \cdot \vec{p}\psi \\ &= (\vec{p} \cdot \vec{A})\psi + \vec{A} \cdot \vec{p}\psi + \vec{A} \cdot \vec{p}\psi \\ &= 2\vec{A} \cdot \vec{p}\psi \end{aligned} \quad (798)$$

donde m y $(-e)$ es la masa y carga del electrón.

Por tanto, el Hamiltoniano se escribe en la forma:

$$H \approx H_0 + V(t) \quad (799)$$

donde

$$V(t) \approx \frac{e}{mc} \vec{A}(r, t) \cdot \vec{p}. \quad (800)$$

La radiación se puede tratar de dos formas. Como una teoría clásica, en este caso $\vec{A}(r, t)$ es un campo vectorial real el cual es solución de la ecuación de onda, D'Alambert,

$$\square \vec{A}(\vec{r}, t) = 0. \quad (801)$$

Como campo cuántico y en este caso se debe construir una teoría cuántica para la radiación, i.e., $\hat{A}(\vec{r}, t)$ es un operador cuántico, el cual obedece reglas de conmutación de la forma:

$$\left[\hat{A}_i(\vec{r}, t), \hat{\pi}_{A_j}(\vec{r}', t) \right] = \delta_{ij} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (802)$$

En este formalismo se introducen operadores escalera \hat{a}, \hat{a}^\dagger los cuales aniquilan y crean fotones. Además, se debe proponer el espacio de *Fock* ó espacio número de fotones $|n\rangle$.

La teoría clásica de la radiación predice que la radiación espontánea de fotones por parte de la materia no existe porque en el estado inicial no hay radiación, i.e. $\vec{A}(\vec{r}, t)$, y por tanto el potencial de interacción es nulo, i.e.,

$$\frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p} = 0. \quad (803)$$

En cambio en el tratamiento cuántico de la radiación existe emisión espontánea de radiación, a pesar de que el estado inicial tiene cero fotones. Para dicho tratamiento, como

veremos más adelante, es necesario calcular la transición

$$\langle 1 | \vec{A} \cdot \vec{p} | 0 \rangle \approx \vec{p} \cdot \vec{\epsilon} \langle 1 | \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \neq 0 \quad (804)$$

donde vemos que el estado vacío $|0\rangle$ de cero fotones permite la creación de fotones $\hat{a}^\dagger |0\rangle$ y, por tanto, el estado final de un fotón $|1\rangle$, muestra que este elemento de matriz es no-nulo.

37 Teoría Clásica de la Radiación

Resolvamos la ecuación de onda e impongamos la condición del gauge de Coulomb, i.e.,

$$\begin{aligned} \square \vec{A}(\vec{r}, t) &= \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \\ \nabla \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) &= 0 \end{aligned} \quad (805)$$

las cuales se expresan en la forma:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega} \sum_{\lambda=1,2} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \{ \vec{A}(\vec{k}, \lambda) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + \vec{A}(\vec{k}, \lambda)^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \} \quad (806)$$

con la condición

$$\left| \vec{k} \right|_c = \omega \quad y \quad \vec{k} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) = 0. \quad (807)$$

Explicuemos la solución de la ecuación de onda. El operador *D'Alambertiano* sugiere la solución de la forma

$$e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (808)$$

y para tener una solución real se hace la combinación lineal con $\vec{A}(\vec{k}, \lambda)$ y $\vec{A}(\vec{k}, \lambda)^*$. Como la solución es válida para cualquier \vec{k} , se suma sobre todos los \vec{k} i.e. $\int d^3k$.

En el lado izquierdo se tiene un vector $\vec{A}(\vec{r}, t)$, entonces para tener una ecuación covariante se escribe un vector cualquiera en el lado derecho $\vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda)$.

Al aplicar el operador \square al vector $\vec{A}(\vec{r}, t)$, este pasa a través de $\int dk$ y la \sum_λ actuando sobre las exponenciales, de la forma

$$\begin{aligned} \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} &= \{ (\pm i\vec{k}) \cdot (\pm i\vec{k}) - \frac{1}{c^2} (\pm i\omega)^2 \} e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ &= - \left(\vec{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \right) e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \end{aligned} \quad (809)$$

Para que se satisfaga la condición $\square \vec{A}(\vec{r}, t) = 0$ entonces

$$k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0 \quad i.e. \quad \left| \vec{k} \right| c = \omega. \quad (810)$$

Veamos la condición del gauge, i.e. $\nabla \cdot \vec{A} = 0$. Se aplica el operador $\nabla \cdot$ este entra a través de la integral y actúa sobre

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \{ \vec{\epsilon}(k, \lambda) e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \} &= \vec{\epsilon}(k, \lambda) \cdot \nabla (e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}) \\ &= \pm i \vec{\epsilon}(k, \lambda) \cdot \vec{k} e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \end{aligned} \quad (811)$$

Para que se cumpla que $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, entonces

$$\vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{k} = 0 \quad (812)$$

Qué Significa λ ?

Ilustracion Pagina 175

$\vec{\epsilon}(k, \lambda)$ es un vector que vive en el plano perpendicular a \vec{k} , la dimensión de propagación de la onda. Este plano necesitaba una base la cual se escoge ortogonal i.e.

$$\vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda') = \delta_{\lambda, \lambda'} \quad (813)$$

es decir $\vec{\epsilon}(k, \lambda)$ se llama vector de polarización e indica el plano perpendicular a la dirección de propagación de la onda donde viven los campos electromagnéticos.

Los campos $\vec{E}(\vec{r}, t)$ y $\vec{B}(\vec{r}, t)$ en este gauge se definen como:

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}, t) \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t)\end{aligned}\tag{814}$$

Veamos qué hacen los operadores $-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$, $\nabla \times$, cuando actúan sobre $\vec{A}(\vec{r}, t)$. Estos operadores son lineales y pasan a través de $\int d^3k$ y \sum para actuar de la forma:

$$\begin{aligned}-\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} &= \mp \frac{1}{c} (-i\omega) e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ &= \pm i \frac{\omega}{c} e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}\end{aligned}\tag{815}$$

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{\epsilon}(k, \lambda) e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} &= -\vec{\epsilon}(k, \lambda) \times \nabla e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ &= \pm i \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \times \vec{k} (-1) e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ &= \pm i k \hat{k} \times \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) e^{\pm i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}\end{aligned}\tag{816}$$

Por tanto:

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega} \sum_{1,2} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \frac{\omega}{c} \{A(k, \lambda) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} - A(k, \lambda)^* e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}\} \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega} \sum_{1,2} \hat{k} \times \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) k \{A(k, \lambda) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} - A(k, \lambda)^* e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}\}\end{aligned}\tag{817}$$

La energía de radiación y el vector de *Poynting* se definen como:

$$\begin{aligned}H_{rad} &= \frac{1}{p_\pi} \int d^3r \{ \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) \} \\ \vec{S} &= \vec{E}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t)\end{aligned}\tag{818}$$

38 Teoría Clásica de la Radiación

Consideremos una onda plana, i.e. un campo con un valor de k, λ definidos, no un paquete de onda,

$$\begin{aligned}\vec{A}(\vec{r}, t) &= \vec{\epsilon}(k, \lambda) \{ A(k, \lambda) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + A(k, \lambda) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \} \\ &= A_0 \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\end{aligned}\tag{819}$$

Los campos están dados por:

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{\omega}{c} A_0 \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= +\vec{k} \times \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) A_0 \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \\ &= +\hat{k} \times \vec{E}(\vec{k}, \lambda)\end{aligned}\tag{820}$$

Para una onda plana, los campos \vec{E} y \vec{B} son ortogonales entre si y también a la dirección de propagación de la onda. Por otra parte, el vector de *Poynting* es en dirección de propagación de la onda.

Para una onda plana tenemos

$$\left| \vec{E}(\vec{r}, t) \right| = \left| \vec{B}(\vec{r}, t) \right| \tag{821}$$

y

$$\begin{aligned}\vec{S} &= \vec{E}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t) \\ &= \vec{E}(\vec{r}, t) \times (+\hat{k} \times \vec{B}(\vec{r}, t)) \\ &= \left| \vec{E}(\vec{r}, t) \right|^2 \hat{k}\end{aligned}\tag{822}$$

lo cual significa que el flujo de energía del campo electromagnético es en la dirección de propagación de la onda, \vec{k} .

Para escoger la intensidad de la onda, i.e. A_0 definamos que la onda electromagnética tiene un fotón el cual tiene una energía por unidad de volumen igual a $\hbar\omega$. Por ser un campo oscilatorio supongamos que esta energía equivale a un promedio sobre un periodo de oscilación, i.e.,

$$\begin{aligned}
 \bar{u} &= \frac{1}{T} \int_0^T u dt \\
 &= \frac{1}{T} \int_0^T \frac{1}{8\pi} (|\vec{E}(\vec{r}, t)|^2 + |\vec{B}(\vec{r}, t)|^2) dt \\
 &= \frac{1}{T} \int_0^T \frac{1}{4\pi} |\vec{E}(\vec{r}, t)|^2 dt \\
 &= \frac{1}{T} \int_0^T \frac{1}{4\pi} \frac{\omega^2}{c^2} A_0^2 4 \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) dt \\
 &= \frac{\omega^2}{2\pi c^2} |\vec{A}_0|^2 = \hbar\omega
 \end{aligned} \tag{823}$$

Por tanto, el potencial vectorial lo podemos escribir en la forma

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \left[e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right]. \tag{824}$$

Suponiendo que el electrón realiza un salto cuántico del estado ψ_i al estado ψ_f cuando recibe la radiación, tratada clásicamente, el Hamiltoniano de interacción se puede escribir en la forma:

$$\begin{aligned}
 V(t) &= \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{k}, t) \cdot \vec{p} \\
 &= V(\vec{r}) e^{i\omega t} + V^\dagger(\vec{r}) e^{-i\omega t}
 \end{aligned} \tag{825}$$

donde se define

$$V(\vec{r}) = \frac{e}{mc} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega} \right)^{1/2} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{p} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \tag{826}$$

y las ratas de emisión y absorción de fotones están dadas por:

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{i \rightarrow f}^{emission} &= \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega} \left| \langle \psi_f | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{p} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \\
 \Gamma_{i \rightarrow f}^{absorcion} &= \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega} \left| \langle \psi_f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \cdot \vec{p} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)
 \end{aligned} \tag{827}$$

Clásicamente si no hay campo i.e. $\vec{A}(\vec{k}, t) = 0$ entonces no hay rata de emisión porque $V(t) = 0$ y $\Gamma_{if}^{emission} = 0$. Es decir, clásicamente no se puede explicar la emisión espontánea de fotones. No hay nada que estimule el salto del electrón del estado excitado al estado de menos energía. Fenómeno que es de naturaleza puramente cuántica. Pero para poder explicar debemos introducir la teoría cuántica de la radiación.

39 Teoría Cuántica de la Radiación

En este caso necesitamos desarrollar la teoría cuántica de los campos electromagnéticos. Para ello suponemos que el potencial vectorial es un operador $\hat{\vec{A}}(\vec{r}, t)$ lo cual implica que los coeficientes de *Fourier* se deben tomar también como operadores cuánticos

$$\hat{A}(\vec{k}, \lambda), \hat{A}(\vec{k}, \lambda)^\dagger. \quad (828)$$

Para cuantizar la teoría hay que proponer reglas de conmutación para introducir \hbar . En este caso el corchete de *Poisson* clásico se cambia por la relación de incertidumbre i.e.

$$[A^i(\vec{r}, t), \pi_A^j(\vec{r}', t)] = i\hbar\delta^{ij}\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (829)$$

donde debemos definir el momento canónico asociado a $\vec{A}(\vec{r}, t)$. Usando la densidad lagrangiana para el campo electromagnético

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{8\pi} \left[|\vec{E}|^2 - |\vec{B}|^2 \right] \\ &= \frac{1}{8\pi} \left(\frac{1}{c^2} \left| \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right|^2 - |\nabla \times \vec{A}|^2 \right) \end{aligned} \quad (830)$$

y derivando respecto a $\frac{\partial A(r,t)}{\partial t}$ tenemos

$$\pi_A^i(\vec{r}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}^i(\vec{r}, t)} = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{c^2} \frac{\partial A^i(\vec{r}, t)^\dagger}{\partial t}. \quad (831)$$

Reemplazando en la relación de conmutación la expansión de *Fourier* de los operadores cuánticos \vec{A} y $\vec{\pi}_A$, tenemos:

$$\begin{aligned}\hat{A}^i(\vec{r}, t) &= \sum_k \sum_\lambda \epsilon_{k\lambda}^i \left[\hat{A}_{k\lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + \hat{A}_{k\lambda}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right] \\ \hat{\pi}_A^j(\vec{r}', t) &= \frac{1}{4\pi c^2} \sum_{k'} \sum_{\lambda'} i\omega' \epsilon_{k'\lambda'}^j \left[\hat{A}_{k'\lambda'}^\dagger e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r}' - \omega' t)} - \hat{A}_{k'\lambda'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r}' - \omega' t)} \right]\end{aligned}\quad (832)$$

Por tanto:

$$\begin{aligned}\left[\hat{A}^i(\vec{r}, t), \hat{\pi}_A^j(\vec{r}', t) \right] &= \sum_{k, k'} \sum_{\lambda, \lambda'} \frac{i\omega'}{4\pi c^2} \epsilon_{k\lambda}^i \epsilon_{k'\lambda'}^j \left\{ \left[\hat{A}_{k\lambda}, \hat{A}_{k'\lambda'}^\dagger \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} e^{-i\omega t} e^{i\omega' t} \right. \\ &\quad - \left[\hat{A}_{k\lambda}, \hat{A}_{k'\lambda'} \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t} + \left[\hat{A}_{k\lambda}^\dagger, \hat{A}_{k'\lambda'}^\dagger \right] e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} e^{i\omega t} e^{i\omega' t} \\ &\quad \left. - \left[\hat{A}_{k\lambda}^\dagger, \hat{A}_{k'\lambda'} \right] e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} e^{i\omega t} e^{-i\omega' t} \right\}\end{aligned}\quad (833)$$

Supongamos que los operadores \hat{A} y \hat{A}^\dagger satisfacen las reglas de conmutación:

$$\begin{aligned}\left[\hat{A}_{k\lambda}, \hat{A}_{k'\lambda'} \right] &= \frac{2\pi c^2}{\omega} \hbar \delta_{kk'} \delta_{\lambda\lambda'} \\ \left[\hat{A}_{k\lambda}, \hat{A}_{k'\lambda'}^\dagger \right] &= \left[\hat{A}_{k\lambda}^\dagger, \hat{A}_{k'\lambda'} \right] = 0\end{aligned}\quad (834)$$

Entonces, $k = k'$, $\omega = \omega'$:

$$\begin{aligned}\left[\hat{A}^i(\vec{r}, t), \hat{\pi}_A^j(\vec{r}', t) \right] &= \sum_{kk'} \sum_{\lambda\lambda'} \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{k'\lambda'}^j \epsilon_{k\lambda}^i \left\{ e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \delta_{kk'} \delta_{\lambda\lambda'} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \delta_{kk'} \delta_{\lambda\lambda'} \right\} \\ &= \frac{i\hbar}{2} \sum_k \sum_\lambda \epsilon_{k\lambda}^i \epsilon_{k\lambda}^j \left\{ e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \right\} \\ &= \frac{i\hbar}{2} \delta^{ij} \sum_k \left\{ e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \right\} \\ &= i\hbar \delta^{ij} \delta(\vec{r} - \vec{r}')\end{aligned}\quad (835)$$

Para construir la teoría cuántica de la radiación, construimos los observables en función de los operadores $\hat{A}(k\lambda)$, $\hat{A}(k\lambda)^\dagger$. Veamos el Hamiltoniano del sistema:

$$H = \hat{H}_0 + \hat{H}_{rad} + \hat{V}(t) \quad (836)$$

donde asumimos que la materia se representa por un átomo hidrogenoide. Por tanto:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \\ \hat{H}_{rad} &= \frac{1}{i\pi} \int d^3r \left(\left| \hat{\vec{E}}(r, t) \right|^2 + \right)\end{aligned}\tag{837}$$

Calculemos el operador \hat{H}_{rad} :

$$\begin{aligned}\hat{H}_{rad} &= \frac{1}{4\pi} \int d^3r \frac{1}{c^2} \frac{\partial \hat{\vec{A}}(\vec{r}, t)}{\partial t} \cdot \frac{\partial \hat{\vec{A}}(\vec{r}, t)}{\partial t} \\ &= \frac{1}{4\pi c^2} \int d^3r \sum_{k, k'} \sum_{\lambda, \lambda'} \omega_k \omega_{k'} \{ \hat{A}_{k\lambda}^\dagger \hat{A}_{k'\lambda'} \vec{\epsilon}_k^* \cdot \vec{\epsilon}_{k'} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega' t)} \\ &\quad + \hat{A}_{k\lambda} \hat{A}_{k'\lambda'}^\dagger \vec{\epsilon}_k \cdot \vec{\epsilon}_{k'}^* e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega' t)} \}\end{aligned}\tag{838}$$

donde los términos proporcionales a $\hat{A}_{k\lambda} \hat{A}_{k'\lambda'}$, $\hat{A}_{k\lambda}^\dagger \hat{A}_{k'\lambda'}^\dagger$ se cancelan.

usando la definición para la función delta de Kronecker

$$\int d^3\vec{r} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} = \delta_{kk'}\tag{839}$$

y la escogencia de base para los vectores de polarización

$$\vec{\epsilon}_{k\lambda}^* \cdot \vec{\epsilon}_{k\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}\tag{840}$$

el Hamiltoniano se reduce a

$$\hat{H}_{rad} = \frac{1}{4\pi c^2} \sum_{k\lambda} \omega_k^2 \{ \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_{k\lambda} + \hat{A}_{k\lambda} \hat{A}_k^\dagger \}\tag{841}$$

Redefiniendo los operadores $\hat{A}_{k\lambda}$ para usar una base de unidades donde éstas sean adimensionales

$$\hat{A}_{k\lambda} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{\omega_k}} a_{k\lambda}\tag{842}$$

el Hamiltoniano se reescribe en la forma:

$$\hat{H}_{rad} = \frac{1}{2} \sum_{k\lambda} \hbar \omega_k \{ \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k\lambda} + \hat{a}_{k\lambda} \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \}\tag{843}$$

y las reglas de conmutación se expresan como:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_{\vec{k}\lambda}, \hat{a}_{\vec{k}'\lambda'}^\dagger] &= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'}, \\ [\hat{a}_{\vec{k}\lambda}, \hat{a}_{\vec{k}'\lambda'}] &= [\hat{a}_{\vec{k}\lambda}^\dagger, \hat{a}_{\vec{k}'\lambda'}^\dagger] = 0 \end{aligned} \quad (844)$$

Un campo cuántico de radiación se puede interpretar como una colección infinita de osciladores armónicos con momentos \vec{k} y polarización λ . Definiendo el operador número de partículas, número de fotones, el Hamiltoniano se escribe en la forma:

$$\begin{aligned} \hat{N}_{k\lambda} &= \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k\lambda} \\ \hat{H}_{rad} &= \sum_{k\lambda} \hbar\omega_k \left(\hat{N}_{k\lambda} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (845)$$

si definimos los autoestados de $\hat{N}_{k\lambda}$ de la forma siguiente

$$\hat{N}_{k\lambda} |n_{k'\lambda'}\rangle = \hat{n}_{k'\lambda'} \delta_{kk'} \delta_{\lambda\lambda'} |n_{k'\lambda'}\rangle \quad (846)$$

entonces la energía de dicho estado es:

$$\begin{aligned} \langle n_{k'\lambda'} | \hat{H}_{rad} | n_{k'\lambda'} \rangle &= \left(n_{k'\lambda'} + \sum_{k'\lambda'} \frac{1}{2} \right) \hbar\omega'_k \\ &= \hbar\omega_{k'} n_{k'\lambda'} + \sum_{k'\lambda'} \frac{1}{2} \hbar\omega'_k. \end{aligned} \quad (847)$$

La energía de un estado de n fotones tiene n cuantos de energía $\hbar\omega_k$, pero todos los estados tienen una energía infinita al sumar sobre todos los números de onda de los osciladores cuánticos. Esta es un problema que aparece en todas las teorías cuánticas de campo, Para el estado base de la teoría, i.e., el estado de cero fotones,

$$\langle 0 | \hat{H}_{rad} | 0 \rangle = \sum_k \frac{1}{2} \hbar\omega_k \quad (848)$$

también tiene una energía infinita. Vamos a definir el Hamiltoniano ordenado normalmente de la forma:

$$: \hat{H} := \sum_{k\lambda} \hbar\omega_k \hat{N}_{k\lambda} \quad (849)$$

el cual consiste en

$$: \hat{a}_{k\lambda} \hat{a}_{k\lambda}^\dagger := \hat{a}_{k\lambda}^\dagger \hat{a}_{k\lambda} \quad (850)$$

y de esta forma quitaremos el infinito de todas las energías de los estados cuánticos.

Usando las mismas propiedades de los operadores escalera obtenidas para el oscilador armónico cuántico, se pueden demostrar las relaciones

$$\begin{aligned} [\hat{N}_{k\lambda}, \hat{a}_{k\lambda}] &= -\hat{a}_{k\lambda}, \\ [\hat{N}_{k\lambda}, \hat{a}_{k\lambda}^\dagger] &= \hat{a}_{k\lambda}^\dagger, \end{aligned} \quad (851)$$

y de igual manera:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{k\lambda}^\dagger |n_{k\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{k\lambda} + 1} |n_{k\lambda} + 1\rangle, \\ \hat{a}_{k\lambda} |n_{k\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{k\lambda}} |n_{k\lambda} - 1\rangle. \end{aligned} \quad (852)$$

Ahora podemos escribir el Hamiltoniano de interacción Radiación-Materia en la forma de operadores cuánticos

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= \frac{e}{mc} \hat{\vec{A}}(r, t) \cdot \hat{\vec{p}} \\ &= \frac{e}{m} \sum_{k\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \{ \hat{a}_{k\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \hat{\vec{p}} e^{-i\omega_k t} + \hat{a}_{k\lambda}^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda}^* \cdot \hat{\vec{p}} e^{i\omega_k t} \}, \\ &= \sum_{k\lambda} (\hat{v}_{k\lambda} e^{-i\omega_k t} + \hat{v}_{k\lambda}^\dagger e^{i\omega_k t}) \end{aligned} \quad (853)$$

donde

$$\hat{v}_{k\lambda}^\dagger = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \hat{a}_{k\lambda}^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda}^* \cdot \hat{\vec{p}} \quad (854)$$

40 Rata de Emisión y Absorción de Fotones

El estado inicial del sistema contiene el estado cuántico de la materia y el estado cuántico de la radiación. Supongamos que el electrón se encuentra en un estado del átomo de

Hidrógeno y tenemos $n_{k\lambda}$ fotones i.e.

$$\langle \phi_i | = |\psi_i\rangle \otimes |n_{k\lambda}\rangle \quad (855)$$

Si el sistema emite un fotón ocurre un salto cuántico del electrón a un estado de menor energía $|\psi_f\rangle$ y por tanto el nuevo estado cuántico es:

$$|\phi_f\rangle = |\psi_f\rangle \otimes |n_{k\lambda} + 1\rangle. \quad (856)$$

La amplitud de transmisión se calcula de la forma

$$\begin{aligned} \langle \phi_f | \hat{v}^\dagger | \phi_i \rangle &= \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \langle \psi_f | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda}^* \cdot \vec{p} | \psi_i \rangle \times \langle n_{k\lambda} + 1 | a_{k\lambda}^\dagger | n_{k\lambda} \rangle \\ &= \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \sqrt{n_{k\lambda} + 1} \langle \psi_f | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda}^* \cdot \vec{p} | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (857)$$

si en el estado inicial tuviéramos cero fotones entonces $n_{k\lambda} = 0$, $|\phi_i\rangle = |\psi_i\rangle \otimes |0\rangle$, quiere decir que no hay radiación, sin embargo la probabilidad de emisión espontánea de un fotón es diferente de cero. El estado final es $|\phi_f\rangle = |\psi_f\rangle \otimes |1\rangle$ y la probabilidad de transición con emisión espontánea de un fotón es:

$$\frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \langle \psi_f | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \vec{p} | \psi_i \rangle \neq 0. \quad (858)$$

La rata de emisión de un fotón se escribe en la forma:

$$\Gamma_{if}^{emision} = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega_k} (n_{k\lambda} + 1) \left| \langle \psi_f | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \vec{p} | \psi_i \rangle \right|^2 \times \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad (859)$$

No siempre habría la emisión de un fotón del estado ψ_f al estado ψ_i , depende del elemento de matriz

$$\langle \psi_f | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{p} | \psi_i \rangle \quad (860)$$

el cual podría ser cero, prohibiendo transiciones en la materia y dependerá de las reglas de selección de los estados de la materia ψ_i y ψ_f .

Si el sistema absorbe un fotón del medio ambiente, entonces el estado final será

$$|\phi_f\rangle = |\psi_f\rangle \otimes |n_{k\lambda} - 1\rangle \quad (861)$$

y la amplitud de transición es

$$\begin{aligned} \langle \phi_f | \hat{v} | \phi_i \rangle &= \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \langle \psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \vec{p} | \psi_i \rangle \times \langle n_{k\lambda} - 1 | \hat{a}_{k\lambda} | n_{k\lambda} \rangle \\ &= \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \sqrt{n_{k\lambda}} \langle \psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \vec{p} | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (862)$$

si en el estado inicial tenemos cero fotones $n_k = 0$, entonces no puede ocurrir la transición de un estado de menor energía a otro de mayor energía, la transición es cero

$$\langle \phi_f | \hat{v}_{n_{k\lambda}=0} | \phi_i \rangle = 0 \quad (863)$$

La rata de absorción de un fotón se escribe en la forma:

$$\Gamma_{if}^{abs} = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega_k} (n_{k\lambda}) \left| \langle \psi_f | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \vec{p} | \psi_i \rangle \right|^2 \times \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (864)$$

En el límite $n_{k\lambda} \gg 1$ la rata de emisión y absorción son iguales y coinciden con el caso clásico.

41 Aproximación Dipolar

Para calcular el elemento de matriz de la amplitud de probabilidad de la transición usemos la aproximación

$$|\vec{k} \cdot \vec{r}| \ll 1 \longrightarrow |\vec{r}| \ll \lambda \quad (865)$$

permitiendo hacer una expansión en serie del exponencial $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Consideremos a $|\vec{r}|$ como la distancia típica de los núcleos de la materia, en este caso sería el radio de *Bohr* a_0 y λ

la longitud de onda del visible

$$kr \approx \frac{2\pi}{\lambda} a_0 \approx 2\pi \frac{10^{-10} \text{ m}}{10^{-6} \text{ m}} \approx 10^{-3} \quad (866)$$

A primer orden el elemento de matriz se escribe como

$$\langle \psi_f | \vec{p} e^{\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}} | \psi_i \rangle \approx \langle \psi_f | \vec{p} | \psi_i \rangle \quad (867)$$

y se conoce como la aproximación o transición dipolar. Usando la identidad

$$[\vec{r}, H_0] = \frac{i\hbar}{m} \vec{p} \quad (868)$$

tenemos

$$\begin{aligned} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \langle \psi_f | \vec{p} | \psi_i \rangle &= \frac{m}{i\hbar} \langle \psi_f | [\vec{r}, H_0] | \psi_i \rangle \\ &= \frac{m}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle \psi_f | \vec{r} | \psi_i \rangle \\ &= im\omega_{fi} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \int \psi_f(r)^* \vec{r} \psi_i(r) d^3r \end{aligned} \quad (869)$$

la cual corresponde al dipolo eléctrico asociado a los estados inicial y final de la transición.

Para calcular la integral escribamos el dipolo eléctrico usando la base esférica

$$\begin{aligned} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \vec{r} &= r(\epsilon_x \sin(\theta) \cos(\phi) + \epsilon_y \sin(\theta) \sin(\phi) + \epsilon_z \cos(\theta)) \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r (-\epsilon_+ Y_{11}(\theta, \phi) + \epsilon_- Y_{1-1}(\theta, \phi) + \epsilon_z Y_{10}(\theta, \phi)) \end{aligned} \quad (870)$$

donde se definieron los vectores de polarización

$$\epsilon_{\pm} = \frac{\epsilon_x \mp i\epsilon_y}{\sqrt{2}} \quad (871)$$

los cuales corresponde a ondas polarizadas circularmente. Por tanto:

$$\begin{aligned} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \langle \psi_f | \vec{p} | \psi_i \rangle &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} im\omega_{fi} \int_0^\infty r R_{n_f l_f}(r) R_{n_i l_i}(r) r^2 dr \times \\ &\quad \int Y_{l_f m_f}^*(\theta, \phi) (-\epsilon_+ Y_{11}(\theta, \phi) + \epsilon_- Y_{1-1}(\theta, \phi) + \epsilon_z Y_{10}(\theta, \phi)) Y_{l_i m_i}(\theta, \phi) d\Omega \end{aligned} \quad (872)$$

Veamos que condición se requiere para que este elemento de matriz sea diferente de cero.

En general escribamos la parte de la integral angular en la forma:

$$\int Y_{l_f m_f}^*(\theta, \phi) Y_{1m}(\theta', \phi') Y_{l_i m_i}(\theta, \phi) d\Omega = \langle l_f m_f | \sum_{J=l_i-1}^{l_i+1} \sum_M |l_i 1, JM\rangle \langle l_i 1, JM | l_i 1, m_i m \rangle \quad (873)$$

donde pasamos de la base $|lm\rangle \otimes |l_i m_i\rangle = |m_i m\rangle$ a la base nueva de momento angular total JM

Para que sea diferente de cero se requiere que los coeficientes de *Clebsh-Gordan* satisfagan:

La transición dipolar solo ocurre entre los estados que tenga una diferencia de momento angular igual a cero, por ejemplo,

$$s \longleftrightarrow p, p \longleftrightarrow d \quad (876)$$

Cuando la diferencia de los m , $m_f - m_i = \pm 1$, se produce una onda con polarización izquierda a derecha ϵ_{\pm} . Para $m_f = m_i$ la onda corresponde a la polarización ϵ_z .

Para valores de $|\Delta l| \geq 2$ la transición dipolar esta prohibida, sin embargo esta no es cero porque podemos tomar el segundo término de la expansión de la exponencial

$$e^{\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}} \approx 1 \pm i \vec{k} \cdot \vec{r} + \frac{(\pm 1)^2}{2!} (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + \dots \quad (877)$$

Para este orden el elemento de matriz se puede escribir en la forma:

$$\vec{k} \vec{\epsilon}_{k\lambda} : \langle \psi_f | \vec{r} \vec{p} | \psi_i \rangle \quad (878)$$

el cual esta suprimido respecto a la transición en un orden de $\vec{k} \cdot \vec{r} \approx 10^{-3}$. Este orden corresponde a la transición cuadrupolar, la cual se podría expresar en la forma:

$$\vec{k}\epsilon_{\lambda k} : \langle \psi_f | \vec{r}\vec{r} | \psi_i \rangle. \quad (879)$$

Teniendo en cuenta los ordenes superiores se generan ondas de radiación multipolar en las transiciones atómicas.

42 Emisión Espontánea y Espacio de Fase

Los niveles de energía del átomo no tienen un ancho definido y la energía no está completamente definida. Dicho ancho depende de las fluctuaciones del vacío, el baño térmico que genera perturbaciones y produce fluctuaciones en el potencial de Coulomb. Por tanto, en los decaimientos de la materia los fotones emitidos tendrán un ancho de energía $\Delta E = \hbar\Delta k$.

Imagen Lateral – Pagina 190

Por otra parte, por principio de incertidumbre los detectores reciben una paquete de fotones con incertidumbre en el momento según

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar \quad (880)$$

Los fotones que llegan al detector están en el rango

$$(\hbar\vec{k}, \hbar\vec{k} + \hbar d^3\vec{k}) \approx (\vec{p}, \vec{p} + d^3\vec{p}) \quad (881)$$

y en el espacio de fase correspondería al número de estados cuánticos

$$d^6n = \frac{d^3x d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (882)$$

donde se dividió por el menor volumen posible en mecánica cuántica en el espacio de fase i.e. \hbar^3 . Sino tenemos interés en que dirección salen los fotones, sino el rango de momento ó equivalentemente la energía i.e. $\Delta E \approx c\Delta p$, entonces integramos sobre d^3x y el volumen en el espacio de fase se reduce a

$$d^3n = V \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (883)$$

usaremos la normalización de 1 fotón por unidad de volumen y consideramos $V = 1$. Dicha escogencia no es necesaria y en el cálculo de secciones eficaces dicho V se debe cancelar porque no puede ser un observable físico. Una medición física no podría depender del volumen considerado por el observador.

Teniendo en cuenta la relación relativista para los fotones

$$E = pc = \hbar\omega \quad (884)$$

El número de estados cuánticos finales con número de onda entre $\vec{k}, \vec{k} + d^3\vec{k}$ se pueden expresar en función de la frecuencia i.e.

$$\omega, \omega + d\omega \quad \text{con} \quad p = \frac{\hbar\omega}{c}, \quad dp = \frac{\hbar}{c}d\omega \quad (885)$$

entonces:

$$\begin{aligned} d^3n &= \frac{p^3 dp}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega \\ &= \frac{\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} d\Omega \end{aligned} \quad (886)$$

Definimos la rata de emisión de fotones que llegan al detector con una función en el rango $\omega, \omega + d\omega$ como:

$$\begin{aligned} dw_{if}^{emission} &= \Gamma_{if}^{emission} d^3n \\ &= \text{emision de un foton} \times (\text{nmer de estados finales de fotones en } \omega, \omega + d\omega) \quad (887) \\ &= \Gamma_{if}^{emission} \frac{\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} d\Omega \end{aligned}$$

Después de contar los fotones que llegan al detector sin importar la frecuencia final, i.e., sumando sobre todas las frecuencias entonces

$$\frac{dw_{if}^{emission}}{d\Omega} = \int_{\omega} \Gamma_{if}^{emission} \frac{\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3}. \quad (888)$$

y reemplazando la rata de emisión de un fotón, tenemos:

$$\frac{dw_{fi}^{emission}}{d\Omega} = \frac{1}{2\pi c^3} \int \frac{\omega_{fi}^2}{\omega} \left| \vec{\epsilon}_k^* \cdot \vec{d}_{fi} \right|^2 \delta(\hbar(\omega + \omega_{fi})) \omega^2 d\omega \quad (889)$$

donde se ha definido

$$\begin{aligned} E_f - E_i &= \hbar\omega_{fi} \\ \vec{d}_{fi} &= -e \langle \psi_f | \vec{r} | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (890)$$

La expresión dentro de la delta de *Dirac* expresa la conservación de la energía en la transición cuántica

$$E_i = E_f + \hbar\omega \quad (891)$$

Imagen Lateral – Pagina 193

Integrando sobre ω :

$$\frac{dw_{if}}{d\Omega} = \frac{|\omega_{fi}|^3}{2\pi\hbar c^3} \left| \vec{\epsilon}_{k\lambda}^* \cdot \vec{d}_{fi} \right|^2 \quad (892)$$

donde $-k = \hbar\omega_{fi} = \hbar(E_f - E_i) = -\hbar\omega < 0$. Esta correspondencia a la rata de emisión de fotones con polarización λ , los cuales pueden venir en dos estados de polarización transversal i.e. $\lambda = 1, 2$. Si el detector recibe todos los fotones de cualquier polarización, debemos sumar sobre el estado final de λ i.e.

$$\frac{d\omega_{fi}^{emission}}{d\Omega} = \frac{|\omega_{fi}|^3}{2\pi\hbar c^3} \sum_{\lambda=1,2} \left| \vec{\epsilon}_{k\lambda}^* \cdot \vec{d}_{fi} \right|^2 \quad (893)$$

donde decimos que es una rata de emisión no-polarizada. La rata de energía emitida y recibida en el detector en un $d\Omega$ se define como:

$$\begin{aligned} \frac{dI_{fi}}{d\Omega} &= \hbar\omega \frac{d\omega_{fi}^{emission}}{d\Omega} \\ &= \frac{|\omega_{fi}|^4}{2\pi c^3} \sum_{\lambda=1,2} \left| \vec{\epsilon}_{k\lambda}^* \cdot \vec{d}_{fi} \right|^2 \end{aligned} \quad (894)$$

$$I_{fi} = \frac{|\omega_{fi}|^4}{2\pi c^3} \sum_{\lambda=1,2} \int \left| \vec{\epsilon}_{k\lambda}^* \cdot \vec{d}_{fi} \right|^2 d\Omega \quad (895)$$

Imagen Lateral – Pagina 194

Donde se define

$$\vec{d}_{fi\parallel} = -e\langle\psi_f|\vec{r}|\psi_i\rangle_{\parallel} \quad (896)$$

como un vector paralelo a la dirección de propagación \vec{k} , y

$$\vec{d}_{fi\perp} = -e\langle\psi_f|\vec{r}|\psi_i\rangle_{\perp} \quad (897)$$

como un vector perpendicular a \vec{k} , el cual vive en el plano definido por $\{\vec{\epsilon}_{k1}, \vec{\epsilon}_{k2}\}$. Por

tanto:

$$\begin{aligned}
 \vec{d}_{fi} &= \vec{d}_{fi\parallel} + \vec{d}_{fi\perp} \\
 &= \hat{\epsilon}_1(d_{fi\parallel})_1 + \hat{\epsilon}_2(d_{fi\parallel})_2 + \vec{d}_{fi\perp} \\
 \left| \sum_{\lambda=1}^2 \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \vec{d}_{fi} \right|^2 &= (d_{fi\parallel})_1^2 + (d_{fi\parallel})_2^2 + d_{fi\parallel 1}^* d_{fi\parallel 2} + d_{fi\parallel 1} d_{fi\parallel 2}^* \\
 &= |\vec{d}_{fi}|^2 - |d_{fi\perp}|^2 + d_{fi\parallel 1}^* d_{fi\parallel 2} + d_{fi\parallel 1} d_{fi\parallel 2}^*
 \end{aligned} \tag{898}$$

Integrando sobre $d\Omega$ y asumiendo simetría esférica, para simplificar el cálculo:

$$\int d\Omega \left| \sum_{\lambda=1,2} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \vec{d}_{fi} \right|^2 \approx \frac{2}{3} \langle |\vec{d}_{fi}|^2 \rangle 4\pi \tag{899}$$

donde se asumió:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{3} \langle |\vec{d}_{fi}|^2 \rangle &\approx \langle |d_{fi\parallel 1}|^2 \rangle \approx \langle |d_{fi\parallel 1}|^2 \rangle \approx \langle |d_{fi\perp}|^2 \rangle, \\
 \langle |d_{fi\parallel 1}^* d_{fi\parallel 2}| \rangle &\approx 0
 \end{aligned} \tag{900}$$

Por tanto, la rata de emisión de energía es:

$$I_{fi} = \frac{4}{3} \frac{\omega^2 e^2}{c^3} |\langle \psi_f | \vec{r} | \psi_i \rangle|^2. \tag{901}$$

Definimos el ancho de decaimiento total de un estado excitado y la vida media de decaimiento como;

donde τ_f sería la vida media para ??? del decaimiento del estado i al estado f . La vida media de decaimiento es la suma sobre todos los canales de decaimiento.

Cómo ejemplo, consideremos el decaimiento en el átomo de Hidrógeno del estado $|211\rangle$ al estado base $|100\rangle$. Primero que todo calculamos el elemento de matriz

$$\vec{\epsilon} \cdot \langle \psi_f | \vec{r} | \psi_i \rangle = \vec{\epsilon} \cdot \int \psi_f(\vec{r})^* \vec{r} \psi_i(\vec{r}) d^3r \quad (903)$$

usando coordenadas polares

$$\begin{aligned} \vec{\epsilon} \cdot \vec{r} &= \vec{\epsilon} \cdot \{ \hat{i} \sin \theta \cos \phi + \hat{j} \sin \theta \sin \phi + \hat{k} \cos \theta \} \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r \{ -\sqrt{2} Y_{11}(\theta, \phi) \hat{\epsilon}_+ + \sqrt{2} Y_{1-1}(\theta, \phi) \hat{\epsilon}_- + Y_{10}(\theta, \phi) \hat{\epsilon}_z \} \end{aligned} \quad (904)$$

donde

$$\hat{\epsilon}_{\pm} = \frac{\epsilon_x \mp i\epsilon_y}{\sqrt{2}} \quad (905)$$

los cuales corresponden a vectores de polarización izquierdos $(-)$ y derechos $(+)$. Por

tanto:

$$\begin{aligned} \vec{\epsilon} \cdot \langle \psi_f | \vec{r} | \psi_i \rangle &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int R_{n_f l_f}(r) R_{n_i l_i}(r) r^3 dr \times \\ &\quad \int Y_{l_f m_f}^*(\theta, \phi) \{ -\sqrt{2} Y_{11}(\theta, \phi) \hat{\epsilon}_+ + \sqrt{2} Y_{1-1}(\theta, \phi) \hat{\epsilon}_- + Y_{10}(\theta, \phi) \hat{\epsilon}_z \} Y_{l_i m_i}(\theta, \phi) d\Omega \end{aligned} \quad (906)$$

Para producir fotones con polarización $\epsilon_+, \epsilon_-, \epsilon_z$ se requiere entonces

$$\begin{aligned} \hat{\epsilon}_+ : \quad & l_f = l_i \pm 1 \quad m_f = 1 + m_i, \\ \hat{\epsilon}_- : \quad & l_f = l_i \pm 1 \quad m_f = m_i - 1, \\ \hat{\epsilon}_z : \quad & l_f = l_i \pm 1 \quad m_i = m_f. \end{aligned} \quad (907)$$

Para determinar estas reglas de solución usamos la adición de momento angular:

$$Y_{ab} \otimes Y_{l_i m_i} = \sum_{J=a+l_i}^{|a-l_i|} \sum_{M=-J}^J |JM\rangle \langle JM| Y_{ab} Y_{l_i m_i} \quad (908)$$

donde

$$\langle JM|Y_{ab}Y_{l_i m_i}\rangle = \langle JM|bm_i\rangle \quad (909)$$

implica:

$$J = a + l_i, \dots, |a - l_i| \quad M = b + m_i \quad (910)$$

Pero si multiplicamos por el ??? $\langle Y_{l_f} m_f |$ tenemos:

$$\langle Y_{l_f} m_f | Y_{ab} \otimes Y_{l_i m_i} \rangle = \sum_J \sum_M \langle Y_{l_f} m_f | JM \rangle \langle JM | Y_{ab} Y_{l_i m_i} \rangle \quad (911)$$

Para que sea diferente de cero se requiere que $l_f = J_y$ y $m_f = M$ i.e.

$$l_f = l_i + a, \dots, |l_i - a| \quad (912)$$

$$m_f = m_i + b$$

Consideremos la transición $\langle 100 | \vec{r} | 211 \rangle$. Por regla de selección se requiere que $a = 1$ y $b = -1$ para que el elemento de matriz sea diferente de cero, $Y_{1-1}(\theta, \phi)$, el cual correspondería a la emisión de un fotón con polarización $\hat{\epsilon}_-$ i.e.

$$\vec{\epsilon} \cdot \langle 100 | \vec{r} | 211 \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int R_{10}(r) R_{21}(r) r^3 dr \times \sqrt{2} \int Y_{00}^*(\theta, \phi) Y_{1-1}(\theta, \phi) Y_{11}(\theta, \phi) d\Omega \hat{\epsilon}_- \quad (913)$$

Para calcular la parte radial usamos las funciones de onda del átomo de Hidrógeno.

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}, \quad R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{6} a_0^{3/2}} \frac{r}{2a_0} e^{-r/(2a_0)} \quad (914)$$

e integrado

$$\int_0^\infty R_{10}(r) R_{21}(r) r^3 dr = +\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{128}{81} a_0. \quad (915)$$

Por tanto:

$$\vec{\epsilon} \cdot \langle 100 | \vec{r} | 211 \rangle = -\frac{156 a_0}{729 \sqrt{\pi}} \hat{\epsilon}_- \quad (916)$$

43 Absorción de Fotones - Efecto Fotoeléctrico

Se lanza un chorro de fotones de energía $\hbar\omega$ contra una placa y, para simplificar el problema, suponemos que los átomos se aproximan al átomo de Hidrógeno para estudiar las transiciones cuánticas y la producción de electrones. Supongamos que los electrones están en el nivel de energía

$$|E_{n=1}| = \frac{mc^2 Z^2 \alpha^2}{2} \quad (917)$$

y la energía necesaria para ionizar el átomo ó liberar el electrón del núcleo es despreciable i.e. la energía del fotón es transferida al electrón libre

$$\frac{p^2}{2m} \approx \hbar\omega \gg E_{ionizacion} \approx |E_{n=1}|. \quad (918)$$

La función de onda inicial y final del electrón se puede conservar respectivamente como la del estado base del átomo de Hidrógeno y de partícula libre:

$$\begin{aligned} \psi_{100}(r) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}, \\ \psi_f(r) &= e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (919)$$

Supongamos que cada fotón absorbido produce un electrón libre, es decir, aproximamos la rata de absorción de fotones a la rata de emisión de electrones. Por tanto, la rata de emisión de electrones con momento entre $|\vec{p}|$ y $|\vec{p}| + d^3p$ se puede aproximar a

$$d^3\omega_{electrones}^{emision} = \Gamma_{fotones}^{absorcion} d^3n_{e-} \quad (920)$$

Suponiendo un electrón por unidad de volumen

$$\begin{aligned} d^3n_{e-} &= \frac{p^2 dp d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \\ &= \frac{mp dE d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \end{aligned} \quad (921)$$

donde se usó la relación $p - E$ no relativista para el cambio de variable de integración de momento a energía del electrón:

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{2m} = E &\longrightarrow dE = \frac{p}{m} dp \\ &= v dp \end{aligned} \quad (922)$$

Por tanto,

$$d\omega_{e-}^{ems} = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega_k} n_{k\lambda} \left| \langle \vec{p} | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \vec{p} | \psi_{100} \rangle \right|^2 \times \delta(E_f - E_i - \hbar \omega_k) \frac{m^2}{(2\pi \hbar)^3} v dE d\Omega \quad (923)$$

si integramos sobre la energía la rata de emisión de electrones para cualquier energía sería

$$d\omega_{e-}^{emis} = \frac{N e^2 v}{2\pi \hbar \omega_{fi}} \left| \langle \vec{p} | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{p} | 0 \rangle \cdot \vec{E} \right|^2 d\Omega \quad (924)$$

donde $\omega_{fi} = \omega_k$ y N indica el número de electrones. Calculemos el elemento de matriz

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{p} | 0 \rangle \cdot \vec{E} &= \int e^{-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} (-i\hbar \nabla) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} d^3r \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \vec{\epsilon} \cdot (\vec{p} - \hbar \vec{k}) \int e^{-\frac{Zr}{a_0} - i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3r \end{aligned} \quad (925)$$

donde se integró por partes y se definió $\vec{q} = \frac{\vec{p}}{\hbar} - \vec{k}$, además $\vec{\epsilon} \cdot \vec{k} = 0$. Para integrar sobre el ángulo sólido rotamos el eje coordenado de la forma que el eje z coincida con el vector \vec{q} , por tanto, $\vec{q} \cdot \vec{r} = qr \cos \theta$

$$\begin{aligned} nte^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\Omega &= 2\pi \int_{-1}^1 e^{-iqr \cos \theta} d(\cos \theta) \\ &= \frac{4\pi}{qr} \sin qr \end{aligned} \quad (926)$$

Entonces el elemento de matriz se escribe como

$$\vec{\epsilon} \cdot \langle \vec{p} | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{p} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \frac{4\pi}{q} \vec{\epsilon} \cdot \vec{p} \int_0^\infty e^{-br} r \sin qr dr \quad (927)$$

donde $b = \frac{Z}{a_0}$. Para realizar la integral en r escribimos el $\sin()$ en la representación de funciones exponenciales usando la relación de *Euler* y las integrales en el infinito convergen

por el factor en el integrando e^{-br} . El resultado final es

$$\langle \vec{p} | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon} \cdot \vec{p} | 0 \rangle = 8\sqrt{\pi} \left(\frac{a_0}{Z} \right)^{3/2} \frac{\vec{\epsilon} \cdot \vec{p}}{\left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{Z^2} \right)^2} \quad (928)$$

y la rata de emisión de electrones:

$$\frac{d\omega_{e-}^{emision}}{d\Omega} = \frac{32e^2 a_0^3 v N}{23\hbar^3 \omega_{fi}} \frac{(\vec{\epsilon} \cdot \vec{p})^2}{\left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{Z^2} \right)^4}. \quad (929)$$

Para entender el límite no relativista veamos

$$\frac{\hbar \vec{k}}{|\vec{p}|} = \frac{\hbar \omega}{cp} \approx \frac{1}{cp} \frac{p^2}{2m} \approx \frac{v}{2c} \ll 1 \quad (930)$$

y de la definición de $\vec{q} = \frac{\vec{p}}{\hbar} - \vec{k}$,

$$\begin{aligned} \vec{q}^2 &= \frac{p^2}{\hbar^2} + k^2 - 2 \frac{\vec{p} \cdot \vec{k}}{\hbar} \\ &\approx \frac{p^2}{\hbar^2} \left(1 - \frac{2\hbar k \cos \theta}{p} \right). \end{aligned} \quad (931)$$

Por otro lado

$$\begin{aligned} \left(\frac{a_0 p}{Z\hbar} \right)^2 &= \left[\frac{p}{2\hbar} \left(\frac{\hbar}{mc\alpha} \right) \right]^2 = \left[\frac{mc}{Z\hbar} \frac{\hbar}{mc\alpha} \right]^2 = \left(\frac{v}{Z\alpha c} \right)^2 \gg 1 \\ &= \frac{\frac{mv^2}{2}}{\frac{Zmc^2\alpha^2}{2}} = \frac{E_{e-}}{E_{ionizac}} \approx \frac{\hbar\omega}{E_{ioniz}} \gg 1 \end{aligned} \quad (932)$$

Por tanto, hacemos la aproximación:

$$1 + \frac{a_0^2 q^2}{Z^2} = 1 + \left(\frac{a_0 p}{Z\hbar} \right)^2 \left(1 - \frac{2\hbar k \cos \theta}{p} \right) \approx \left(\frac{a_0 p}{Z\hbar} \right)^2 \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right). \quad (933)$$

La rata de emisión de electrones en el límite no relativista queda en la forma

$$\frac{d\omega_{e-}^{emitid}}{d\Omega} = \frac{32e^2 a_0^3 v N}{Z^3 \hbar^3 \omega_{fi}} \frac{|\vec{\epsilon} \cdot \vec{p}|^2}{\left(\frac{a_0^2 p^2}{Z^2 \hbar^2} \right)^4 (1 - \beta \cos \theta)^4} \quad (934)$$

Estimemos el flujo de fotones incidentes:

$$|_{\text{incid}}^{\text{fotones}} = \frac{\text{fotones inc}}{\text{area} \times \text{tiempo}} = \frac{\# \text{ fotones dist}}{V} \frac{1}{t} = N c \quad (935)$$

Definimos la sección eficaz por unidad de $d\Omega$ como la fracción de electrones emitidos en un ángulo sólido $d\Omega$:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\sigma}{d\Omega} &\equiv \frac{1}{\# \text{ fotones }_{\text{incid}}} \times \frac{d\omega_{e^-}^{\text{emitidos}}}{d\Omega} \\
 &= \frac{\# \text{ electrones emitidos}}{\text{tiempo}} \times \frac{1}{\frac{\# \text{ fotones inc}}{\text{area} \times \text{tiempo}}} \\
 &\approx \frac{\# \text{ electrones emitidos}}{\# \text{ fotones incidentes}} \times \text{area} \\
 &\approx \text{fraccin de fotones absorbidos} \times \text{area}
 \end{aligned} \tag{936}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d\sigma}{d\Omega} &\approx \text{fraccin de electrones emitidos} \times \text{area} \\
 &\approx \text{area efectiva de dispersin de electrones} \\
 &\approx \frac{32\alpha\hbar\lambda}{mc} \left(\frac{\hbar Z}{a_0 p} \right)^5 \frac{\sin^2 \theta \sin^2 \phi}{\left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right)^4}
 \end{aligned} \tag{937}$$

donde $\lambda = \frac{c}{\omega}$ y $\vec{\epsilon} \cdot \vec{p} = p \sin \theta \cos \phi$.

Imagen Lateral – Pagina 203

El fotón viene de la dirección z y rotamos los ejes alrededor de z de tal forma que el vector de polarización queda en dirección y . El electrón sale en dirección \vec{p} formando ángulos θ, ϕ . El vector de polarización del fotón está en el plano xy perpendicular a la dirección de propagación del fotón. La sección eficaz es máxima para $\theta = \phi = \frac{\pi}{2}$, es decir, cuando el electrón sale en la dirección de polarización del fotón. Para $\theta = 0$ los electrones saldrían en la dirección de incidencia de los fotones, y la sección eficaz es cero, es decir, no habría fotones emitidos en esta dirección.

Ejercicio

Calcular $\hat{X}_H(t)$ y $\hat{P}_H(t)$ para un oscilador armónico unidimensional. Calcular la ecuación de movimiento.

El operador en el cuadro de Heisenberg se define como

$$\hat{O}_H(t) = e^{i\frac{Ht}{\hbar}} \hat{O} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \quad (938)$$

y el Hamiltoniano es

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2. \quad (939)$$

Para realizar este calculo usamos la formula de Hausdorff- Campbell

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = B + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (940)$$

Para $\hat{X}_H(t)$:

$$\begin{aligned} \hat{X}_H(t) &= e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{x} e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \\ &= x + \frac{it}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] + \left(-\frac{it}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{2!} [H, [H, x]] + \dots \end{aligned} \quad (941)$$

Usando:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}] &= \frac{1}{2m} [\hat{p}^2, \hat{x}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p} \\ [\hat{H}, \hat{p}] &= \frac{1}{2}m\omega^2 [\hat{x}^2, \hat{p}] = im\omega^2 \hat{x} \end{aligned} \quad (942)$$

Reemplazando:

$$\begin{aligned} \hat{X}_H(t) &= x + \frac{t}{m} \hat{p} - \frac{(\omega t)^2}{2!} \hat{x} - \frac{(\omega t)^3}{3!} \frac{1}{m\omega} \hat{p} + \frac{(\omega t)^4}{4!} \hat{x} + \dots \\ &= \hat{x} \left[1 - \frac{(\omega t)^2}{2} + \frac{(\omega t)^4}{4!} + \dots \right] + \frac{\hat{p}}{m\omega} \left[\omega t - \frac{(\omega t)^3}{3!} + \dots \right] \end{aligned} \quad (943)$$

$$\hat{X}_H(t) = \hat{x} \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \hat{p} \sin \omega t$$

De forma similar

$$\begin{aligned} \hat{P}_H(t) &= e^{i\frac{Ht}{\hbar}} \hat{p} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \\ &= \hat{p} \cos \omega t - m\omega \hat{x} \sin \omega t. \end{aligned} \quad (944)$$

Para hallar la ecuación de movimiento usamos la ecuación de Heisenberg

$$\begin{aligned}
 \frac{d\hat{X}_H(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{X}_H(t), \hat{H}] \\
 &= \frac{1}{i\hbar} e^{i\frac{Ht}{\hbar}} [\hat{x}, \hat{H}] e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \\
 &= \frac{1}{i\hbar} e^{i\frac{Ht}{\hbar}} \left(+i\frac{\hbar}{m} \right) \hat{p} e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} \\
 &= \frac{1}{m} \hat{P}_H(t)
 \end{aligned} \tag{945}$$

De igual forma para $\hat{P}_H(t)$

$$\begin{aligned}
 \frac{d\hat{P}_H(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{P}_H(t), \hat{H}] \\
 &= -m\omega^2 \hat{X}_H(t)
 \end{aligned} \tag{946}$$

Derivando con respecto al tiempo:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 \hat{X}_H(t)}{dt^2} &= \frac{1}{m} \frac{d\hat{P}_H(t)}{dt} \\
 &= -\omega^2 \hat{X}_H(t)
 \end{aligned} \tag{947}$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \hat{X}_H(t) + \omega^2 \hat{X}_H(t) = 0$$

44 Dispersión de Coulomb a Primer Orden en la Serie de Born

En primera aproximación consideramos el factor de forma como

$$\begin{aligned}
 f(\theta, \phi) &\approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} V(r') e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}} d^3r', \\
 &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar} \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}'} V(r') d^3r'
 \end{aligned} \tag{948}$$

donde se definió $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_0$. Definamos el ángulo entre \vec{k}_0 y \vec{k} como el ángulo de dispersión θ , entonces

$$\begin{aligned} |\vec{q}| = q &= (k^2 + k_0^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{k}_0)^{1/2}, \\ &= (2k^2(1 - \cos \theta))^{1/2}, \\ &= 2k \sin \frac{\theta}{2}. \end{aligned} \tag{949}$$

Para realizar la parte angular de la integral suponemos el vector \vec{q} en la dirección z , por tanto,

$$\vec{q} \cdot \vec{r}' = qr' \cos \alpha \tag{950}$$

y

$$\begin{aligned} f(\theta, \phi) &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar} \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{iqr' \cos \alpha} V(r') r'^2 dr' d(\cos \alpha) d\varphi, \\ &= -\frac{\mu}{q\hbar^2} 2 \int_0^\infty V(r') \sin(qr') r' dr'. \end{aligned} \tag{951}$$

Para un potencial de de Coulomb, obtenemos:

$$\begin{aligned} V(r) &= \frac{e^2 Z_1 Z_2}{r}, \\ f(\theta,) &= -\frac{2\mu}{q\hbar^2} e^2 Z_1 Z_2 \int_0^\infty \sin qr' dr', \\ &= -\frac{2\mu e^2 Z_1 Z_2}{2iq\hbar^2} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \left\{ \int_0^\infty e^{-\lambda + iqr'} dr' - \int_0^\infty e^{-\lambda - iqr'} dr' \right\}, \\ &= -\frac{\mu e^2 Z_1 Z_2}{iq\hbar^2} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\lambda - iq} - \frac{1}{\lambda + iq} \right\}, \\ &= \frac{2\mu e^2 Z_1 Z_2}{\hbar^2 q^2}. \end{aligned} \tag{952}$$

La sección eficaz se reduce a:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 \mu e^2}{2\hbar^2 k^2} \right)^2 \sin^{-4} \left(\frac{\theta}{2} \right) \tag{953}$$

y se conoce como fórmula de Rutherford.

Ejemplos: Calcular $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para un potencial de Coulomb apantallado, Potencial de Yukawa,

$$V(r) = Z_1 Z_2 e^2 V_0 \frac{e^{-ar}}{r} \quad (954)$$

Por tanto, $\psi(\vec{r})$ en esta aproximación se puede escribir en la forma:

$$\psi(\vec{r}) \approx \psi_{inc}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} V(r') \psi(r') d^3 r' \quad (955)$$

comparando con la onda esférica, obtenemos que el factor de forma se expresa como

$$\begin{aligned} f(\theta, \varphi) &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} V(r') \psi(r') d^3 r' \\ &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \phi_{plana} | V | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (956)$$

donde la sección eficaz por ángulo sólido se puede calcular en función del potencial de dispersión usando esta expresión para el factor de forma,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} V(r') \psi(r') d^3 r' \right|^2 \quad (957)$$

Esta expresión es muy importante porque la sección eficaz se puede medir experimentalmente, lo cual corresponde a la fricción de partículas dispersadas y que llegan al detector. Pero también se puede calcular para un potencial dado y se puede comparar con el experimento.

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r})^{(2)} \approx \psi_{inc}(r) &- \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(r') \psi_{inc}(r') d^3 r' \\ &+ \left(-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}_1|}}{|\vec{r}-\vec{r}_1|} V(r_1) d^3 r_1 \times \int \frac{e^{ik|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} V(r_2) \psi_{inc}(r_2) d^3 r_2 \end{aligned} \quad (958)$$

La serie se puede obtener a orden (n) de forma iterativa.

45 Límite Asintótico

Usemos la aproximación de límite lejano, es decir, el punto de observación, los detectores están muy lejos comparado con la distancia donde se encuentran los centros dispersores, es decir, consideramos el límite donde

$$r \gg r'. \quad (959)$$

Imagen Lateral – Pagina 210

Además, vamos a usar la aproximación

$$\vec{k} \approx k\hat{e}_r. \quad (960)$$

En esta aproximación los factores $|\vec{r} - \vec{r}'|$ que dividen y van en la exponencial en la solución $\psi(\vec{r})$ se aproximan de la forma:

$$\begin{aligned} k|\vec{r} - \vec{r}'| &= kr \left(1 - \frac{2\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2} \right)^{1/2} \approx kr - k\hat{e}_r \cdot \vec{r}' \approx kr - \vec{k} \cdot \vec{r}', \\ \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} &\approx \frac{1}{r}. \end{aligned} \quad (961)$$

Imagen Lateral – Pagina 211

$(z - k + i\epsilon) \times (z + k - i\epsilon)$ donde la contribución en este ???(ver pag 211) está en el polo

$z = -k + i\epsilon$, obtenemos la función de *Green* avanzada y toma la forma:

$$G_-(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (962)$$

Entonces para el problema de dispersión debido a un potencial $V(\vec{r})$, escogemos la función de Green asociada a una onda saliente y la solución de la ecuación de Schrödinger se expresa como:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{inc}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(r') \psi(r') d^3r'. \quad (963)$$

Como la solución $\psi(\vec{r})$ depende de la misma función, pues no tenemos la solución exacta al problema. Realicemos dicha solución haciendo aproximaciones. Consideremos en el integrando que $\psi(r) \approx \psi_{inc}(r)$ entonces decimos que obtenemos la solución a primer orden i.e. $\psi(r)^{(1)}$. Si dicha solución a primer orden la reemplazamos en el integrando, obtenemos la solución a segundo orden y así sucesivamente, generando una serie conocida como serie de Born, es decir:

$$\psi(\vec{r})^{(1)} \approx \psi_{inc}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(r') \psi_{inc}(r') d^3r', \quad (964)$$

Imagen Lateral – Pagina 212

Realicemos la integral cerrada de la función compleja en el camino cerrado de la forma

$$\oint \frac{x dz e^{iz|\vec{r}-\vec{r}'|}}{(z-k-i\epsilon)(z+k+i\epsilon)} = \lim_{R \leftrightarrow \infty} \int_{C_1} \frac{z dz e^{\alpha|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{-\beta|\vec{r}-\vec{r}'|}}{z^2 - k^2} + \lim_{R \leftrightarrow \infty} \int_{-R}^R \frac{q dq e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}}{q^2 - k^2} \quad (965)$$

donde $\beta > 0$ y cuando $R \leftrightarrow \infty$ la integral sobre el camino C_1 tiene a cero. La segunda integral tiende a la integral que aparece en la función de Green. La integral cerrada se evalúa usando el teorema del residuo y la función se evalúa en el polo dentro de la región

de integración, i.e. $z = k + i\epsilon$. Por tanto:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q dq}{q^2 - k^2} &= 2\pi i \left. \frac{z e^{iz|\vec{r}-\vec{r}'|}}{z + k} \right|_{z=k} \\ &= \pi i e^{iz|\vec{r}-\vec{r}'|}. \end{aligned} \quad (966)$$

Quedando la función de Green en la forma:

$$G_{\pm}(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (967)$$

Realizando un procedimiento similar, pero cambiando los polos $\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') = q|\vec{r} - \vec{r}'| \cos \theta$

y

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}') &= - \int \frac{q^2 dq d(\cos \theta) d\phi}{(2\pi)^3} \frac{e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|\cos \theta}}{q^2 - k^2} \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{i|\vec{r}-\vec{r}'|} \int_0^{\infty} \frac{q^2 dq}{q^2 - k^2} \frac{1}{q} \{e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|} - e^{-iq|\vec{r}-\vec{r}'|}\}. \end{aligned} \quad (968)$$

Para el segundo término de la integral cambiamos $q \rightarrow -q$ y ésta se reduce a

$$- \int_0^{\infty} \frac{q dq}{q^2 - k^2} e^{-iq|\vec{r}-\vec{r}'|} = \int_{-\infty}^0 \frac{q dq}{q^2 - k^2} e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}, \quad (969)$$

por tanto:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{i}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{q dq}{q^2 - k^2} e^{iq|\vec{r}-\vec{r}'|}. \quad (970)$$

Esta integral tiene dos polos en $q = \pm k$, entonces tomamos la extensión analítica sobre el plano complejo y los polos los escogemos de la forma

$$q^2 - k^2 \rightarrow (z - k \pm i\epsilon)(z + k \pm i\epsilon) \quad (971)$$

es decir, los polos los podemos tomar de cuatro formas diferentes. Si tomamos los polos de la forma $(z - k - i\epsilon)(z + k + i\epsilon)$ obtenemos la función de Green retardada y propaga ondas

salientes. Para el caso en el cual tomamos los polos en la forma $(z - k + i\epsilon)(z + k - i\epsilon)$ obtenemos la función de Green adelantada y propaga onda entrantes.

Calculemos la función de Green de la ecuación de *Helmholtz*, para ello tomemos las transformadas de *Fourier* y reemplacemos en la ecuación:

$$\begin{aligned}\delta(\vec{r} - \vec{r}') &= \int e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \\ G(\vec{r}, \vec{r}') &= \int e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} G(q) \frac{d^3q}{(2\pi)^3},\end{aligned}\tag{972}$$

es decir

$$\begin{aligned}(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') &= \int (\nabla^2 + k^2)e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} G(q) \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \\ &= \int e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} (-q^2 + k^2) G(q) \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \\ &= \int e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\end{aligned}\tag{973}$$

es decir, la función de *Green* en el espacio de los momentos se escribe en la forma

$$G(q) = \frac{-1}{k^2 - q^2}.\tag{974}$$

y por tanto:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{q^2 - k^2}.\tag{975}$$

Para calcular la función realicemos primero la integral angular en coordenadas esféricas.

Como el producto $\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')$ es invariante bajo rotaciones, suponemos el eje q_Z en dirección $\vec{r} - \vec{r}'$ entonces reemplazando la función de onda

$$\psi(r) = \psi_{inc}(r) + \psi_{sc}(r)\tag{976}$$

y usando la solución homogénea

$$(\nabla^2 + k_0^2)\psi_{inc}(r) = 0\tag{977}$$

obtenemos

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{sc}(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\psi(r). \quad (978)$$

Para resolver esta ecuación usamos la función de *Green* del operador de la ecuación de *Helmholtz*

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (979)$$

la cual se puede expresar en la forma:

$$\psi_{sc}(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G(\vec{r}, \vec{r}')V(r')\psi(r')d^3r' \quad (980)$$

donde suponemos que en la dispersión no hay fronteras y por esta razón no hay contribución de la integral de superficie que aparece al usar los teoremas de Green. La solución a la ecuación homogénea se expresa como:

$$\psi_{inc}(r) \approx e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} \quad (981)$$

En primera aproximación la solución se puede escribir en la forma

$$\psi_{sc}(r) \approx \frac{2\mu}{\hbar^2} \int G(\vec{r}, \vec{r}')V(r')\psi_{inc}(r')dr' \quad (982)$$

aproximaciones,

$$\begin{aligned} \nabla\psi_{sc} &= \nabla \left(A \frac{f(\theta, \varphi)e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} \right) = \left(\hat{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{e}_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{e}_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) A \frac{f(\theta, \varphi)e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} \\ &\approx i\hat{e}_r k A \frac{f(\theta, \varphi)e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} \\ &\approx i\vec{k}\psi_{sc}(r) \end{aligned} \quad (983)$$

donde se despreciaron términos del orden $(1/r^2)$ por estar el detector muy lejos del centro dispersor, además se asumió de \hat{e}_r es paralelo a \vec{k} en este límite. Por tanto:

$$d\sigma = \frac{k}{k_0} |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (984)$$

como suponemos que es una dispersión elástica $k = k_0$, por tanto

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2. \quad (985)$$

45.1 Cálculo de $f(\theta, \varphi)$ en Función del Potencial

Usando la ecuación de *Schrödinger*

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\psi(r) \quad (986)$$

donde se define

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad (987)$$

Para hacer la demostración, recordemos la definición de sección eficaz. EL número de partículas dispersadas por unidad de tiempo se define como:

$$d\mathcal{N}(\theta, \varphi) = \vec{J}_{sc} r^2 d\Omega \quad (988)$$

donde \vec{J}_{sc} es la densidad de corriente de partículas dispersadas por unidad de área. EN este caso $d\mathcal{N}$ se refiere a los dispersados en el ángulo sólido $d\Omega$. Si dividimos por la densidad de corriente de partículas incidentes, entonces la sección eficaz se escribe en la forma:

$$\begin{aligned} d\sigma &= \frac{d\mathcal{N}(\theta, \varphi)}{|\vec{J}_{inc}|} = \frac{|\vec{J}_{sc}|}{|\vec{J}_{inc}|} \times r^2 d\Omega \\ &= \text{fracción de partículas dispersadas} \\ &\quad \text{en el rea del detector.} \end{aligned} \quad (989)$$

Para la ecuación de *Schrödinger* la densidad de corriente se define como:

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi), \quad (990)$$

y para las partículas incidentes, usando ψ_{inc} , tenemos

$$\vec{J}_{inc} = \frac{\hbar \vec{k}_0}{\mu} |A|^2. \quad (991)$$

Para calcular \vec{J}_{sc} debemos tener en cuenta $\psi_{sc}(\vec{r})$ y realizar algunas. supongamos que cuando se lanzan las partículas ellas no han sentido la interacción entonces se pueden considerar como partículas libres y obedecen la ecuación de *Schrödinger*:

$$(\nabla^2 + k_0^2)\psi_{inc}(\vec{r}) = 0 \quad (992)$$

cuya solución se puede escribir como:

$$\psi_{inc}(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}; \quad k_0^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad (993)$$

cuando las partículas incidentes son dispersadas, a una distancia muy lejana, se pueden considerar como una onda esférica pero con un frente de onda modulado por la función $f(\theta, \varphi)$ la cual indica que el potencial dispersión no necesariamente es esférico. La solución final puede escribirse como la suma de partículas incidentes no dispersadas, la cual es la solución homogénea de la ecuación de *Schrödinger*, ??? la función de onda de las partículas dispersadas de la forma:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \psi_{inc}(\vec{r}) + \psi_{sc}(\vec{r}) \\ &= A \left[e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} \right]. \end{aligned} \quad (994)$$

donde $f(\theta, \varphi)$ está relacionado con el potencial dispersor, suele llamarse factor de forma.

Demostremos que:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2, \quad (995)$$

donde se define la masa total y la masa reducida como:

$$M = m_1 + m_2, \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}. \quad (996)$$

suponiendo que el potencial sea central i.e.

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(r) \quad (997)$$

con lo que es posible realizar separación de variables:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \psi(\vec{R})\psi(\vec{r}), \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{R}}^2 \psi(\vec{R}) &= E_{CM} \psi(\vec{R}), \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(r) \right) \psi(\vec{r}) &= E \psi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (998)$$

si el sistema de referencia lo ubicamos en el centro de masa basta resolver la última ecuación para tener toda la información de la información???(Pag219). Veamos como se calcula la sección eficaz y como se puede compara con los experimentos para tener información del potencial dispersor.

Imagen Pagina 219

Veamos como hallar una solución aproximada al problema. En general, para cualquier $V(r)$ la ecuación de *Schrdinger* no tiene solución exacta.

46 Dispersión de Partículas

Consideremos un chorro de partículas de masa m_1 lanzadas contra un blanco el cual esta formado por partículas de masa m_2 y se genera un potencial de dispersión $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ el cual

es independiente del tiempo. Para tener información del potencial dispersor ponemos detectores muy lejos de la región de dispersión los cuales generan un ángulo sólido respecto al blanco. El detector mide la sección eficaz de dispersión por unidad de ángulo sólido la cual es la rata de dispersión de partículas sobre el flujo incidente del flujo de partículas que se lanzaron contra el blanco. Dicha sección eficaz depende del potencial dispersor. Asumiremos dispersión elástica, es decir, la energía cinética entrante y saliente se conserva, por otro parte, no hay absorción de partículas. Si las partículas que se acercan al blanco son no-relativistas entonces la ecuación que determina la dispersión es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (999)$$

Para un sistema asilado podemos cambiar de coordenadas

$$R = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \quad (1000)$$

donde, realizando las derivadas en cadena, la energía cinética se expresa como

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \quad (1001)$$

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{q\hbar^2} V_0 Z_1 Z_2 e^2 \int_0^\infty \frac{e^{-ar'}}{r'} \sin qr' r' dr' \quad (1002)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4\mu^2 \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2 V_0}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(a^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2}$$

si interpretamos a $a = \frac{1}{a_0}$ entonces $Z_1 e V_0 e^{-\frac{r}{a_0}}$ se puede interpretar como la carga del núcleo con la distribución electrónica forma una distribución de carga que va cayendo exponencialmente y de esta forma la distribución no es puntual. Este efecto de apantallamiento quita la singularidad para $\theta = 0$ de la dispersión de Rutherford. Calculemos la sección

eficaz para un potencial de la forma

$$\begin{aligned}
 V(r) &= V_0 e^{-ar} \\
 f(\theta) &= -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} V_0 \int_0^\infty e^{-ar'} \sin qr' r' dr', \\
 &= -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} V_0 \frac{1}{2i} \int_0^\infty r' \{e^{-(a-iq)r'} - e^{-(a+iq)r'}\} dr', \\
 &= -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q} \frac{1}{2i} \left\{ \frac{1}{(a-iq)^2} - \frac{1}{(a+iq)^2} \right\}, \\
 \frac{d\sigma}{dd\Omega} &= \frac{16\mu^2 V_0^2 a^2}{\hbar^4} \frac{1}{(a^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^4}.
 \end{aligned} \tag{1003}$$

En los dos problemas anteriores existen dos límites interesante para analizar,

$$a_0 \gg \lambda \sim \frac{1}{k}, \quad a_0 \ll \lambda \sim \frac{1}{k} \tag{1004}$$

En el primer caso $a_0 \gg \lambda$:

$$\begin{aligned}
 a^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} &\approx \frac{1}{a_0^2} (1 + 4a_0^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}) \\
 &\approx 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}
 \end{aligned} \tag{1005}$$

se reduce a la dispersión de Coulomb.

Para el segundo caso $a_0 \ll \lambda$

$$a^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \approx \frac{1}{a_0^2} (1 + 4a_0^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}) \approx \frac{1}{a_0^2} \tag{1006}$$

se reduce a dispersión por esfera dura ¿?(pag222).

47 Ondas Parciales

Supongamos simetría azimutal, es decir, rotaciones respecto al eje Z . En este caso las funciones son únicamente función de θ y usamos los polinomios de *Legendre* $P_l(\cos \theta)$ para

expandir las funciones. Entonces escribimos las funciones y operadores en la forma:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta), \quad (1007)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \hat{L}^2, \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}, \\ \psi(\vec{r}) &= \sum_{l=0}^{\infty} R_{kl}(r) P_l(\cos\theta), \\ \psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta). \end{aligned} \quad (1008)$$

Reemplazaremos la función de onda $\psi(\vec{r})$ en la ecuación de *Schrdinger* usando al expansión en P_l de $\psi(\vec{r})$ y ∇^2 , entonces para l tenemos:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(r) &= E\psi(r), \\ \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] (rR_{kl}(r)) &= \frac{2m}{\hbar^2} V(r) (rR_{kl}(r)), \end{aligned} \quad (1009)$$

con

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (1010)$$

La solución para esta ecuación se puede proponer en la forma

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l \eta_l(kr) \quad (1011)$$

y en el límite asintótico, para $r \rightarrow \infty$, se escribe como:

$$R_{kl}(r) \approx a_l \frac{\sin kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l}{kr}. \quad (1012)$$

Por tanto, la función de onda en el límite asintótico $r \rightarrow \infty$ queda en la forma

$$\psi(\vec{r}) \approx \sum_{l=0}^{\infty} a_l \frac{\sin kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l}{kr} P_l(\cos\theta). \quad (1013)$$

Escribiendo el seno como funciones exponenciales mediante la relación de Euler, la función de onda se escribe como:

$$\psi(\vec{r}) \approx -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} a_l (i)^l e^{-i\delta_l} P_l(\cos \theta) + \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} a_l (-i)^l e^{i\delta_l} P_l(\cos \theta). \quad (1014)$$

Comparemos esta solución general de la ecuación de *Schrdinger* con

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \\ &\approx \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \end{aligned} \quad (1015)$$

En el límite asintótico $r \rightarrow \infty$ la función de *Bessel* esférica se escribe como

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\approx \frac{\sin kr - l\frac{\pi}{2}}{kr} \\ &\approx \frac{1}{2i} \left(\frac{e^{i(kr-l\frac{\pi}{2})}}{kr} - \frac{e^{-i(kr-l\frac{\pi}{2})}}{kr} \right) \end{aligned} \quad (1016)$$

y reemplazando en la ecuación anterior, para el límite asintótico $r \rightarrow \infty$, tenemos:

$$\psi(\vec{r}) \approx -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (i)^{2l} (2l+1) P_l(\cos \theta) + \frac{e^{ikr}}{r} \left[f(\theta) + \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \right]. \quad (1017)$$

Tenemos dos formas de la función de onda. Una que viene de la ecuación de *Schrdinger* y debe ser función del $V(r)$. La otra la construimos a partir del factor de forma $f(\theta)$ como onda esférica dispersada y onda incidente. Al compararlas debe aparecer una relación entre $f(\theta)$ y $V(r)$.

Comparemos las dos ecuaciones (1014) y (1017) para el caso en el cual $\delta_l \neq 0$. Igualando los coeficientes de las exponenciales $e^{\pm ikr}$, tenemos:

$$\begin{aligned} a_l &= (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \\ f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1), \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\theta), \end{aligned} \quad (1018)$$

donde usamos el factor de a_l en la segunda igualdad para e^{ikr} para obtener $f(\theta)$. Simplificando

$$f_l(\theta) = \frac{1}{k}(2l+1)P_l(\cos\theta)\sin\delta_l e^{i\delta_l}. \quad (1019)$$

Para $\delta_l = 0$ entonces $f(\theta) = 0$. Este caso corresponde a la solución de la ecuación de *Schrödinger* $V(r) = 0$, la cual se reduce a

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] (rR_{kl}) = 0 \quad (1020)$$

cuya solución se reduce a

$$\psi(r) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{\sin kr - l \frac{\pi}{2}}{kr} P_l(\cos\theta). \quad (1021)$$

Para la sección eficaz tenemos:

$$\begin{aligned} \sigma &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega, \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l, \\ \sigma_l &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \end{aligned} \quad (1022)$$

si el potencial es cero entonces $\delta_l = 0$, $f(\theta) = 0$ y $\sigma = 0$. Para el caso particular de $\theta = 0$, tenemos

$$\begin{aligned} f(\theta = 0) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin \delta_l e^{i\delta_l} \\ \frac{4\pi}{k} \text{Im}\{f(\theta = 0)\} &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sigma \end{aligned} \quad (1023)$$

La última identidad se conoce como el teorema óptico.

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}\{f(\theta = 0)\} \quad (1024)$$

consideremos el potencial $V(r) = V_0\delta(r - a)$ y calcularemos $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para dispersión de partículas de baja velocidad.

Primero que todo entendamos que significa bajas velocidades. Para ello consideremos la energía cinética expandida en polinomios de *Lagendre*:

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = +\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] \quad (1025)$$

Bajas velocidades significan l pequeños, es decir, consideramos $l \simeq 0$. La sección eficaz estaría dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0 \quad (1026)$$

por tanto es necesario hallar δ_0 . Para ello consideremos la ecuación de *Schrdinger* $l = 0$.

Definamos $u(r) = rR(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}u(r) + V_0\delta(r - a)u(r) = Eu(r) \quad (1027)$$

Primero resolvamos para $r \neq a$; entonces

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right]u(r) = 0 \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E. \quad (1028)$$

consideremos las condiciones de frontera

$$u(r=0) = 0, U(r \rightarrow \infty) \approx finita. \quad (1029)$$

$$u(r) = \begin{cases} u_1(r) = A \sin kr & 0 < r < a \\ u_2(r) = B \sin kr + \delta_0 & a < r \end{cases} \quad (1030)$$

consideremos la ecuación de *Schrdinger* e integremos entre $[\alpha - \epsilon, \alpha + \epsilon]$, por tanto:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} dr + V_0 \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \delta(r-a) u(r) dr = E \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} u(r) dr \\
 & \left. \frac{du_2(r)}{dr} \right|_{r=a} - \left. \frac{du_1(r)}{dr} \right|_{r=a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} u_2(a) = 0 \\
 & B \left[k \cos(ka + \delta_0) - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \sin(ka + \delta_0) \right] = Ak \cos ka.
 \end{aligned} \tag{1031}$$

Para que la función sea continua en $r = a$ es necesario imponer la condición

$$A \sin ka = B \sin(ka + \delta_0) \tag{1032}$$

Por tanto, dividiendo por $B \sin(ka + \delta_0)$ y usando la condición de continuidad tenemos:

$$\arctan(ka + \delta_0) - \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \arctan(ka) \tag{1033}$$

Es importante observar que para $\delta_0 = 0$ implica $V_0 = 0$. Para el caso en el cual $ka \ll 1$,

$\lambda \gg a$, lo cual corresponde a bajos momentos

$$\begin{aligned}
 \tan ka & \approx ka \\
 \tan ka + \delta_0 & \approx \tan \delta_0 \\
 \tan \delta_0 & \approx \frac{ka}{1 + \frac{2mV_0 a}{\hbar^2}}.
 \end{aligned} \tag{1034}$$

Por tanto,

$$\sin^2 \delta_0 \approx \frac{k^2 a^2}{k^2 a^2 + \left(1 + \frac{2mV_0 a}{\hbar^2}\right)^2} \tag{1035}$$

y la sección eficaz se escribe en la forma:

$$\begin{aligned}
 \sigma &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0} (2l+1) \sin^2 \delta_0 \\
 &\approx \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \\
 &\approx \frac{4\pi a^2}{k^2 a^2 + \left(1 + \frac{2mV_0 a}{\hbar^2}\right)^2}
 \end{aligned} \tag{1036}$$

consideremos otro ejemplo para esferas duras i.e.

$$V(r) \begin{cases} \infty & r < a \\ 0 & r \geq a \end{cases} \quad (1037)$$

consideremos los dos límites, *a)* bajas energías y *b)* altas energías y calculemos la sección eficaz. En el caso *a)* de bajas energías o pequeñas velocidades tenemos $l = 0$. Como el potencial es infinito para $r < a$, la función de onda se anula i.e. $u(r < a) = 0$. Para $r \geq a$ resolvemos la ecuación de *Schrödinger*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) = Eu(r) \quad (1038)$$

y la solución en general la escribimos en la forma

$$u(r) \begin{cases} u_1(r) = 0 & r < a \\ u_2(r) = A \sin kr + \delta_0 & r \geq a \end{cases} \quad (1039)$$

con $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Imponiendo la condición de frontera

$$u_2'(r = a) = A \sin ka + \delta_0 = 0 \quad (1040)$$

entonces

$$\delta_0 = -ka \quad (1041)$$

y

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 ka \approx 4\pi a^2 \quad (1042)$$

La aproximación que realizamos es $ka \ll 1$ porque equivale a bajas energías i.e. $a \ll \lambda$. La sección eficaz total coincide con la de una esfera rígida de radio a la cual es la obtenida en el límite clásico.

Para el caso b) de altas energías hagamos alguna aproximación para poder resolver el problema.

Consideremos la energía cinética

$$\begin{aligned}\frac{p^2}{2m} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \\ &\approx \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_{max}^2}{r^2} \right] \\ &\approx E\end{aligned}\tag{1043}$$

Entonces supongamos que consideramos un valor l_{max} de la forma siguiente

$$\begin{aligned}l_{max}^2 &\approx \frac{2mE}{\hbar^2} a^2, \\ l_{max} &\approx ka.\end{aligned}\tag{1044}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned}\sigma &\approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{max}} (2l+1) \sin^2 \delta_l \\ &\approx \frac{4\pi}{k^2} \langle \sin^2 \delta_l \rangle \sum_{l=0}^{l_{max}} (2l+1) \\ &\approx \frac{2\pi}{k^2} (l_{max} + 1)^2 \\ &\approx \frac{2\pi}{k^2} \times (ka)^2 \approx 2\pi a^2.\end{aligned}\tag{1045}$$

Consideremos el potencial de la figura y calculemos la sección eficaz para bajas energías

Imagen Lateral – Pagina 232

$$V(r) \begin{cases} -V_0 & 0 < r < a \\ 0 & r \geq a \\ \infty & r \leq 0 \end{cases}\tag{1046}$$

Para bajas energías consideramos que $l = 0$ y supongamos la parte radial de la función de onda $u(r) = rR(r)$. Usando la ecuación de *Schrödinger*, tenemos:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - V_0 \right] u_1(r) &= Eu_1(r) \quad 0 < r < a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_2(r) &= Eu_2(r) \quad r \geq a, \\ u(r=0) &= 0 \quad r \leq 0, \end{aligned} \quad (1047)$$

La solución a la ecuación con la condición de frontera $u(r=0) = 0$ es

$$u(r) \begin{cases} u_1(r) = A \sin k_1 r & 0 < r \leq a \\ u_2(r) = B \sin k_2 r + \delta_0 & r > a \end{cases} \quad (1048)$$

donde definimos

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0), \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E. \quad (1049)$$

supongamos que en $r = 0$ las funciones son continuas y suaves, entonces:

$$\left. \frac{u_2(r)}{u_2(r)'} \right|_{r=0} = \left. \frac{u_1(r)}{u_1(r)'} \right|_{r=0} \quad (1050)$$

Por tanto:

$$\begin{aligned} \tan k_2 a + \delta_0 &= \frac{k_2}{k_1} \tan k_1 a \\ &= \frac{\tan k_2 a + \tan \delta_0}{1 - \tan k_2 a \tan \delta_0} \end{aligned} \quad (1051)$$

Resolviendo para $\tan \delta_0$:

$$\begin{aligned} \tan \delta_0 &= \frac{k_2 \tan k_1 a - k_1 \tan k_2 a}{k_1 + k_2 \tan k_1 a \tan k_2 a} \\ \sin^2 \delta_0 &= \frac{1}{1 + \tan^2 \delta_0} \end{aligned} \quad (1052)$$

La sección eficaz es

$$\sigma = \frac{4\pi}{k_2^2} \sin^2 \delta_0. \quad (1053)$$

Supongamos energías pequeñas $E \geq 0$ i.e. $k_2 a \ll 1$, es decir, la partícula pasa cerca del pozo y es dispersada. Consideremos un pozo poco profundo i.e. $E + V_0$ pequeño, entonces $k_1 a \ll 1$. El corrimiento de fase se aproxima

$$\tan \delta_0 = \frac{k_2 k_1 a - k_1 k_2 a}{k_1 + k_2 k_1 a \times k_2 a} \approx 0$$

$$\sigma \approx 0$$
(1054)

Prácticamente es como si no existiera dispersión, no hay pozo de potencial.

Para el caso en el cual $V_0 \rightarrow \infty$, un pozo de potencial muy profundo, entonces

$$\tan k_2 a \approx -\tan k_2 a \approx -k_2 a$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k_1^2} \sin^2 \delta_0 \approx +\frac{4\pi}{k_1^2} k_2^2 a^2$$

$$\approx 4\pi a^2$$
(1055)

aproxima a esfera dura.