
CURSO BÁSICO DE FÍSICA TEÓRICA

Volumen 3: Física Teórica 2 [Mecánica Cuántica]

E.F. Lavia

versión 0.1

10 de octubre de 2020

Contenidos

1	Introducción	1
1.1	El experimento de Stern-Gerlach	1
1.1.1	Polarización de luz	3
1.1.2	El formalismo	5
1.2	Algebra?	6
1.2.1	Operadores	8
1.2.2	Sandwichs	8
1.2.3	Producto externo	9
1.3	Bases	11
1.3.1	Autokets y autovalores	11
1.3.2	Combinación lineal de autoestados	13
1.3.3	Operadores y matrices	14
1.3.4	Cambio de base	15
1.3.5	Representación diagonal	17
1.3.6	Representaciones canónicas	17
1.4	Sistemas de spín 1/2	19
1.4.1	Cambio de base	21
1.4.2	Mediciones y probabilidades	22
1.4.3	Valor de expectación	23
1.4.4	Conmutadores	23
1.4.5	Degeneración	24
1.4.6	Postulados de la mecánica cuántica	27
1.4.7	Operador de dispersión	28
1.4.8	Espectro continuo	30
1.4.9	Midiendo y otras representaciones. Función de onda	31
1.4.10	Operador de traslación	33
1.4.11	\mathbf{p} en la representación \mathbf{x}	37
1.4.12	Cambio entre representaciones \mathbf{x} y \mathbf{p}	38
1.4.13	Corchetes de Poisson versus conmutadores	40
2	Dinámica cuántica	41

2.1	Casos sencillos de solución de $U(t, t_o)$	43
2.1.1	Soluciones útiles	44
2.1.2	Evolución de valores de expectación	45
2.1.3	Relaciones de conmutación	46
2.1.4	La ecuación de Schrödinger	47
2.1.5	Representación de Heisenberg	49
2.1.6	Teorema de Ehrenfest	54
3	El oscilador armónico	57
3.0.1	El estado fundamental $\langle 0 \rangle$	59
3.0.2	Interferencia en experimento de Young	64
3.0.3	Cambio de cero del potencial	66
3.0.4	Caso del EM y la invariancia de gauge	68
3.1	El propagador	70
3.2	Integrales de camino de Feynmann	72
4	Introducción al momento angular (rotaciones)	79
4.0.1	No conmutatividad de las rotaciones clásicas	80
4.1	Rotaciones cuánticas	81
4.1.1	Ángulos de Euler	84
4.1.2	Autoestados y autovalores de J	86
4.1.3	La normalización de J_{\pm}	89
4.1.4	Elementos de matriz de $\mathcal{D}(R)$	90
4.1.5	Forma explícita del operador $\mathcal{D}(R)$	91
4.2	Formalismo de spinores de Pauli	92
4.2.1	Ejemplo	96
4.2.2	Rotaciones en sistemas con $j = 1$	96
4.2.3	Teleportación. Tópico para entretener	99
4.3	Momento angular orbital	101
5	Suma de momentos angulares	109
5.1	Armónicos esféricos como matrices de rotación	109
5.2	Suma de momentos angulares	110
5.2.1	Cambio entre bases	112
5.2.2	Teoría formal de suma de momentos angulares	113
5.3	Coeficientes de Clebsh-Gordan	117
5.3.1	Uso de la tabla de Clebsh-Gordan	119
5.3.2	Suma de \mathbf{L} y \mathbf{S}	122
5.4	Operadores vectoriales	123
5.5	Operadores tensoriales	124
6	Teorema de Wigner-Eckart	126

6.1	Teorema de proyección	128
6.1.1	Aplicación del teorema de proyección	130
7	Simetrías en mecánica cuántica	133
7.0.1	Transformaciones discretas	134
7.0.2	Teorema	138
7.0.3	Reglas de selección de paridad Π	139
7.1	Inversión temporal (reversión de movimiento)	140
7.1.1	Operadores ante $\hat{\Theta}$	143
7.1.2	Función de onda	146
7.1.3	Reversión de movimiento sobre \mathbf{J}	146
7.1.4	Reversión para sistemas de spin $1/2$	147
7.1.5	Teorema	150
8	Métodos perturbativos	151
8.0.1	Caso degenerado	156
8.1	Efecto Stark	160
8.1.1	Corrimiento de la energía a orden 2 (con degeneración)	162
8.2	Estructura fina del átomo de hidrógeno	164
9	Partículas idénticas	169
9.0.1	Permutación	170
9.1	Postulado de simetrización	172
9.1.1	Principio de exclusión de Pauli	172
9.1.2	Sistema de dos electrones de spin $1/2$	173
9.2	El átomo de helio	174
10	Picture de interacción y perturbación dependiente del tiempo	177
10.0.1	Evolución de los coeficientes	179
10.0.2	Método perturbativo (dependiente del tiempo)	179
10.0.3	Transiciones entre autoestados del hamiltoniano H_0	180
10.0.4	Ejemplo: potencial constante encendido abruptamente	181
10.1	Scattering: orden 1	182
10.2	El método variacional	183
10.2.1	Scattering a orden dos y OFPT	183
10.2.2	Perturbación armónica	184
10.3	Despoblamiento de estados iniciales	186
10.3.1	Scattering sección eficaz	187
11	Introducción a la mecánica cuántica relativista	192
11.0.1	La ecuación de Klein-Gordon	193

11.0.2	La ecuación de Dirac	194
11.0.3	Ejemplo: partícula libre quieta	195
11.0.4	Energías negativas	196

A	Tensor de Levi-civita	199
----------	------------------------------	------------

Capítulo 1

Introducción

Este capítulo es una introducción al formalismo. Recordemos que el curso se basó fuertemente en el libro de Jon Jun Sakurai [bien escrito?]. La mecánica cuántica relativista desemboca en la teoría de campos. Decir quizás que hay que, de alguna manera, olvidar todo lo anterior de la física clásica (hasta nuevo aviso) porque esto conviene pensarlo de otra manera, será más abstracto. Los sistemas, que serán muy sencillos, tendrán propiedades muy particulares, que luego se conectarán con la física clásica en el límite apropiado. La mecánica cuántica relativista añade más información además de corregir la clásica.

1.1 El experimento de Stern-Gerlach

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

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

donde acá está metido el magnetón de Bohr

$$\mu_B = -\frac{e\hbar}{2m_e c}.$$

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

$$f_z \propto -\mu_z$$



Figura 1.1

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

Uso átomos de plata que son neutros eléctricamente así no tengo efecto Hall.



Figura 1.2

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

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

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

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

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

Los spines en S_x, S_z son incompatibles entre sí. Al seleccionar $(S_z, +)$ en el segundo SG se destruye la información previa sobre S_z . No podemos ya garantizar que S_z sea nula. El tercer experimento da al traste con

Al medir uno la información cuántica del otro se pierde.

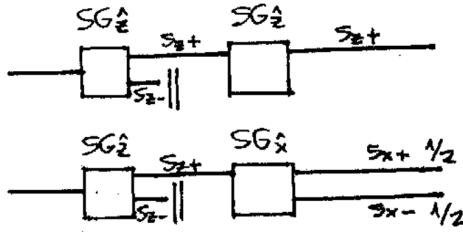


Figura 1.3

la idea de que podamos pensar en espín como un ente vectorial en 3D. Mediante una analogía con polarización de luz vemos que es necesario meter al espín en un espacio vectorial de dimensión 2 pero con coeficientes complejos.

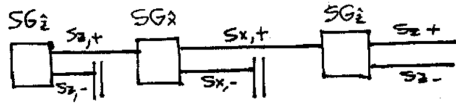


Figura 1.4

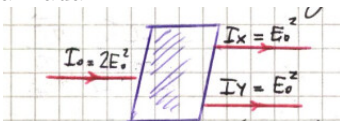
Estos esquemas de las últimas figuras operan como polarizadores; permiten separar las partículas seleccionando por espín.

1.1.1 Polarización de luz

Consideremos una onda electromagnética en la dirección de \hat{z} , polarización en \hat{x} ,

$$\mathbf{E} = E_0 \hat{x} e^{i(kz - \omega t)} \quad \mathbf{E} = E_0 \hat{y} e^{i(kz - \omega t)}$$

y la polarización en \hat{y} . Si incidimos en un cristal birrefringente con luz polarizada



se tienen dos estados. Este sistema es similar a lo que se vio previamente. A la salida tengo dos estados. Lo que entrará será

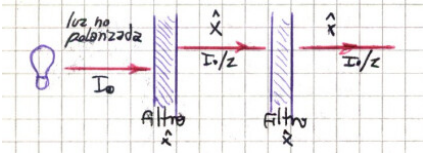
$$\mathbf{E} = E_0(\hat{x} + \hat{y}) e^{i(kz - \omega t)}$$

y la analogía me lleva a que polarización de luz en \hat{x} y \hat{y} equivalen a S_z^+ y S_z^- , respectivamente. Repetimos los experimentos, pero ahora con luz.

Matemáticamente el filtro en \hat{x} es un ente que lo que hace es proyectar la luz entrante en \hat{x} .

Los tres casos entonces corresponden a:

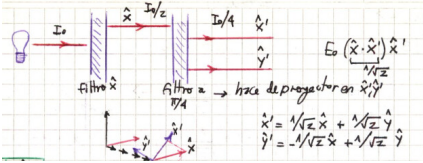
1



No hay efecto neto. Opera como un filtro en \hat{x} del modo $(\mathbf{E} \cdot \hat{x}) \hat{x}$ y lo que sale es $E_0 \hat{x} e^{i(kz - \omega t)}$

2

En este caso el filtro a $\pi/4$ lo que hace es proyectar en \hat{x}' , \hat{y}'



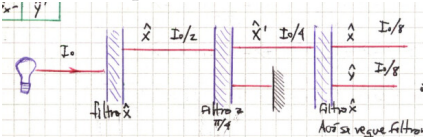
Se tienen a la salida $E_0 (\hat{x} \cdot \hat{x}') \hat{x}$ donde

$$\hat{x}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \quad \hat{y}' = -\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y},$$

de manera que S_x^+ equivale a \hat{x}' y S_x^- equivale a \hat{y}' .

3

Aquí se ve que filtrar dos veces es incompatible con el electromagnetismo. A la salida se tiene $E_0 (\hat{x}' \cdot \hat{x}) \hat{x}$, de modo que aparece una componente que no estaba presente.



Entonces

$$\mathbf{E} = E_0 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} \cos((kz - \omega t)) + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \cos((kz - \omega t)) \right) = E_0 \left(\frac{\hat{x} \pm i \hat{y}}{\sqrt{2}} \right) e^{i(kz - \omega t)}$$

de manera que con un cristal birrefringente que separe izquierda-derecha en luz polarizada circular puedeo continuar la equivalencia $S_y^+ \equiv \text{right}$ y $S_y^- \equiv \text{left}$ y tenemos seis estados pero son solo dos los independientes.

Hacen falta vectores complejos para describir sistemas cuánticos. Ya en este sencillo caso de analogía luz-spin vemos que la descripción completa del problema no puede hacerse en términos de vectores con coeficientes reales. Necesitamos un espacio complejo.

El problema del spin es sencillo porque es discreto y de dos estados.

La amplitud de probabilidad será algo como

$$A \sim \hat{i} \cdot \hat{j}$$

donde j es el filtro. Luego la probabilidad es

$$P = |A|^2 = (\hat{i} \cdot \hat{j})(\hat{i} \cdot \hat{j})^*.$$

Para operar construiremos un formalismo.

1.1.2 El formalismo

El formalismo para la mecánica cuántica incluirá

- Estados
- Productos entre estados (propiedades matemáticas)
- Operadores, que llevan a observables
- Postulados de la mecánica cuántica

Para el caso del spin se definen

$$S = \frac{1}{2} S_z^+, S_z^-$$

y se definen los kets $|\rangle$ que tendrán toda la información. Inventados por P.A.M. Dirac. No son otra cosa que vectores con coeficientes complejos. La base de polarización (estados) será

$$|S_z; +\rangle \quad |S_z; -\rangle$$

y entonces $|S_x; +\rangle$ es una combinación lineal de 1,2 anteriores. Así

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle$$

$$|S_x; -\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle$$

$$|S_y; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle$$

$$|S_y; -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z; +\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |S_z; -\rangle$$

aunque probar esto no es ninguna boludez.

1.2 Álgebra?

El ket contiene toda la información cuántica del estado. Da el estado físico del sistema. Cumplen las siguientes propiedades

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

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

$$\begin{aligned} |a\rangle, |a'\rangle &\Leftrightarrow \langle a|, \langle a'| \\ |a\rangle + |b\rangle &\Leftrightarrow \langle a| + \langle b| \quad c|a\rangle \Leftrightarrow c^* \langle a| \\ c_a|a\rangle + c_b|b\rangle &\Leftrightarrow c_a^* \langle a| + c_b^* \langle b| \end{aligned}$$

Se define también un producto interno según

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

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

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

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

y habiendo definido esta base escribimos, por ejemplo

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

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

y del mismo modo

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

La trasposición opera como en álgebra, transmutando de ket a bra y viceversa.

$$\hat{x}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\hat{x}')^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 0)$$

El producto interno tiene las siguientes propiedades:

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

La primera propiedad busca que podamos darle significado probabilístico. El producto $\langle \alpha | \alpha \rangle$ da la norma al cuadrado.

EJEMPLO 2.1 Veamos que el estado de spin S_x^+ está normalizado

Para ello escribimos su expresión en términos de los estados S_z y aplicamos dual conjugado. Luego,

$$\langle S_x; + | S_x; + \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_z; + | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_z; - | \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} | S_z; + \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} | S_z; - \rangle \right)$$

$$\langle S_x; + | S_x; + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_z; + | S_z; + \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_z; + | S_z; - \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_z; - | S_z; + \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle S_z; - | S_z; - \rangle = 1$$

Recordemos que en la formulación de mecánica cuántica que se utilizó en anteriores cursos, F4, se tenían funciones de onda que se pueden ver como una notación relacionada con kets y bras a través del producto interno.

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \int d^3x \phi_\beta^*(\mathbf{x}) \phi_\alpha(\mathbf{x})$$

1.2.1 Operadores

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

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

un operador sobre un ket da otro ket y sobre un bra da otro bra. Notemos que en este último caso opera a izquierda. Por el momento se trabajará con operadores lineales.

La transformación entre operadores se da con

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

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

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

En mecánica cuántica todos los observables serán representados por operadores hermíticos.

Se dan

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

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

1.2.2 Sandwichs

Coloquialmente encerrar un operador operando sobre un ket (bra) con un bra (ket). Se obtiene un escalar

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

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

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

y de manera equivalente

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

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

Las mediciones se pensarán como proyectar sobre autoestados.

1.2.3 Producto externo

Es un nuevo tipo de producto entre vectores.

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

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

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

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

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

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

puesto que $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$, de manera que aplicar dos veces un proyector no cambia nada. El proyector Λ_α sobre un ket $|\beta\rangle$ selecciona la parte de $|\beta\rangle$ en la dirección de $|\alpha\rangle$. Nos dice cuanto de $|\beta\rangle$ está en la dirección de $|\alpha\rangle$. Luego,

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

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

EJEMPLO 2.2 Traspuesto de un producto externo

Queremos ver que si $X = |\beta\rangle \langle \alpha|$, entonces $X^\dagger = |\alpha\rangle \langle \beta|$. Hacemos operar sobre estados arbitrarios, y sabiendo que valen

$$\langle a | X | b \rangle = \langle b | X^\dagger | a \rangle^* \quad \langle a | X | b \rangle^* = \langle b | X^\dagger | a \rangle$$

se tiene, reemplazando la definición de X ,

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

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

y comparando este último resultado con el de la línea anterior, vemos que se verifica

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

EJEMPLO 2.3 Ejemplo sencillo 2D

Consideramos versores en el plano, vectores columna,

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \hat{Y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

que en sus versiones dagueadas pasan a ser vectores fila

$$\hat{X}^\dagger = (1 \ 0) \quad \hat{Y}^\dagger = (0 \ 1)$$

Luego, los productos que podemos hacer corresponden a las operaciones matriciales de vector por vector, resultando en número o matriz dependiendo del orden

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

donde instamos al lector a que note la diferencia de dimensión en los resultados. En la notación de Dirac estos versores serían $|x\rangle, |y\rangle$ y sus correspondientes bras. Luego,

$$\langle x | x \rangle = \langle y | y \rangle = 1, \quad \langle x | y \rangle = \langle y | x \rangle = 0$$

y las matrices serían los proyectores

$$P_x \equiv |x\rangle \langle x|, \quad P_y \equiv |y\rangle \langle y|.$$

Para un estado arbitrario $|\alpha\rangle = \alpha_x |x\rangle + \alpha_y |y\rangle$, si uso el proyector P_x se tendrá

$$P_x |\alpha\rangle = (|x\rangle \langle x|)(\alpha_x |x\rangle + \alpha_y |y\rangle)$$

$$P_x |\alpha\rangle = \alpha_x |x\rangle \langle x | x \rangle + \alpha_y |x\rangle \langle x | y \rangle = \alpha_x |x\rangle.$$

Del mismo modo se obtiene $P_y |\alpha\rangle = \alpha_y |y\rangle$. Si sumo ambos proyectores obtengo la identidad

$$(P_x + P_y) |\alpha\rangle \equiv I |\alpha\rangle = |\alpha\rangle,$$

y vemos que la identidad no hace nada.

Los kets $|\alpha\rangle$ *viven* en un espacio vectorial de Hilbert con dimensión N , donde N lo dicta el número de posibles estados de cada sistema físico. Una partícula de spín 1/2 sólo tiene dos estados: up y down.

Hay otro producto más, entre dos bras o dos kets, que se llama producto tensorial y se representa como

$$|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \quad \langle\alpha| \otimes \langle\beta|$$

que es un producto entre kets de espacios de Hilbert diferentes; el resultado no es ni un bra ni un ket. Digamos que es una notación.

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

1.3 Bases

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

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

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

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

que es la delta de Kronecker.

Así, los kets se definen normalizados, dado un ket

$$|\phi\rangle = a |1\rangle + b |2\rangle + c |3\rangle$$

se lo normaliza con

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\langle\phi|\phi\rangle} |\phi\rangle$$

lo que significa que

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

Si tenemos un ket normalizados, $|\phi\rangle = a |1\rangle + b |2\rangle$ y su bra $\langle\phi| = a^* \langle 1| + b^* \langle 2|$, entonces

$$\begin{aligned} \langle\phi|\phi\rangle &= (a^* \langle 1| + b^* \langle 2|)(a |1\rangle + b |2\rangle) = \\ &= a^* a \langle 1 | 1 \rangle + b^* a \langle 2 | 1 \rangle + a^* b \langle 1 | 2 \rangle + b^* b \langle 2 | 2 \rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1 \end{aligned}$$

1.3.1 Autokets y autovalores

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

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

lo cual lleva al problema espectral

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

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

Lo siguiente debiera ser amparado por un título como “propiedades de operadores hermíticos”.

Deducimos entonces que

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

Como ejemplo de A citemos

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

de manera que

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

Me gusta más la otra forma, que es meter otro a'' así

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

de manera que como

$$(a' - a''^*)\langle a''|a'\rangle = 0,$$

si $|a'\rangle = |a\rangle$ entonces $a' = a'^*$ y los autovalores son reales. En cambio si $|a'\rangle \neq |a''\rangle$ se tiene $a' \neq a''$ entonces $\langle a''|a'\rangle = 0$ y los autoestados del operador son perpendiculares. Ya está abajo esto.

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

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

pues

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

y además

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

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

y ahora conjugando

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

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

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

O sea, hemos probado que los autovectores correspondientes a diferentes autovalores son ortogonales.

1.3.2 Combinación lineal de autoestados

Podemos escribir

$$\langle a'' | a' \rangle = \delta_{a' a''}$$

que es la delta de Kronecker. Postulo que forman una base completa, y que un estado $|\alpha\rangle$ se puede escribir en función de la base $|a_i\rangle$ de esta forma

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} C_{a'} |a'\rangle.$$

Ahora quisiéramos ver quién es el coeficiente $C_{a'}$. Para ello multipliquemos por un bra arbitrario

$$\langle a_j | \alpha \rangle = \sum_{i=1}^N C_i \underbrace{\langle a_j | a_i \rangle}_{\delta_{ij}} = C_j,$$

de modo que es

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

o bien, en términos del operador Λ [?],

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

de modo que si la base es completa debe ser

$$\sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i| \equiv \mathbb{1}.$$

Todos estos resultados surgen de suponer que los autoestados son una base completa. Es análogo a la proyección de un vector en un sistema coordenado: $\mathbf{V} = \sum_i (\mathbf{V} \cdot \hat{e}_i) \hat{e}_i$.

Asimismo, considerando la normalización de estados

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 = \langle \alpha | \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle = \sum_{a'} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle$$

o bien

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 = \sum_{a'} C_{a'}^* C_{a'} = \sum_{a'} |C_{a'}|^2.$$

1.3.3 Operadores y matrices

Un operador se puede representar matricialmente como

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

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

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

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

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

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

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

y entonces

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

de modo que

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

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

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

La traza será

$$\text{tr}(A) = \sum_{i=1}^N \langle a_i | A | a_i \rangle.$$

1.3.4 Cambio de base

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

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

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

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

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

EJEMPLO 3.1 Ejercicio 2

Tenemos la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, o sea un espacio de Hilbert de dimensión 2. Se considera ortonormal de manera que

$$\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1 \quad \langle + | - \rangle = 0$$

Luego, se tiene

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|)$$

Los elementos de matriz serán

$$(S_x)_{11} = \langle + | (S_x) | + \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle + | (|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|) | + \rangle = 0,$$

dado que ambos miembros dan $\langle + | - \rangle$. Asimismo,

$$S_x |+\rangle = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|) |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |-\rangle$$

y

$$S_x |-\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle.$$

Matricialmente

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

de manera que

$$S_x |+\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

EJEMPLO 3.2 Ejercicio 6

Tenemos un espacio de kets generado por $\{|a'\rangle\}$ ortogonales, siendo A hermítico, de manera que los a son reales.

i) Queremos probar que $\Pi_{a'}(A - a'\mathbb{1})$ es el operador nulo. Luego, supongamos que

$$\Pi_{a'}(A - a'\mathbb{1}) \equiv O$$

y entonces verificará

$$\langle a' | O | a'' \rangle = O_{a'a''} = 0.$$

Tomemos

$$\Pi_{a'}(A - a'\mathbb{1})|a''\rangle = \Pi_{a'}A|a''\rangle - a'\mathbb{1}|a''\rangle = \Pi_{a'}(|a''\rangle + a'|a''\rangle)$$

pero lo que opera sobre el ket es nulo.

Por otra parte, como $(A - a_n\mathbb{1})|a''\rangle$ se puede escribir

$$(A - a_{n_2}\mathbb{1})(A - a_{n_1}\mathbb{1})|a''\rangle(a'' - a_n)$$

y sigue pasadno de modo que al final se obtiene

$$|a''\rangle \Pi_{a'}(a'' - a').$$

ii) Y ahora, qué significa el siguiente operador

$$\Pi_{a' \neq a''} \frac{(A - a''\mathbb{1})}{(a' - a'')}$$

Aplicamos a un ket $|a\rangle$,

$$\Pi_{a' \neq a''} \frac{(A - a''\mathbb{1})}{(a' - a'')}|a\rangle = \Pi_{a' \neq a''} \frac{(a - a'')}{(a' - a'')}|a\rangle$$

y será nulo sí y sólo si $a \neq a''$, de manera que es una construcción de la delta de Kronecker,

$$\Pi_{a' \neq a''} \frac{(A - a''\mathbb{1})}{(a' - a'')} = \delta_{aa'}|a'\rangle$$

Es un proyector de todos los elementos en $|a'\rangle$ lo que siempre da cero para los de la base salvo cuando es $a' = a$.

EJEMPLO 3.3 Ejercicio 8

Consideramos $\mathbf{S} \cdot \hat{n}$ donde $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ o sea un vector de operadores y el versor es el usual de esféricas en términos de los ángulos.

$$\hat{n} = (\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta).$$

EJEMPLO 3.4 Ejercicio 11

Consideremos la matriz M hermítica y la base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ que tendrá por ello autovalores reales y autovectores ortogonales.

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Los autovalores saldrán de

$$\left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{pmatrix} \right| = -\lambda(\lambda^2 - 1) = 0$$

que dará $\lambda = 0, 1, -1$. Los autovectores salen de resolver

$$\begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \\ v_3^{(1)} \end{pmatrix} = 0$$

y haciendo $v_2^{(1)} = 0$ se tiene $v_1^{(1)} = -v_3^{(1)}$ y luego

$$v^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

con $\langle v^{(1)} | v^{(1)} \rangle = 1$ y así siguiendo con los otros vectorcillos, resulta

$$A = [v^{(1)} v^{(2)} v^{(3)}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1.3.5 Representación diagonal

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

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

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

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

1.3.6 Representaciones canónicas

Podemos representar una base como vectores canónicos

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

luego

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

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

y por DC se tiene

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

y

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

que es un escalar. El producto entre otros dos estados arbitrarios

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

otra vez un escalar.

Para un operador X se tiene la siguiente representación

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

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

$$X = \sum_i^N \sum_j^N X_{ij} |a_i\rangle \langle a_j|,$$

donde

$$|a_i\rangle \langle a_j| = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} (0 \dots 1 \dots 0).$$

Para un operador que actúa sobre un estado, dando otro estado, se tiene

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

que es el producto de una matriz por un vector

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

Para el producto externo será

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

y este producto de brakets es la versión matricial del operador

$$\begin{pmatrix} \langle a_1 | \beta \rangle \langle a_1 | \alpha \rangle^* & \langle a_1 | \beta \rangle \langle a_2 | \alpha \rangle^* & \dots \\ \langle a_2 | \beta \rangle \langle a_1 | \alpha \rangle^* & \langle a_2 | \beta \rangle \langle a_2 | \alpha \rangle^* & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

En la base en la cual un operador es diagonalizable resulta sencilla su matriz:

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

en términos del proyector.

Los elementos usados en el formalismo (bras, kets, etc.) pueden pensarse como vectores (fila o columna) y matrices.

1.4 Sistemas de spin 1/2

Hay dos estados posibles de spin,

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

de manera que la dimensión del espacio vectorial es 2. Entonces, la identidad será

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

Luego, en la representación de S_z se tiene

$$S_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \quad S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle,$$

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

que viene de que el operador es

$$S_z = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|).$$

Luego,

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

donde $S_- = S_+^\dagger$ son operadores de subida y de bajada. que actuarán subiendo/bajando el spin o dando el ket nulo. Así,

$$S_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle \quad S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle \quad S_+ |+\rangle = S_- |-\rangle = 0$$

En la representación vectorial serán

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

de manera que los proyectores

$$\Lambda_+ = |+\rangle \langle +| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Lambda_- = |-\rangle \langle -| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

luego

$$\Lambda_+ + \Lambda_- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Los operadores \pm serán

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

de modo que

$$S_+ |-\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar |+\rangle.$$

Finalmente,

$$|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_x; +\rangle \pm |S_x; -\rangle).$$

1.4.1 Cambio de base

Dados dos conjuntos $\{|a'\rangle\}, \{|b'\rangle\}$ base ortonormales y completos existe un \widehat{U} unitario tal que :

$$U^+U = UU^+ = \mathbb{1} \quad \text{con} \quad |b_i\rangle = U |a_i\rangle$$

Este operador de cambio de base será

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

y actuando sobre un elemento de la base a ,

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

Este operador U cumple la función de pasar entre bases

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

o bien

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

Notemos que

$$UU^{\dagger} = \sum_{k,\ell} |a^k\rangle \langle b^k | b^{\ell}\rangle \langle a^{\ell}| = \sum_k |a^k\rangle \langle a^k| = \mathbb{1}$$

donde del segundo al tercer miembro se pasa por la ortogonalidad de la base b .

Veamos cómo transforma un ket genérico, usando que

$$\langle a^k | U | a^{\ell}\rangle = \langle a^k | \sum_j |b^j\rangle \langle a^j | a^{\ell}\rangle = \langle a^k | b^{\ell}\rangle.$$

Un ket arbitrario se escribirá como una combinación lineal de la base a , es decir,

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

de modo que

$$\langle b_k | \alpha\rangle = \sum_{\ell} \langle b_k | a_{\ell}\rangle \langle a_{\ell} | \alpha\rangle = \sum_{\ell} \langle a_k | U^+ | a_{\ell}\rangle \langle a_{\ell} | \alpha\rangle = \langle a_k | U^+ | \alpha\rangle$$

e identificamos

$$\langle b^k | a^{\ell}\rangle = \langle a_k | U^+ | a_{\ell}\rangle$$

que nos convierte de

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

Esta es la relación consistente con la anterior en términos de U [?].

Por otra parte, considerando otro operador X

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

o bien,

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

lo cual implica que

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

que es una transformación de similitud.

En matrices se puede poner como:

$$X'_{kl} = U^\dagger_{km} X_{mn} U_{nl}.$$

1.4.2 Mediciones y probabilidades

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

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

Puede verse pictóricamente la medición así:

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

el proceso de medición hace saltar $|\alpha\rangle$ hacia $|a'\rangle$, siendo el resultado de la medida el autovalor a' . Antes de medir no puedo saber a qué estado saltará y tampoco en qué estado se hallaba. Si antes de medir se hallaba en un autoestado, continúa manteniéndose allí

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

Lo que se puede determinar es la probabilidad de que se halle en cierto autoestado a' de acuerdo con

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

Si $P = 1$ se halla en $|a'\rangle$ antes de saltar, si $P = 0$ no se halla en $|a'\rangle$ antes de saltar. Este valor de Prob es mayor igual a cero y se verifica

$$\sum_{a'} \text{Prob}_{a'} = 1$$

si la probabilidad está correctamente normalizada.

Notamos que se puede escribir

$$P = \langle a' | \alpha \rangle \langle \alpha | a' \rangle = \langle \alpha | \Lambda_{a'} | \alpha \rangle$$

La base que diagonaliza a un operador es la de sus autoestados.

1.4.3 Valor de expectación

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

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

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

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

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

Esto último tiene el sentido de una especie de promedio ponderado. Hasta repetir el cansancio el experimento el resultado tenderá a este valor de expectación.

1.4.4 Conmutadores

Dados dos operadores A, B , se definen, el conmutador

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

y el anticonmutador

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

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

TEOREMA:

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

demostración:

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

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

entonces

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

y B es diagonal en $\{|a'\rangle\}$. Luego, se ve que escribiendo B en términos de esta base y aplicando sobre un estado de la misma

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

por lo tanto la base de A diagonaliza a B , pero los autoestados tienen todos sus autovalores diferentes.

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

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

Si dos operadores no conmutan entonces no hay base común para ambos. Para ver que se debe cumplir esto supongamos que sí hay base común. Entonces, se tendrán

$$AB | a', b' \rangle = b' A | a', b' \rangle = b' a' | a', b' \rangle$$

$$BA | a', b' \rangle = a' B | a', b' \rangle = a' b' | a', b' \rangle$$

y estos dos renglones son iguales puesto que números escalares sí conmutan. Luego,

$$AB | \rangle = BA | \rangle$$

y entonces como esto significa que conmutan y partimos de la presunción en contrario, con lo cual este absurdo surge de asumir base en común; no la tienen. Por ende no los puedo medir con precisión. La medida del segundo afecta a la medición del primero.

1.4.5 Degeneración

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

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

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

Mejorar la matriz que está un asco

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

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

Con degeneración no puedo conch

indetermina

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

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

Dado un set CCOC, $\{A, B, C, D\}$, se etiquetarán $|K'\rangle \equiv |a'b'c'd'\rangle$ los autoestados, que es una variable colectiva. Se cumplirán

$$\langle K | K' \rangle = \delta_{KK'} = \delta_{aa'} \delta_{bb'} \dots$$

$$\sum_{K'} |K'\rangle \langle K'| = \mathbb{1}$$

Las únicas cosas que tiene sentido medir en MC son las variables asociadas a operadores en un CCOC.

Sean A, B compatibles sin degeneración, y consideremos la siguiente notación pictórica donde arriba digo qué mido y abajo qué obtengo. Entonces

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

Veo que midiendo alternadamente uno y otro no salgo del autoestado $|K'\rangle$.

En cambio si A, B son compatibles pero con degeneración en el autoestado a' [?] se tiene

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

Al medir A y obtener a' no tengo determinado el estado del sistema (medir A no me da información). Me hallaré en una CL de autoestados correspondientes al autovalor degenerado a' . Al medir luego B selecciono uno de los $|a'b'\rangle$ degenerados, el correspondiente a $b'(j)$ pues B no está degenerado. Puedo volver a medir A pues el autoestado en que ha caído el sistema permanece incólume.

Operadores y observables

Entonces siendo A un operador se dice que es un observable si el operador es hermítico, con lo cual sus autovalores serán reales, y si el conjunto de sus autoestados es una base. Usando la notación $|a, i\rangle$ para indicar un autoestado y su degeneración, se tiene una descomposición espectral

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

que se puede asociar a una matriz como

$$\begin{pmatrix} 1 & \dots & & \\ & 2 & & \\ \dots & & 2 & \\ & & & 3 \\ \dots & & & & \end{pmatrix}$$

Luego,

$$A = 1 |1, 1\rangle \langle 1, 1| + 2 (|2, 1\rangle \langle 2, 1| + |2, 2\rangle \langle 2, 2|) + \dots$$

El espacio de los operadores es N , finito. En el caso de $N \rightarrow \infty$ hay que sumar algunas restricciones (me pregunto si tiene que ver con alguna

regularización para evitar infinitos). Se dice que A es normal si verifica $[A, A^\dagger] = 0$.

1.4.6 Postulados de la mecánica cuántica

1. El estado de un sistema, a tiempo fijo, lo definimos con un ket $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ (un vector en un espacio vectorial de Hilbert) y con $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$
 - Dualidad (ir de $|\ \rangle \leftrightarrow \langle \ |$)
 - Superposición lineal
 - Productos
2. Asociamos a propiedades físicas (observables) operadores hermíticos \hat{A} que operan sobre los kets. Los autokets $|a\rangle$ verifican :

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

y $\{|a\rangle\}$ es base del espacio de kets. El operador se puede expresar como

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

3. Al medir una cantidad física representada por el observable \hat{A} obtenemos siempre un autovalor a' . Luego de medir, el estado del sistema es $|a\rangle$. Suponiendo un estado $|\Psi\rangle$, sobre el cual se mide A (obteniéndose a), se tendrá que inmediatamente después el estado de $|\Psi'\rangle$ según

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

Llevé al sistema a un autoestado de \hat{A} . Ahora quizás deba ahora normalizar, es decir

$$|\Psi'\rangle_{\text{norm}} = \frac{\langle a | \Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi' | \Psi'\rangle}} |a\rangle$$

donde $\langle \Psi' | \Psi'\rangle = \langle \Psi | P_a P_a | \Psi\rangle = \langle \Psi | P_a | \Psi\rangle$, siendo la última igualdad porque P_a es un proyector y su cuadrado es él mismo. El esquema de arriba representa la frase “proyectar sobre la base de autoestados”.

Dos posibilidades al medir. Si la probabilidad la nomenclamos como $P(a)$ que es la probabilidad de medir el estado a , entonces

No confundir la notación para proyector con la de probabilidad.

- Sin degeneración:

$$P(a) = |\langle a | \psi \rangle|^2$$

- Con degeneración:

$$P(a) = \sum_i |\langle a, i | \psi \rangle|^2$$

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

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

5. La evolución temporal la realiza H (el hamiltoniano), que nos llevará a la ecuación de Schrödinger.

6. Rotaciones espaciales (\mathbf{L}, \mathbf{S}) que son el momento angular y el spin. Pero el spin no tiene un análogo clásico.

Extrañamente el punto 4 estaba vacío. Raro.

1.4.7 Operador de dispersión

Se define la dispersión del operador A de acuerdo con

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

la dispersión será nula cuando el sistema se halle en un autoestado del operador \hat{A} . Será no nula en caso contrario, cuando no se halle en un autoestado. Luego la dispersión cualitativamente nos dice “qué tan lejos” del autoestado nos hallamos.

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

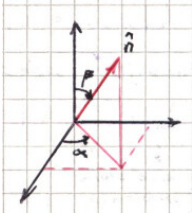
y la relación de dispersión generalizada

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

se probará [?].

EJEMPLO 4.1 Ejercicio 9 guía 1

Espacio de spines de dimensión 2. Base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. Consideramos un versor angular con ángulos α, β según se ilustra aquí abajo.



Del ejercicio 8 se sabe que

$$|\mathbf{S} \cdot \hat{n}; +\rangle = \cos(\beta/2) |+\rangle + \sin(\beta/2) e^{i\alpha} |-\rangle$$

Luego, como $\mathbf{S} \cdot \hat{n} |\mathbf{S} \cdot \hat{n}; \pm\rangle = \pm \hbar/2 |\mathbf{S} \cdot \hat{n}; \pm\rangle$ se tiene

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle S_x; + | \mathbf{S} \cdot \hat{n}; + \rangle|^2$$

donde usando que

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle)$$

nos conduce a

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2} |\cos(\beta/2) + \sin(\beta/2) e^{i\alpha}|^2$$

y usando $\alpha = 0, \beta = \gamma$ resultan en

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2} (1 + \sin \gamma).$$

En la parte b) se pide hallar $\Delta S_x^2 = \langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2$. Para ello usamos los hallazgos del ejercicio 2.

$$S_x = \frac{\hbar}{2} [|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|]$$

y luego

$$S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} [|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|] = \frac{\hbar^2}{4} \mathbb{1}$$

Entonces,

$$\langle S_x^2 \rangle = [\cos(\gamma/2) \langle +| + \sin(\gamma/2) \langle -|] S_x^2 [\cos(\gamma/2) |+\rangle + \sin(\gamma/2) |-\rangle]$$

Se puede ver que

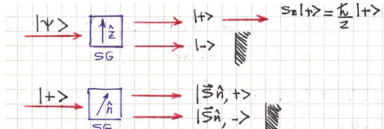
$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \gamma,$$

de manera que lo buscado es

$$(\Delta S_x)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \cos^2 \gamma.$$

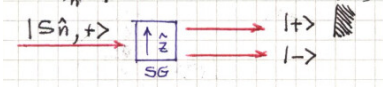
EJEMPLO 4.2 Ejercicio 10

Se tiene la situación ilustrada en las figuras bajo estas líneas



Por otra parte, la probabilidad será

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right)_{\hat{n}} = |\langle S_n, + | + \rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right)$$



Consiguientemente,

$$P\left(\frac{-\hbar}{2}\right)_{\hat{n}} = |\langle - | \mathbf{S} \cdot \hat{n}, + \rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)$$

y la intensidad final

$$I_f = I_0 \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right).$$

EJEMPLO 4.3 Ejercicio 12

Consideramos una base $\{|a', b'\rangle\}$ ortonormal de autoestados de $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$. La idea es que $[A, B] = C$ si $C|\Psi\rangle = 0 \forall |\Psi\rangle$. Entonces lo aplicamos a algo

$$(AB - BA)|\Psi\rangle = c|\Psi\rangle$$

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

1.4.8 Espectro continuo

Queremos pasar al continuo este formalismo. Pensamos en una única variable x , tal que

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle$$

y los kets de la base son los canónicos. En un rango $[a, b]$ descomponemos una función $f_N(x)$ en esta base

$$|f_N\rangle = f_N(x_1)|x^{(1)}\rangle + f_N(x_2)|x^{(2)}\rangle + \dots + f_N(x_N)|x^{(N)}\rangle,$$

o bien

$$|f_N\rangle = \sum_{i=1}^N f_N(x_i)|x^{(i)}\rangle$$

y queremos pasar al continuo utilizando $N \rightarrow \infty$ y $\Delta x \rightarrow 0$ con la constraint de que $N\Delta x \rightarrow cte$.

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

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

Debemos notar aquí que la delta correspondiente al caso discreto es la de Kronecker, mientras que la del caso continuo es la de Dirac.

1.4.9 Midiendo y otras representaciones. Función de onda

El operador que da la posición es \hat{x} de acuerdo con $\hat{x} |x'\rangle = x' |x'\rangle$. Se supone que es un conjunto completo. La representación de un cierto estado es

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

i.e. combinación lineal de todos los estados x' entre $-\infty$ y ∞ . No obstante puede ser que al medir, la física del instrumento o de la medida nos restrinja a una zona $x \pm \Delta$, de modo que

$$|\alpha\rangle = \int_{x-\Delta}^{x+\Delta} dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle,$$

donde

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

es la densidad de probabilidad de hallar a la partícula entre $(x - \Delta, x + \Delta)$ (en un dx en torno de x') y

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

Acá ya vamos viendo que hay bases de posición, spin, momento, etc.

es la amplitud de probabilidad. En el formalismo de Schrödinger la densidad de probabilidad es la función de onda

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

siendo este el vínculo entre la representación de Dirac y la función de onda, que nos permite ir de una a otra representación. La probabilidad de hallar al sistema en α será

$$|\Psi_\alpha(x)|^2 = \Psi_\alpha(x) \Psi_\alpha^*(x) = |\langle x | \alpha \rangle|^2.$$

Asimismo,

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

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

Para un elemento de matriz se tiene

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

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

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

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

y entonces

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

En forma análoga tenemos la representación de momento;

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

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

En el anterior curso de física donde se hizo algo de mecánica cuántica (F4) todo se llevó a cabo en la representación de posición. El formalismo de Dirac permite movernos cómodamente entre cualesquiera de estas representaciones.

Para la generalización a 3 dimensiones se usan operadores vectoriales, que no son otra cosa que tres operadores escalares.

$$\mathbf{x} |\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle ,$$

así $y |\mathbf{x}'\rangle = y' |\mathbf{x}'\rangle = y' |x', y', z'\rangle$ con

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} d^3x |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|$$

y la delta de Dirac es

$$\langle \mathbf{x}'' | \mathbf{x}' \rangle = \delta^3(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') = \delta(x'' - x') \delta(y'' - y') \delta(z'' - z')$$

1.4.10 Operador de traslación

Este operador realiza una traslación infinitesimal. Se le pedirá

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

siendo este requerimiento intuitivamente adecuado para una traslación.

Nótese que dx' no es un operador, es el parámetro de la traslación.

Sobre un ket genérico será

$$T_{(dx')} |\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle .$$

Cumplirá las propiedades

- Unitariedad:

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

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

- Aditividad:

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

porque vale en mecánica clásica.

- Existencia de inverso:

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

- Existencia de la identidad, el que no hace nada. Límite a $\mathbb{1}$

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

Tenía anotado en relación con la unitariedad el asunto de la conservación de la probabilidad.

Se propone un¹

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

con \mathbf{K} un operador vectorial hermítico (notemos que τ no es hermítico). Para ver quién es éste operador se considera

$$T_{(dx')}^\dagger = \mathbb{1} + i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}',$$

y luego, a orden lineal, es $T_{(dx')}T_{(dx')}^\dagger \approx 1$ y

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

Comparando con mecánica clásica, y viendo que allí \mathbf{p} origina las traslaciones, entonces identificamos \mathbf{K} con \mathbf{p} . Se postuló que

$$\mathbf{K} = \frac{1}{\hbar}\mathbf{p},$$

y se ha visto a posteriori que esto funcionar.

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

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

y así

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

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

Partiendo del conmutador

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

entonces

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

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

$$[x, 1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'] = -i[x_i, K_j dx'_j] = -i[x_i, K_j]dx'_j = dx'_j$$

de lo cual se deduce que

$$\frac{dx'_i}{dx'_j} = -i[x_i, K_j] = \delta_{ij}$$

Hay que ver el carácter vectorial de estas cosas. dx es vectorial en realidad, pero no un operador.

En la carpeta el conmutador da sin la T , así que acá parece estar mal.

¹Es una especie de expansión de Taylor.

lo que conduce a

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

que es la incompatibilidad de posición y momento.

Pero las traslaciones en diferentes direcciones conmutan

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

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

donde recordamos que como el operador no es hermítico el autovalor no es necesariamente real.

Sumando infinitas traslaciones infinitesimales tenemos una traslación finita,

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

que en tres dimensiones será

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

donde se hace $dx' \equiv \Delta x'/N$ para el paso al continuo.

EJEMPLO 4.4 Ejercicio 15

Las partes a), b), c) están hechas en el libro de Sakurai. La dispersión resulta $\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ lo que es fácil de ver haciendo explícitamente la operación para un estado ψ . Se considera

$$\Delta A = A - \langle A \rangle_\psi.$$

Si A, B son observables, entonces

$$\langle \Delta A^2 \rangle_\psi \langle \Delta B^2 \rangle_\psi \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle_\psi|^2.$$

EJEMPLO 4.5 Ejercicio 16

Tenemos $\langle \Delta S_x^2 \rangle = \langle \Delta S_x^2 \rangle - \langle \Delta S_x \rangle^2$ con $|\psi\rangle = |+\rangle$ y escribimos S_x en la base de autoestados

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle \langle -| + |- \rangle \langle +|),$$

$$S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4} (|+\rangle \langle +| + |- \rangle \langle -|) = \frac{\hbar^2}{4} \mathbb{1}$$

y como es un Stern-Gerlach en \hat{x} y le mandamos partículas en \hat{z} ,

$$\langle S_x \rangle = \langle + | S_x | + \rangle = 0 \quad \langle S_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

y de la misma manera

$$\langle S_y \rangle = 0 \quad \langle S_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

Si queremos ahora probar la relación de incerteza generalizada, será

$$\frac{1}{4} |\langle [S_x, S_y] \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{4} |\langle S_z \rangle|^2 = \frac{\hbar^4}{16},$$

y luego

$$\langle (\Delta S_x)^2 \rangle_{|+\rangle} \langle (\Delta S_y)^2 \rangle_{|+\rangle} = \frac{1}{4} |\langle [S_x, S_y] \rangle_{|+\rangle}|^2,$$

vemos que se verifica la igualdad en la relación de incerteza.

EJEMPLO 4.6 Ejercicio 15 parte d)

Se tiene

$$\langle x' | \alpha \rangle = (2\pi d^2)^{-1/4} e^{i \langle p \rangle x' / \hbar - (x' - \langle x \rangle)^2 / (4d^2)}$$

y se pide

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

Son los valores medios

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

y

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \langle \alpha | p | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p' \langle \alpha | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle dp' = \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p' \langle \alpha | x' \rangle \langle x' | p' \rangle \langle p' | x'' \rangle \langle x'' | \alpha \rangle dp' dx' dx'' \end{aligned}$$

donde hemos introducido identidades, continuas, en estados de posición. Reacomodando las integraciones,

$$\langle p \rangle = \int \int dx' dx'' \frac{\psi^*(x') \psi(x'')}{2\pi\hbar} \int dp' p' e^{ip/\hbar(x' - x'')}$$

y haciendo aparecer explícitamente una derivada espacial (ayudados por la exponencial)

$$\langle p \rangle = \int \int dx' dx'' \frac{\psi^*(x') \psi(x'')}{2\pi\hbar} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \int dp' e^{ip/\hbar(x' - x'')}.$$

Luego, como la expresión de la delta de Dirac es

$$\delta(x' - x'') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' e^{ip'/\hbar(x' - x'')}$$

se tiene

$$\langle p \rangle = \int \int dx' dx'' \frac{\hbar}{i} \psi^*(x') \psi(x'') \delta(x' - x'') = \int dx' \psi^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \psi(x').$$

1.4.11 p en la representación x

Parece que la ecuación

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

que se escribió anteriormente, no es exacta. La carpeta no da más información al respecto. Se verifica en realidad que

Ahora se entiende el entuerto con la T que sobraba.

$$[x, T_{(dx')}] |x'\rangle = dx' T_{(dx')} |x'\rangle,$$

y usando la equivalencia de T a orden dx'^2 , podemos escribir

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

o bien, a primer orden siempre,

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

pero

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

y entonces

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

de manera que

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

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

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

y así

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

de modo que usando este resultado se tienen

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

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

de lo que se deduce

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

que es el resultado más importante de la sección. En la representación de x , el operador p es proporcional a la derivada.

1.4.12 Cambio entre representaciones x y p

Supongamos ahora que α es un autoestado de p .

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

esta es la función de onda. Asimismo,

$$\langle x' | \hat{p}^n | \alpha \rangle = -(i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \langle x' | \alpha \rangle.$$

Para dos estados

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

**Esto es un menudeo,
meter prosa entre medio.**

Entonces, se puede transformar entre x y p

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

y entonces,

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

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

$$\begin{aligned}\int \frac{1}{\langle x' | p' \rangle} \partial \langle x' | p' \rangle &= \int \frac{ip'}{\hbar} \partial x' \\ \log \langle x' | p' \rangle &= \frac{ip'x'}{\hbar} + Cte.\end{aligned}$$

Ahora escribimos la delta e integramos,

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

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

donde usamos la integral del handbook ver Apéndice I X

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

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

Entonces, los autoestados de p son ondas libres. Toda esta información la obtuvimos de suponer que p es el generador de las traslaciones. Con este escalar podemos cambiar entre representaciones. Usando esto podemos ver que $\Psi_\alpha(x')$ y $\Phi_\alpha(p')$ son transformadas de Fourier la una de la otra.

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

Suponiendo que queremos pasar entre representaciones dado un ket $|\alpha\rangle$, tenemos

$$\psi_\alpha(x') = \langle a' | \alpha \rangle \quad \langle p' | \alpha \rangle = \phi_\alpha(x')$$

y el cambio siempre implica escribir un “uno” apropiadamente,

$$\langle a' | \alpha \rangle = \int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' e^{ip'x'/\hbar} \phi_\alpha(p') = \psi_\alpha(x')$$

y entonces, consecuentemente,

$$\phi_\alpha(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' e^{ip'x'/\hbar} \psi_\alpha(x').$$

Notemos que la mecánica cuántica que desarrollamos ya sabe que ϕ y ψ son transformadas de Fourier entre sí, sin utilizar la ecuación de Schrödinger.

EJEMPLO 4.7 Ejercicio 18

S_y es un operador complejo. Luego

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Luego, dependiendo de la base que se utilice resultará

$$S_y|_{\text{base}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

EJEMPLO 4.8 Ejercicio 20

Se define $f(A)$ de modo que si $f(x) = \sum_j c_j x^j$ entonces se toma

$$f(A) \equiv \sum_{j=0}^{\infty} c_j A^j,$$

luego, si nos hallamos en autoestado de A estaremos entonces en autoestados de $f(A)$.

Si es $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$, será

$$A^j|a'\rangle = A^{j-1}A|a'\rangle = A^{j-1}a'|a'\rangle = a'^j|a'\rangle.$$

El elemento de matriz

$$\langle b''|f(A)|b'\rangle = \sum_{a'} \langle b''|f(A)|a'\rangle \langle a'|b'\rangle = \sum_{a'} f(a') \langle b''|a\rangle \langle a'|b'\rangle$$

y los dos últimos brackets son los datos conocidos. La parte b) es igual pero para el caso continuo.

1.4.13 Corchetes de Poisson versus conmutadores

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

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

o

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

Esta relación fue planteada por Dirac, quien vio que se podían deducir algunas cosas de la mecánica cuántica desde la mecánica clásica pasando de corchetes a conmutadores.

Capítulo 2

Dinámica cuántica

Queremos ver la evolución temporal de los kets. Para ello utilizaremos cierta convención. Un ket dependerá del tiempo lo cual se indicará con

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

notación que refiere al estado α que partió en t_0 al tiempo t . Luego $|\alpha, t = t_0\rangle \equiv |\alpha\rangle$. Pictóricamente

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

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

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

Entonces, un elemento de matriz $\langle b | U_{(t,t_0)} | a \rangle$ implica la probabilidad (amplitud) de que se tenga componente de b en el tiempo t del sistema que estamos considerando. El operador de evolución tendrá las propiedades

- Unitariedad

$$\begin{aligned} \langle \alpha, t_0, t | \alpha, t_0, t \rangle &= 1 \quad \forall t \\ \langle \alpha, t_0 | U^\dagger U | \alpha, t_0 \rangle &= 1 \quad \Rightarrow \quad U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1} \end{aligned}$$

para conservación de la probabilidad. Tiene que ser unitario.

- Linealidad

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

- Límite a $\mathbb{1}$ (identidad)

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

o bien

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

Una forma más general de escribir un U unitario es $U = e^{i\eta A}$. De aquí se ve más fácil que como $e^{i\eta A} e^{-i\eta A^\dagger} = 1$ una transformación unitaria infinitesimal es $U = 1 + i\eta A$ y $-dt/\hbar = \eta$.

Se propone entonces (infinitesimalmente) un

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

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

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

El hamiltoniano H es un operador ahora.

De esta forma

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

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{U_{(t+dt,t_0)} - U_{(t,t_0)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H U_{(t,t_0)}$$

y entonces

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

que es la ecuación para $U_{(t,t_0)}$. No podemos utilizar los métodos que usamos anteriormente porque en $U = N e^{i \int dt' H(t)/\hbar}$ [depende del tiempo?]. Supongmos que es $H \sim \mathbf{S} \cdot \mathbf{r}(\theta)$, se tiene en $t = 0$ es $\mathbf{r}(t) = \hat{z}$ y en $t = 5$ seg. es $\mathbf{r}(t) = \hat{y}$. Tenemos

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

que nos conduce a la ecuación de Schrödinger para kets

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

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

El concepto se ilustra en la figura siguiente

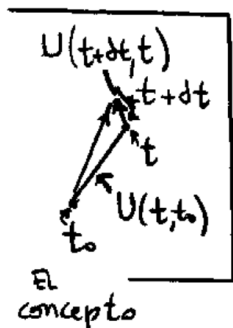


Figura 0.1

2.1 Casos sencillos de solución de $U(t, t_0)$

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

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

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

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

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

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

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

y esta es la serie de Dyson (del físico Freeman Dyson(.).) Esta es la solución formal general para el caso 3.

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

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

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

Para el caso 1 (pensamos una especie de serie de Taylor, que es un modo general de encarar este tipo de problemas de cosas no bien definidas) es simplemente

$$e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} = 1 - i\frac{H}{\hbar}(t-t_0) + \frac{(-i)^2}{2} \left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right)^2 + \dots + \frac{(-i)^n}{n!} \left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right)^n,$$

y por otra parte

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H - i\frac{H^2}{\hbar^2} \Delta t + \dots$$

y término a término coinciden; entonces probamos que la solución vale.

Para el caso 2, donde los hamiltonianos a diferentes tiempos conmutan entre sí, es decir $[H(t_1), H(t_2)] = 0$ la solución es

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

Esto no es una boludez. Al desarrollar Taylor la exponencial surge un problema

Si no conmutan los operadores no sé cómo armar el cuadrado.

$$A^2 = A(t)A(t'') \text{ o bien } A^2 = A(t'')A(t)$$

$$\left(\int H(t')dt'\right) \left(\int H(t'')dt''\right) \neq \left(\int H(t'')dt''\right) \left(\int H(t')dt'\right)$$

puesto que al operar es

$$\int dt' dt'' H(t')H(t'') \neq \int dt' dt'' H(t'')H(t')$$

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

2.1.1 Soluciones útiles

La solución que sirve es

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

La idea es escribir el $|\alpha\rangle$ del sistema y hallar un operador que conmute con el hamiltoniano y en cuya base escribo $|\alpha\rangle$,

$$|\alpha\rangle = \sum C_{a'} |a'\rangle \quad H |\alpha\rangle = \sum E_{a'} C_{a'} |a'\rangle$$

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

y trabajaremos con una solución útil ahora.

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

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

luego

$$U(t, t_0) |\alpha\rangle = \sum_{a'} e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle$$

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

$$\hat{H} |a'\rangle = E_{a'} |a'\rangle \quad \hat{A} |a'\rangle = a' |a'\rangle$$

Entonces operamos con el H para

$$U(t, t_0) = \sum_{a'} e^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} |a'\rangle \langle a' |$$

y así (quiero saber cómo trabaja en el tiempo $|\alpha\rangle$), le aplico el operador evolución

$$U(t, t_0) |\alpha\rangle = \sum_{a'} e^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle$$

$$|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} \langle a' | \alpha \rangle e^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} |a'\rangle = \sum_{a''} \sum_{a'} c_{a'} e^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} |a''\rangle \langle a'' | a' \rangle$$

o bien

$$|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} c_{a'} e^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} |a'\rangle,$$

de manera que comparando con

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} \langle a' | \alpha \rangle |a'\rangle$$

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

2.1.2 Evolución de valores de expectación

Recordemos primeramente que los autoestados no evolucionan. Luego

$$|\alpha\rangle = |a'\rangle \quad \rightarrow \quad |\alpha, t\rangle = |a', t\rangle = e^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} |a'\rangle$$

La fase es global y no tiene sentido físico (no cambia el valor de expectación, por ejemplo) Es considerar una autoestado [?]. La podemos descartar (setear igual a uno)

$$\langle a', t | B | a', t \rangle = \langle a' | e^{i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} B e^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} | a' \rangle = \langle a' | B | a' \rangle$$

El valor de expectación de un operador respecto a un autoestado no varía. Se simplifican las fases y en el valor de expectación no me entero de ellas. Para un estado que no es necesariamente autoestado

$$\langle \alpha, t | B | \alpha, t \rangle = \langle a'' | \sum_{a''} \langle a'' | \alpha \rangle^* e^{i\frac{E_{a''}}{\hbar}(t-t_0)} B \sum_{a'} \langle a' | \alpha \rangle e^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} | a' \rangle$$

$$\langle \alpha, t | B | \alpha, t \rangle = \sum_{a', a''} C_{a''}^* C_{a'} e^{i\frac{E_{a''}-E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} \langle a'' | B | a' \rangle$$

donde $(E_{a''} - E_{a'})/\hbar$ es la llamada frecuencia de Bohr y vemos que la fase global depende de los índices de las sumatorias; entonces habrá términos de interferencia.

$$C_{a''}^* = \langle \alpha, t_0 | a'' \rangle \quad C_{a'} = \langle a' | \alpha, t_0 \rangle$$

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

Sólo en el caso en que B conmute con H (B diagonal) se dará que la fase no interviene, porque pierdo una sumatoria merced a una delta de Kronecker que aparece.

2.1.3 Relaciones de conmutación

Algunas propiedades de los conmutadores

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

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

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

Identidad de Jacobi

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0.$$

**Acá no es boca + caballo
puesto que no conmutan.**

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

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

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

a las que podemos sumar

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

El primero se hace de la manera usual; tomando una serie de potencias para f . Consideremos por ejemplo

$$[x, p^2] = p[x, p] + [x, p]p = 2i\hbar p.$$

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

2.1.4 La ecuación de Schrödinger

Habíamos llegado a

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

donde supusimos que el hamiltoniano no depende del tiempo, y es el clásico. Caso típico

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

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x' | \alpha, t_0, t \rangle = \langle x' | H | \alpha, t_0, t \rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_\alpha(x', t) = \langle x' | \frac{p^2}{2m} + V(x) | \alpha, t_0, t \rangle$$

de manera que resulta la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_\alpha(x', t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_\alpha(x', t) + V(x) \Psi_\alpha(x', t).$$

Ahora la función de onda depende del tiempo.

Si suponemos que $|\psi\rangle$ es autoestado de H entonces

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(t_0)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi(t_0)\rangle,$$

Acá usamos que sabemos cómo operan p y p^2 .

y entonces el lhs de la ecuación de Schrödinger pasa a ser $E\Psi_\alpha(x', t)$. Si no fuera autoestado, sino combinación lineal de autoestados, entonces podemos escribir

$$|\alpha, t\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\alpha, t_0\rangle = \sum_m e^{-iHt/\hbar} |m\rangle \langle m | \alpha, t_0 \rangle.$$

Anoté que en la página de la materia están los postulados en un pdf. Notemos que $p = -i\hbar \nabla$.

EJEMPLO 1.1 Ejercicio guía 2

Parte a)

$$H = -\frac{e}{mc} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = -\frac{eB}{mc} S_z = -\omega S_z$$

donde suponemos que el campo es en \hat{z} . Entonces

$$[H, S_z] = 0 \quad [S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$$

como es nulo el conmutador, tienen una base común de autokets. Será $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ y se pueden escribir

$$S_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \quad H |\pm\rangle = -mp \frac{\omega \hbar}{2} |\pm\rangle.$$

Parte b)

En $t = 0$ es

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

de modo que

$$|\alpha, t\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\omega t/2} |+\rangle + e^{-i\omega t/2} |-\rangle]$$

Parte c)

Quiero medir en un instante posterior

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right)_{\hat{x}} = |\langle S_x; + | \alpha; t \rangle|^2 = \left| \frac{1}{2} (e^{i\omega t/2} + e^{-i\omega t/2}) \right|^2 = \cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

y consecuentemente

$$P\left(-\frac{\hbar}{2}\right)_{\hat{y}} = \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

de manera que como hay solamente dos estados posibles la probabilidad suma 1.

Parte d)

Se tiene

$$\langle S_x \rangle = \langle \alpha(t) | S | \alpha(t) \rangle$$

con la expresión para $|\alpha(t)\rangle$. Se puede hacer directamente o utilizando la probabilidad, que ya fue calculada previamente. La idea es que como

$$\langle A \rangle = \sum_a a |\langle a | \alpha \rangle|^2,$$

entonces

$$\frac{\hbar}{2} \left(\cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) \right)$$

y luego $\langle S_x \rangle = \hbar/2 \cos(\omega t)$. Para S_y se puede operar con las matrices de Pauli, pues $S_y = \hbar/2 \sigma_y$ con

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Una fase global sale de todo el ket y muere en el valor absoluto.

En general hay que descomponer en autoestados, como $|+\rangle = (10)^t$ y el $|-\rangle = (01)^t$ de manera que $\langle S_x \rangle = \hbar/2 \sin(\omega t)$. Por otra parte, como tengo un medio de probabilidad up y down, será $\mathbf{S}_z = 0$.

Parte e)

Sea $n(t)$ tal que $\mathbf{S} \cdot \hat{n} |\alpha, t\rangle = |\alpha, t\rangle$. Del ejercicio 8 tomamos

$$\mathbf{S} \cdot \hat{n} |\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}, +\rangle = \frac{\hbar}{2} |\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}, +\rangle$$

y

$$|\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}, +\rangle = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) |+\rangle + \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{i\alpha} |-\rangle$$

de modo que

$$|\alpha, t\rangle = \frac{e^{i\omega t/2}}{\sqrt{2}} [|+\rangle + e^{-i\omega t} |-\rangle] \approx \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + e^{-i\omega t} |-\rangle)$$

donde me olvido de la exponencial afuera porque es una fase global y no aporta a la probabilidad. Comparamos el resultado final con lo del ejercicio 8 y por inspección obtenemos que $\beta = \pi/2$ y $\alpha = -\omega t$.

2.1.5 Representación de Heisenberg

Los kets y los operadores no tienen sentido físico, pero sí los valores de expectación

$$\langle A \rangle \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle,$$

puesto que son lo que se mide. Entonces cualquier física podrá modificar los primeros pero debe conservar los valores de expectación. Así tenemos dos representaciones posibles:

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

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

Deben notarse que:

1. Los productos internos no cambian con el tiempo

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \beta | U^\dagger U | \alpha \rangle$$

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

$$\langle \alpha, t | A | \alpha, t \rangle = \langle \alpha, t | U^\dagger A U | \alpha, t \rangle = \begin{cases} \langle A \rangle^{(H)} \\ \langle A \rangle^{(S)} \end{cases}$$

de lo cual se deduce que

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

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

$$(\langle \alpha, t_0 | U^\dagger) A^{(S)} (U | \alpha, t_0 \rangle) = \langle \alpha, t_0 | U^\dagger A^{(S)} U S | \alpha, t_0 \rangle$$

pero a $t = t_0$ las representaciones coinciden,

$$|\alpha, t_0, t_0 \rangle^{(S)} = |\alpha \rangle^{(H)}$$

y se separan a medida que el tiempo transcurre. Se tiene

$$U(t, t_0) = U(t) = e^{iHt/\hbar},$$

donde este H no depende del tiempo.

EJEMPLO 1.2 Ejemplito

Con el operador de traslación sería algo como

$$|\alpha \rangle^{(S)} \rightarrow \left[1 - \frac{i\mathbf{p}d\mathbf{x}}{\hbar} \right] |x \rangle^{(S)}$$

$$\mathbf{X}^{(S)} \rightarrow \mathbf{X}^{(S)}$$

Representación de âpple (manzana?)

$$|\alpha \rangle^{(A)} \rightarrow |\alpha \rangle^{(A)}$$

$$\mathbf{X}^{(A)} \rightarrow U^\dagger \mathbf{X}^{(A)} U = \left[1 + \frac{i\mathbf{p}d\mathbf{x}}{\hbar} \right] \mathbf{X} \left[1 - \frac{i\mathbf{p}d\mathbf{x}}{\hbar} \right] = \mathbf{X} + d\mathbf{X}$$

y para ambas representaciones es

$$\langle \mathbf{X} \rangle \rightarrow \langle \mathbf{X} \rangle + \langle d\mathbf{X} \rangle$$

EJEMPLO 1.3 Ejercicio 21

Punto a)

$$[x, f(p_x)]_{\text{Poisson}} = \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial F(p_x)}{\partial p_x} - \frac{\partial x}{\partial p_x} \frac{\partial F(p_x)}{\partial x} = \frac{\partial f(p_x)}{\partial p_x}.$$

Punto b) donde x, p_x son operadores. Entonces hay que evaluar

$$[x, e^{ip_x a/\hbar}],$$

y como conocemos el conmutador de x, p_x se utiliza una serie de potencias, es decir

$$[x, f(p_x)] = \sum_n \frac{1}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial p_x^n} [x, p_x^n],$$

y

$$[x, p_x^n] = [x, p_x^n p_x^{n-1}] = p_x [x, p_x^{n-1}] + [x, p_x] p_x^{n-1} = p_x [x, p_x^{n-1}] + i\hbar p_x^{n-1},$$

y aplicando inducción matemática se ve que llegamos a

$$[x, p_x^n] = i\hbar n p_x^{n-1},$$

de modo que

$$[x, f(p_x)] = \sum_n \frac{1}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial p_x^n} i\hbar n p_x^{n-1} = \sum_n [\dots] = i\hbar \frac{\partial f(p_x)}{\partial p_x}$$

puesto que es el desarrollo en serie de la derivada. Finalmente,

$$[x, e^{ip_x a/\hbar}] = -a e^{ip_x a/\hbar}.$$

Punto c) se tiene que $e^{ip_x a/\hbar} |x'\rangle$ es autoestado de \hat{x} , donde $\hat{x} |x'\rangle = x' |x'\rangle$. Luego, usando el resultado anterior

$$[x, e^{ip_x a/\hbar}] |x'\rangle = -a e^{ip_x a/\hbar} |x'\rangle,$$

de lo cual se deduce, expandiendo, que

$$\hat{x} e^{ip_x a/\hbar} |x'\rangle = (x' - a) e^{ip_x a/\hbar} |x'\rangle,$$

o bien

$$\hat{x} |x'\rangle = (x' - a) |x'\rangle,$$

de manera que el operador $e^{ip_x a/\hbar}$ es el operador de traslación pues

$$e^{ip_x a/\hbar} |x'\rangle = |x' - a\rangle.$$

La ecuación de Heisenberg

Queremos llegar a una ecuación para trabajar en la representación de Heisenberg.

$$A^H = U^\dagger A^S U \quad \frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A^S U + U^\dagger A^S \frac{\partial U}{\partial t} + U^\dagger A^S \frac{\partial U}{\partial t}$$

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H U; \quad \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = \frac{1}{-i\hbar} U^\dagger H$$

$$(H U)^\dagger = U^\dagger H^\dagger = U^\dagger H$$

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{-1}{i\hbar} U^\dagger H A^S U + U^\dagger \underbrace{\frac{\partial A^S}{\partial t}}_{=0} U + U^\dagger A^S \frac{1}{i\hbar} H U$$

pues A^S no depende explícitamente del tiempo (si)

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} (U^\dagger H U U^\dagger A^S U - U^\dagger A^S U U^\dagger H U) = \frac{1}{i\hbar} (-H A + A H)$$

y llegamos a la ecuación de Heisenberg

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

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

Evolución de autoestados

$$A^S |a'\rangle^S = a' |a'\rangle^S,$$

aplico un U^\dagger a ambos lados y entonces

$$U^\dagger A^S U U^\dagger |a'\rangle^S = a' U^\dagger |a'\rangle^S$$

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

$$A^H (U^\dagger |a'\rangle^S) = a' (U^\dagger |a'\rangle^S)$$

$$\begin{aligned} |a', t\rangle^H &= U^\dagger |a'\rangle^S & \frac{\partial}{\partial t} (|a', t\rangle^H) &= \frac{\partial}{\partial t} (U^\dagger |a'\rangle^S) \\ \frac{\partial}{\partial t} |a', t\rangle^H &= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger |a'\rangle^S = -\frac{1}{i\hbar} H U^\dagger |a'\rangle^S \end{aligned}$$

puesto que recordemos, nota importante,

$$H^H = U^\dagger H^S U = U^\dagger U H^S = \mathbb{1} H^S = H^S$$

entonces H es el mismo en ambas puesto que $\hat{U} = \hat{U}(\hat{H})$ y $[U, H] = 0$.

De esta forma los autoestados evolucionan al revés

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a', t\rangle^H = -H |a', t\rangle^H$$

Podemos ver de otro modo la equivalencia, usando el proyector para el operador de Schrödinger,

$$A^S = \sum_{a'} a' |a'\rangle^S \langle a'|^S$$

y entonces A^H será

$$A^H = U^\dagger \sum_{a'} A^S |a'\rangle \langle a'| U = \sum_{a'} a' U^\dagger |a'\rangle \langle a'| U$$

pero

$$A^H = \sum_{a'} A^H |a', t\rangle \langle a', t| \equiv \sum_{a'}$$

y luego se tiene que

$$A^H = \sum_{a'} a' |a', t\rangle \langle a', t| \equiv \sum_{a'} a' (U^\dagger |a'\rangle)(\langle a'| U),$$

donde por inspección resulta

$$|a', t\rangle = U^\dagger |a'\rangle^S.$$

	Schrödinger	Heisenberg
$ \alpha\rangle$	evolucionan	no evolucionan
A	no evolucionan	evolucionan
$ a'\rangle$	no evolucionan	evolucionan

Coefficientes

Los coeficientes en Schrödinger y en Heisenberg son

$$C_{a'}^S(t) = {}^S \langle a' | \alpha, t_0, t \rangle^S = {}^S \langle a' | (U | \alpha, t_0 \rangle)$$

$$C_{a'}^H(t) = {}^H \langle a', t | \alpha, t_0 \rangle^H = ({}^S \langle a' | U) | \alpha, t_0 \rangle.$$

Entonces en Schrödinger es

$$|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha, t_0, t \rangle = \sum_{a'} \overbrace{\langle a' | \alpha, t_0, t \rangle}^{C_{a'}(t)} |a'\rangle$$

mientras que en Heisenberg es

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} |a', t\rangle \langle a', t | \alpha, t_0 \rangle = \sum_{a'} \overbrace{\langle a', t | \alpha, t_0 \rangle}^{C_{a'}(t)} |a', t\rangle$$

Los coeficientes en las expresiones son iguales como corresponde a todo magnitud que tiene sentido físico, pues $|c_a(t)|^2$ es la probabilidad. El coeficiente es el mismo en ambas representaciones.

Tampoco a' puede depender de la representación porque tiene sentido físico.

2.1.6 Teorema de Ehrenfest

Para una partícula libre, es $H = p^2/(2m)$ y

$$\frac{dP_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[P_i, H] = 0,$$

el momento lineal se conserva. Se tiene

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{1}{i\hbar}[x_i, \frac{p_i^2}{2m}] = \frac{p_i}{m}$$

de manera que $p(t) = p(0)$ es constante de movimiento,

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

y se tiene (el operador x aumenta con el tiempo en la representación de Heisenberg)

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

que es decir que es un operador que no conmuta a t diferentes. La dispersión aumenta cuadráticamente en el tiempo

$$\langle (\Delta X_i)^2 \rangle_t - \langle (\Delta X_i)^2 \rangle_{t=0} \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}$$

Esto vale para cualquier estado que utilice para calcular los valores medios.

Para una partícula sometida a potencial

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

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

de modo que

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

tenemos una ecuación newtoniana. Entonces,

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

donde estamos usando

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

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

$$\begin{aligned} \left\langle \alpha, t_0 \left| m \frac{d^2x}{dt^2} \right| \alpha, t_0 \right\rangle &= - \left\langle \alpha, t_0 \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \alpha, t_0 \right\rangle \\ m \frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle \alpha, t_0 | x^H | \alpha, t_0 \rangle &= - \left\langle \alpha, t_0 \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \alpha, t_0 \right\rangle \end{aligned}$$

y entonces el teorema de Ehrenfest es

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

los valores de expectación son iguales en ambas representaciones. Claramente no podía depender de la representación porque los valores medios son cosas físicas. Se ve también que el \hbar desaparece debido a que el centro del paquete se mueve aproximadamente en forma clásica y se toma el valor medio.

EJEMPLO 1.4 Ejercicio 24

Parte a). Integramos

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

y expresando en términos de la derivada

$$\int dx' \frac{\partial}{\partial p'} \frac{e^{-ip'x'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\hbar}{-i} \langle x' | \alpha \rangle$$

o bien

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \left[\int dx' \langle p' | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle \right]$$

Como

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

se deduce que

$$x \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial p}.$$

Parte b). El significado físico de $e^{i\hat{x}C/\hbar}$ donde C es alguna constante. Por la expansión en serie se tiene

$$e^{i\hat{x}C/\hbar} |x'\rangle = e^{ixC/\hbar} |x'\rangle$$

de manera que la integración

$$\int dx' e^{i\hat{x}C/\hbar} |x'\rangle \langle x' | p'\rangle = \int dx' |x'\rangle \frac{e^{i\hat{x}(C+p')/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} =$$

o bien

$$\int dx' |x'\rangle \langle x' | C + p'\rangle = |C + p'\rangle .$$

Capítulo 3

El oscilador armónico

Clásicamente la cosa venía de una partícula sometida a un potencial

$$V(x) = \frac{kx^2}{2} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Para el oscilador armónico cuántico 1D el hamiltoniano y energía son

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

donde ω^2 es la constante del resorte cuántico. Este problema puede resolverse usando un nuevo operador \hat{a} (operadores de aniquilación y creación)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Luego,

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

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

y entonces

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

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

siendo

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

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

y entonces de esta forma \hat{a}^\dagger es el operador de creación de cuantos y \hat{a} el de aniquilación. Estos operadores permiten ir saltando de niveles de energía y pasar entre estados definidos estos por el número de cuantos. Nótese que \hat{a} es operador de aniquilación cuando actúa sobre kets; sobre bras los crea.

Del producto interno se tiene

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

lo cual conduce a $n \geq 0$.

3.0.1 El estado fundamental $\langle 0 \rangle$

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

y desde el postulado para productos internos,

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

entonces n cabalga por los naturales. Si hacemos

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad a^2 |n\rangle = \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle \quad aa^2 |n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)} |n-3\rangle \dots$$

en algún momento (dado que $n \geq 0$) se llega a $|n=0\rangle$, entonces $E_0 = \hbar\omega/2$

y

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

y no se puede bajar más,

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

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

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



Figura 0.1

Se tienen todos los valores de energía a partir de uno solo,

$$\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = |n\rangle \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

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

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

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

Es decir, que pictóricamente serían algo como

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & \dots & & & \\ 0 & \dots & & & \sqrt{n} \\ 0 & \dots & & & 0 \end{pmatrix}$$

y

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & & \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & & \dots \\ \dots & & & & \\ \dots & & & \sqrt{n} & 0 \end{pmatrix}$$

Los elementos de las matrices

$$\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1})$$

$$\langle n' | p | n \rangle = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (-\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1})$$

no pueden ser matrices diagonales porque no conmutan con el hamiltoniano.

También puede verse que

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

lo cual difiere de lo que esperaríamos clásicamente. Es más, se tienen también

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a) \quad (1)$$

y consecuentemente

$$\langle 0 | x^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad \langle 0 | p^2 | 0 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}$$

de manera que resulta

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

el estado fundamental es el de incerteza mínima. Esto es así porque estamos en el fundamental y es un pack gaussiano.

Veamos ahora la forma que tiene la función de onda. A tiempo cero. Siendo $\Psi_n(x') = \langle x' | n \rangle$ quiero evaluar $\Psi_0(x') = \langle x' | 0 \rangle$ y ver que como

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

tengo

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

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

entonces

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

y entonces

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | x' \rangle \langle x' | 0 \rangle dx' = \int_{-\infty}^{\infty} |\kappa|^2 e^{-m\omega x'^2/\hbar} dx' = |\kappa|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \\ |\kappa| &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{1/4}} \end{aligned}$$

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

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

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

Se ven que

$$\langle x' | 1 \rangle = \langle x' | a^\dagger | 0 \rangle$$

y lo escribo en función de x y p que sé cómo operan sobre x' . Entonces

$$\langle x' | 1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}x_0} \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \langle x' | 0 \rangle$$

y se puede demostrar que vale

$$\langle x' | n \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} \frac{1}{x_0^{n+1/2}} \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^n e^{-1/2(x'/x_0)^2}.$$

Los operadores a, a^\dagger son útiles para la resolución de problemas discretos. En el oscilador armónico las energías son discretas, hasta el infinito, y están equiespaciadas $\hbar\omega$.

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

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

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

EJEMPLO 0.1 Ejercicio 8

Tiene muchos resultados de la teoría que no repetiré aquí. Para evaluar $\langle m | \hat{x} | n \rangle$ se lo escribe en términos de a, a^\dagger , luego se opera. Vemos que $\langle m | \hat{x} | n \rangle$ y $\langle m | \hat{p} | n \rangle$ no son diagonales en esta base y que los elementos diagonales son nulos.

El cálculo de $\langle m | \hat{x}^2 | n \rangle$ es directo pero engorroso. Se puede ver que usando la expresión de x^2 en términos de a, a^\dagger dada por la (1) se puede ver que vale n

$$\langle m | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\sqrt{n(n+1)}\delta_{m,n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} + 2(n+1)\delta_{mn} \right]$$

$$\langle m | \hat{p}^2 | n \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \left[-(2n+1)\delta_{mn} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} \right]$$

Entonces tenemos

$$\langle n | \hat{p}^2 | n \rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1) \quad \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

y con esto se puede verificar el teorema del virial. Para autoestados de H se da que

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \quad (\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$$

y usando lo obtenido arriba

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}(2n+1)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

y se ve que el signo de igualdad vale para el $n=0$, el fundamental.

La función de onda del fundamental será $\langle x' | 0 \rangle$ y podemos usar que

$$\langle x' | a | 0 \rangle = \left\langle x' \left| \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right) \right| 0 \right\rangle \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = 0$$

lo que resulta en

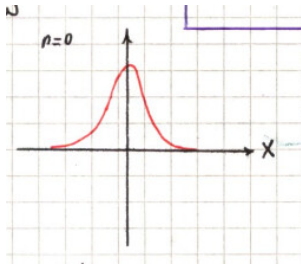
$$x' \langle x' | 0 \rangle + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x} \langle x' | 0 \rangle = 0,$$

que es una ecuación diferencial para la función de onda cuya solución se puede escribir, definiendo $x_0 \equiv \hbar/(m\omega)$,

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

una gaussiana centrada en el origen.

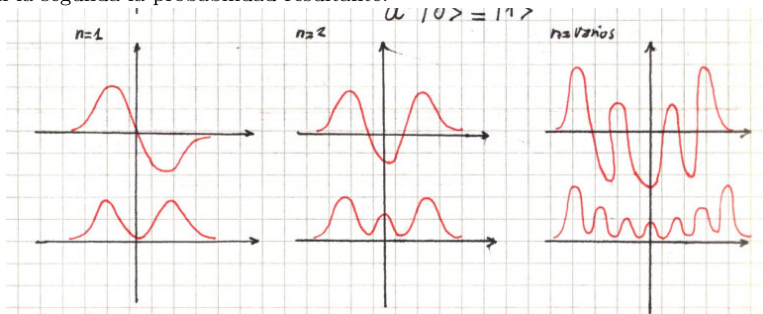
Esto ya se dijo en otra parte y está descolgado aquí.



El siguiente estado lo generamos con el operador de creación,

$$a^\dagger |0\rangle = |1\rangle$$

de manera que en la pic de abajo podemos ver en la primer fila las funciones de onda y en la segunda la probabilidad resultante.



Veamos ahora la evolución temporal en la representación de Heisenberg. Todos los operadores dependen del tiempo, luego

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [p, H] = -m\omega^2 x \quad \frac{dx}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [x, H] = \frac{p}{m}$$

y asimismo,

$$\left[p, \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right] = \frac{m\omega^2}{2} [p, x^2] = \frac{m\omega^2}{2} (-2i\hbar)$$

Es conveniente hacer una transformación canónica $x, p \rightarrow a, a^\dagger$, luego

$$\frac{da}{dt} = -i\omega a \quad \frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger$$

siendo el conmutador

$$[a, H] = \hbar\omega [a, a^\dagger a] = \hbar\omega (a^\dagger [a, a] + [a, a^\dagger] a)$$

con

$$a(t) = a(0) e^{-i\omega t} \quad a^\dagger(t) = a^\dagger(0) e^{i\omega t}$$

Poniendo a, a^\dagger en términos de x, p con

$$x(t) + i \frac{p(t)}{m\omega} = x(0) e^{i\omega t} + i \frac{p(0)}{m\omega} e^{-i\omega t}$$

$$x(t) - i \frac{p(t)}{m\omega} = x(0) e^{i\omega t} - i \frac{p(0)}{m\omega} e^{-i\omega t}$$

y equating ambas

$$\begin{aligned}x(t) &= x(0) \cos(\omega t) + \frac{p(0)}{m\omega} \sin(\omega t) \\p(t) &= -m\omega x(0) \sin(\omega t) + p(0) \cos(\omega t).\end{aligned}$$

Esto también se puede calcular con el operador evolución, a través de

$$x(t) = e^{iH/\hbar t} x e^{-iH/\hbar t},$$

aunque es un camino mucho más *painful*. Facilitamos un poco con el **lema de Baker-Hausdorff** que dice que

$$e^{[iG\lambda]} \hat{A} e^{-[iG\lambda]} = \hat{A} + i\lambda[G, A] + \frac{i^2\lambda^2}{2!}[G, [G, A]] + \dots + \frac{i^2\lambda^n}{n!}[G, [G, [G, \dots[G, A]]]]$$

con G hermitico y λ real.

El primer término es x luego se tienen

$$\begin{aligned}2) \quad [H, x(0)] &= -\frac{i\hbar p(0)}{m} \\3) \quad [H, [H, x(0)]] &= [H, -\frac{i\hbar p(0)}{m}] = -[H, p(0)] \frac{i\hbar}{m} = \hbar^2 m x(0) \\4) \quad [H, [H, [H, x(0)]]] &= [H, -i\hbar^2 x(0)] = [H, x(0)] \hbar^2\end{aligned}$$

amasando todo esto se llega a

$$x(t) = x(0) + \left[\frac{p(0)}{m} \right] t - \frac{1}{2!} t^2 \omega^2 x(0) - \frac{1}{3!} \frac{t^3 \omega^2 p(0)}{m} + \dots$$

y con un poco de buena vista se pueden identificar en esta serie las expresiones de

$$\begin{aligned}\sin(\omega t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega t)^{2n+1}}{(2n+1)!} (-1)^n \\ \cos(\omega t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\omega t)^{2n}}{(2n)!} (-1)^n\end{aligned}$$

Faltaría ver la evolución de los valores medios $\langle n | x(t) | n \rangle = 0$ y $\langle n | p(t) | n \rangle = 0$, pero se quedan en cero por ser estacionarios [?]. Las oscilaciones solamente aparecerán en estados que son combinación lineal de autoestados de energía.

3.0.2 Interferencia en experimento de Young

Consideremos la situación depicted en la figura bajo estas líneas, que es reminiscente de la del experimento de Young aunque la fuente no necesariamente es de luz.

Uso \hat{H} de partículas libres y que $|\alpha\rangle$ es el generado por la fuente. Suponemos que en $t = 0$ al pasar por las aberturas se da

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

y luego para $t > 0$ se tiene

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



Figura 0.2

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

En la pantalla debe verse la interferencia de los dos estados solapados. La diferencia de caminos es la que genera la interferencia, y usando que los tiempos son $t_i = d_i/v$ se da

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

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

y si definimos

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

resulta entonces

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

Esto sería la intensidad si de radiación electromagnética se tratase.

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

3.0.3 Cambio de cero del potencial

Consideramos una partícula sometida a potencial externo. El potencial es una maquinación matemática conveniente para el concepto más físico de fuerza. Es un caso particular de cambio de gauge.

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

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

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

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

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

Si el potencial es tal que $V_0 = V_0(t)$ entonces

$$|\tilde{\alpha}, t, t_0\rangle = e^{-i\int_{t_1}^{t_2} V(t)dt} |\alpha, t, t_0\rangle.$$



Figura 0.3

Consideremos ahora un experimento ideal (pensado). Dentro de los cilindros hay campo nulo siempre. Se varia el V abriendo y cerrando la llave a la entrada y a la salida; se varía el cero de potencial pero no el campo. Se cambia la fase de las partículas inferiores respecto de las superiores, entonces habrá interferencia en O .

Clásicamente no hay variación, pero cuánticamente

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

Notemos que con el límite $\hbar \rightarrow 0$ el efecto desaparece [no será el otro límite o hay algo mal?].

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

EJEMPLO 0.2 Caso gravitatorio

Clásicamente la masa inercial con la gravitatoria se cancelan,

$$m\ddot{x} = -m\nabla\phi_g$$

y esto lleva a que la aceleración sea g , luego la gravedad es algo geométrico porque no depende de la masa. Cuánticamente,

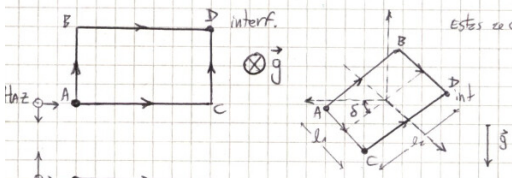
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + m\phi_g \right) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

la masa no se simplifica. Aún así

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -g.$$

EJEMPLO 0.3 Experimento Colella/Overhauser/Werner

Esto viene de un artículo de Physical Review Letters. Se utilizan partículas neutras: neutrones. Consideramos el setup siguiente



La diferencia de altura es $\Delta h = \ell_2 \sin \delta$ pero en la derecha se tiene que \bar{BD} está a mayor altura que \bar{AC} que está más baja. Luego, la longitud de onda Compton

$$v = \frac{p}{m} = \frac{1}{m} \frac{2m\hbar}{\lambda} = \frac{\hbar}{m\lambda_c}$$

y entonces

$$e^{-i/\hbar m g \ell_x \sin \delta \ell_1 / v}$$

de manera que

$$\phi_{ABC} - \phi_{ACD} = \frac{m^2 g \ell_1 \ell_2 \lambda_c \sin \delta}{\hbar^2}$$

se tiene un fenómeno puramente cuántico (aparece \hbar) y depende de la masa.

3.0.4 Caso del EM y la invariancia de gauge

Recordemos algunos resultados del electromagnetismo.

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

Si el cuadvivector de momento es $p^\mu = (E/c, \mathbf{p})$ y el de cuadri potencial es $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$ se veía que el reemplazo

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - \frac{e}{c} A^\mu$$

era covariante. Luego, el hamiltoniano covariante era

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

En el formalismo de Heisenberg

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x_i, H] = \frac{p_i - eA_i/c}{m}$$

puesto que p y A no conmutan. Los momentos son justamente $\pi_i = p_i - e/cA_i$. Luego,

$$[p_i, p_j] = 0 \quad [\pi_i, \pi_j] = \frac{i\hbar e}{c} \epsilon_{ilk} B_k$$

La invariancia de gauge hace que

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda$$

que es un cambio que deja los campos \mathbf{E}, \mathbf{B} invariantes. Si la función $\Lambda \neq \Lambda(\mathbf{x})$ entonces el cambio es como un cambio de cero del potencial, pues

$$\phi \rightarrow \phi + \lambda(t) \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}.$$

La mecánica cuántica incluye la invariancia de gauge de modo que los valores de expectación, que es lo físico, no se alteran. El cambio de fase implicado por la transformación de gauge no pasa a los valores de expectación.

Considerando la versión operacional del hamiltoniano (2) y la ecuación de Schrödinger,

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

Ahora quiero hacer una transformación de gauge para ver si obtengo las mismas mediciones. Reemplazando los operadores p y A por los transformados según el cambio de gauge se obtiene (luego veremos la justificación, creámoslo por ahora)

$$|\tilde{\alpha}, t_0, t\rangle = e^{ie\Lambda(x,t)/(\hbar c)} |\alpha, t_0, t\rangle$$

y a esta fase la denominaremos $\hat{g}(x, t)$ (un operador?) luego, la transformación de gauge implica

$$\langle \alpha | x | \alpha \rangle \rightarrow \langle \tilde{\alpha} | x | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \alpha | g^\dagger x g | \alpha \rangle$$

y como conmutan,

$$\langle \alpha | x g^\dagger g | \alpha \rangle = \langle \alpha | x | \alpha \rangle$$

donde el último paso es por la unitariedad. Luego, el x no cambia por una transformación de gauge.

Veamos qué le pasa al momento conjugado π , teniendo en cuenta que el momento lineal mecánico p no varía pero sí el potencial A , i.e.

$$\langle \alpha | \pi | \alpha \rangle \rightarrow \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\pi} | \tilde{\alpha} \rangle = \left\langle \tilde{\alpha} \left| p - \frac{e\tilde{A}}{c} \right| \tilde{\alpha} \right\rangle$$

Luego,

$$\left\langle \tilde{\alpha} \left| g^\dagger \left(p - \frac{eA}{c} - \frac{e}{c} \nabla \Lambda \right) g \right| \tilde{\alpha} \right\rangle$$

donde hay que recordar que p tiene metida la derivada respecto de x y A, Λ son sólo dependientes de x, t y conmutan con $g(x, t)$. Se ve que resulta todo el operador $p - e/cA$ y la transformación cumple además que $\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle$ de forma que se ha demostrado lo que se propusiera antes. Tenemos

$$\left[\frac{1}{2m} \left(p - \frac{eA}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c} \right)^2 + e\phi - \frac{e}{c} \frac{\partial\Lambda}{\partial t} \right] e^{ie\Lambda/(\hbar c)} |\alpha, t_0, t\rangle = e^{ie\Lambda/(\hbar c)} \left(-\frac{e}{c} \frac{\partial\Lambda}{\partial t} + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) |\alpha, t_0, t\rangle \quad (3)$$

donde se ve que valen varias cosas

$$gg^\dagger \left(p - \frac{eA}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c} \right) g = g \left(p - \frac{eA}{c} \right)$$

Con esto debería ser suficiente para confirmar el resultado [confirmarlo]. La mecánica cuántica es, entonces, invarian de gauge al igual que lo que sucedía en mecánica clásica.

EJEMPLO 0.4 Experimento de Aharonov y Bohm

Vemos en la figura que las partículas no interactúan con el campo \mathbf{B} y el circuito es un solenoide infinito. Hay campo magnético dentro pero es nula afuera. Tengo, no obstante, potencial \mathbf{A} en todas partes.



Luego, resulta que hay interferencia en D sin campo \mathbf{B} por la diferencia de fases originada por el potencial \mathbf{A} .

La fase es

$$-\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \left(-\frac{e}{c} \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \mathbf{A} \right) dt = \frac{ie}{\hbar c} \int_{x_1}^{x_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}.$$

Recordemos que el lagrangiano de la situación¹ [?]

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right)^2 + \frac{e}{c} \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \mathbf{A}$$

Quisiéramos ver cuál es la diferencia de fase entre los dos caminos ABD y ACD, que será

$$\frac{ie}{\hbar c} \left(\int_{ABD} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} - \int_{ACD} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \right) = \frac{ie}{\hbar c} \left(\int_{ABD} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} + \int_{DC A} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \right) = \frac{ie}{\hbar c} \int_{cerrada} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}$$

que conduce a

$$\frac{ie}{\hbar c} \int_{cerrada} \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \frac{ie}{\hbar c} \phi_B \neq 0$$

es decir que hay efecto de interferencia. Notemos que el rotor sigue siendo invariante de gauge [?].

Físicamente el campo \mathbf{B} no interactúa con el haz de partículas, con lo cual parecería una interacción del potencial con las partículas.

3.1 El propagador

Físicamente representa la probabilidad de transición entre autoestados por el paso del tiempo, $|x'\rangle_{t_0} \rightarrow |x''\rangle_t$. La idea es que si en $t = 0$ el estado del sistema es un autoestado $|x'\rangle$, interesará ver cuál es la probabilidad de hallarse en $|x''\rangle$ en t . El propagador se define como:

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

¹Hay un lagrangiano para cada momento, como para ahora que me estoy tomando una copa de vino.

pero veamos cómo aparece en el curso de un cálculo. Consideremos

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

Entonces la función de onda se escribe

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

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

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

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

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

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

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

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

y entonces el propagador es una función de Green que satisface

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

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

EJEMPLO 1.1 El propagador de la partícula libre

Escribimos el propagador como integral en el momento de acuerdo con

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

y entonces el propagador de una partícula libre es

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

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

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

y entonces

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

el propagador es la probabilidad de transición de pasar entre puntos x' y x'' .

El propagador tiene que cumplir la propiedad del operador evolución, esto es la propiedad de composición (como el $U(t, t_0)$), es decir:

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

lo cual se puede ver explícitamente considerando

$$\langle x'' | e^{-iH/h(t-t_1+t_1-t_0)} | x' \rangle = \int dx_1 \langle x'' | e^{-iH(t-t_1)/h} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-iH(t_1-t_0)/h} | x' \rangle$$

de lo cual vemos

$$\langle x'' | e^{-iH/h(t-t_1+t_1-t_0)} | x' \rangle = \langle x'', t | x_1, t_1 \rangle \langle x_1, t_1 | x', t_0 \rangle.$$

3.2 Integrales de camino de Feynmann

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

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

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

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

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

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

pero en cambio en mecánica cuántica todos los caminos aportan (e interfieren entre sí). En un libro de Dirac, Feynmann lee

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



Figura 2.4

y entonces propone

$$\langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \approx \sum_{\text{caminos}} e^{i \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}_{\text{clasico}}(x, \dot{x}) / \hbar dt}$$

Definiremos

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

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

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

y hay que considerar TODOS los posibles caminos (cada uno de los cuales aporta un $e^{iS/\hbar}$)

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

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

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

Para trayectorias cercanas la $\Delta phase$ no es grande y hay interferencia constructiva. Para un δt infinitesimal cualquier trayectoria puede verse como una línea recta y es

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

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

donde la última expresión es a orden 1 en el tiempo y en la posición (pues $\delta t \sim 0$).

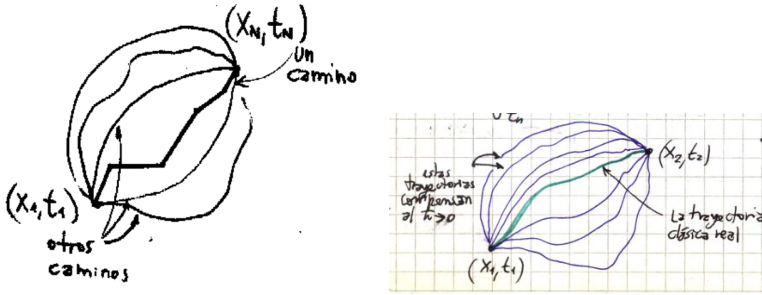


Figura 2.5

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

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

que no es otra cosa que el propagador de una partícula libre. La normalización N se puede evaluar tomando

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} N e^{im(x_n - x_{n-1})^2 / 2\hbar\delta t} = \delta(x_n - x_{n-1})$$

y usando el resultado de que

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} e^{imy^2 / (2\hbar)\delta t} = \delta(y),$$

se obtiene

$$N = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}}.$$

La normalización no depende del potencial V en el lagrangiano.

Veamos cómo se comporta para un Δt finito será

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

y defino una integral de medida dada por toda la sucesión de integraciones anidadas en la anterior expresión, denominada como $\int_{x_1}^{x_n} D[x(t)]$ de suerte que resulta

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

siendo esta última la integral de camino de Feynmann. La acción es una fase aquí. Las integrales on los caminos cuánticos y por ello esto tiene toda la información del sistema cuántico.

En base a las integrales de camino, Feynman desarrolla una formulación equivalente de la mecánica cuántica que utiliza los conceptos de:

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

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

EJEMPLO 2.1 Integral de camino para partícula libre

Para una partícula libre la expresión se puede evaluar,

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{i2\pi \hbar \delta t} \right)^{(N-1)/2} \int dx_{n-1} \int dx_{n-2} \dots \int dx_2 \prod_{n=2}^N e^{i \frac{m}{2\hbar} \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{\Delta t} \Delta t} \\ e^{i \frac{m}{2\hbar \Delta t} \sum_{j=2}^N (x_j - x_{j-1})^2} \\ (x_N - x_{N-1})^2 + (x_{N-1} - x_{N-2})^2 + \dots + ()^2 + ()^2 \end{aligned}$$

Al final del día esta cuenta da

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (N-1) \delta t} \right)^{\frac{1}{2}} e^{im(x_N - x_{N-1})^2 / (2(N-1)\hbar \delta t)}$$

donde el límite fue $(N-1)\Delta t \rightarrow (t_N - t_1)$.

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

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

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

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

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

y el espectro de autoenergías son los polos de $\tilde{G}(E)$. O, dicho de otra manera, los polos de la función G propagador integrada en x y luego de haberle hecho Fourier, son la autoenergías.

La expresión

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

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

EJEMPLO 2.2 Ejercicio 17

Se llaman estados coherentes del oscilador armónico a aquellos

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

es decir, los autovalores del operador a . Consideramos

$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle$$

de manera que

$$a |\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} a \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda a^\dagger}{k!} \right)^k |0\rangle$$

y como $(a^\dagger)^k |0\rangle = \sqrt{k!} |k\rangle$ además de que $(a^\dagger)^{k-1} |0\rangle = \sqrt{(k-1)!} |k-1\rangle$ entonces se puede ver que finalmente

$$a |\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \lambda \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda a^\dagger}{K!} \right)^K |K\rangle$$

o bien

$$a|\lambda\rangle = \lambda(e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} |K\rangle)$$

y todo lo entre paréntesis se puede considerar el ket $|\lambda\rangle$ de manera que (hemos considerado $K \equiv k - 1$) se ve que

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

es un autoket.

La parte c) requiere

$$e^{-ip\ell/\hbar} |0\rangle$$

luego

$$a e^{-ip\ell/\hbar} |0\rangle = a e^{(a-a^\dagger)\ell\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}} |0\rangle$$

y como el conmutador para cualquier función de esta diferencia es

$$[a, f(a^\dagger - a)] = \frac{\partial f(a^\dagger - a)}{\partial(a^\dagger - a)}$$

de lo cual se puede deducir que

$$a e^{-ip\ell/\hbar} |0\rangle = \ell \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} e^{-ip\ell/\hbar} |0\rangle.$$

La parte b) en cambio

$$|\lambda\rangle = e^{-ip\ell/\hbar} |0\rangle$$

y

$$\begin{aligned} \langle\psi|x|\psi\rangle &= x_0 & T(\ell)|\psi\rangle \\ \langle\psi|T^\dagger(\ell)xT(\ell)|\psi\rangle &= x_0 + \ell \end{aligned}$$

y considerando una doble integración

$$\int \int \langle\psi|x'\rangle \langle x'|T^\dagger(\ell)xT(\ell)|x''\rangle \langle x''|\psi\rangle dx' dx''$$

colapsando la delta en x'' , se tien

$$\int dx' \langle x' + \ell | \langle \psi | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle$$

que se puede dividir para ver que

$$\langle\psi|x|\psi\rangle + \ell$$

y entonces el valor medio se desplaza.

En el caso de p ,

$$\langle\psi|T^\dagger(\ell)pT(\ell)|\psi\rangle = \langle\psi|T^\dagger(\ell)T(\ell)p|\psi\rangle = \langle\psi|p|\psi\rangle.$$

EJEMPLO 2.3 Ejercicio 19

Acá consideraremos la evolución de estados coherentes $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$. Los valros medios del hamiltoniano serán

$$\langle H \rangle = \hbar\omega \left(\alpha^* \alpha + \frac{1}{2} \right)$$

y se ve que se cumple $\langle H \rangle \gg \hbar\omega$ sí y sólo sí $|\alpha| \gg 1$.

Para el operador p se tiene

$$\langle p \rangle = \left\langle \alpha \left| \left(\frac{a - a^\dagger}{i} \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \right) \right| \alpha \right\rangle$$

Corregir porque la potencia k o K no abarca al $k!$ o $K!$.

$$\langle p \rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\alpha - \alpha^*).$$

Para el operador x se tiene

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*).$$

Luego, para el hamiltoniano se tiene

$$\frac{1}{2m} \langle p \rangle^2 + \frac{m\omega^2}{2} \langle x \rangle^2 = \hbar\omega(\alpha\alpha^*)$$

que es aproximadamente $\langle H \rangle$ si se verifica que $|\alpha| \gg 1$.

Para la parte b) tenemos

$$\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n | \alpha \rangle$$

y donde si se usan las expresiones en términos del estado de vacío,

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \alpha \rangle$$

Luego, procedemos

$$a e^{iHt} |\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iE_n t/\hbar} \sqrt{n} |n-1\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \alpha \rangle$$

y como

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

se puede separar la parte temporal exponencial y resulta

$$a e^{iHt} |\alpha\rangle = \alpha e^{-i\omega t} e^{-iHt/\hbar} |\alpha\rangle$$

donde

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-iE_{n-1} t/\hbar} |n-1\rangle \frac{\alpha^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} \langle 0 | \alpha \rangle$$

y finalmente

$$\alpha(t) = e^{-i\omega t} \alpha(0).$$

Entonces, volviendo a los operadores p y x tenemos

$$\langle p \rangle(t) = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} [\alpha(t) - \alpha^*(t)] = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} 2\text{Im}(\alpha_0) \sin(\omega t)$$

$$\langle x \rangle(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\alpha(t) + \alpha^*(t)] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} 2\text{Re}(\alpha_0) \cos(\omega t)$$

Introducción al momento angular (rotaciones)

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

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

y

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

puesto que es una matriz ortogonal. Una matriz ortogonal tiene tres parámetros independientes. Luego se cumplen

- Clausura

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

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

$$R_1(R_2 R_3) = (R_1 R_2)R_3$$

- Existencia de identidad

$$R \mathbb{1} = \mathbb{1} R = R$$

- Existencia de inversa

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

Esto define un grupo de matrices ortogonales que realiza rotaciones y se denomina $SO(3)$. Las rotaciones son un grupo respecto a la multiplicación.

4.0.1 No conmutatividad de las rotaciones clásicas

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

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

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

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



Figura 0.1

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

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

En efecto, hasta orden 2 se tienen

$$R_z(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \epsilon^2/2 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 - \epsilon^2/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \epsilon^2/2 & -\epsilon \\ 0 & \epsilon & 1 - \epsilon^2/2 \end{pmatrix}$$

$$R_y(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \epsilon^2/2 & 0 & \epsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\epsilon & 0 & 1 - \epsilon^2/2 \end{pmatrix}$$

Entonces, se ve que

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon^2 & 0 \\ \epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

o bien

$$[R_x(\epsilon), R_y(\epsilon)] = R_z(\epsilon) - \mathbb{1}$$

Como el conmutador es diferente de cero el grupo de las rotaciones es un grupo no abeliano. La velocidad angular se define ω/dt de modo que eso justifica que los vectores velocidad angular puedan sumarse en mecánica. Esto es lo que sucedía en el caso clásico. Veamos ahora qué le pasa a los kets ante rotaciones.

4.1 Rotaciones cuánticas

Para las rotaciones cuánticas suponemos la existencia de un operador D_R que las realiza, que convierte $|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle_R$ con $|\alpha\rangle_R = D(R)|\alpha\rangle$ postulándose una forma del tipo

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

para una rotación infinitesimal o bien

$$D(\hat{n}, \theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i \mathbf{J}_z \theta}{\hbar N} \right)^N = e^{-i \mathbf{J} \cdot \hat{n} \theta / \hbar},$$

para rotación finita.

Otro modo de ver esto, es considerando

$$D_R(\hat{n}, \theta + d\theta) = D_R(\hat{n}, \theta) D_R(\hat{n}, d\theta) = D_R(\hat{n}, \theta) \left[\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} d\theta \mathbf{J} \cdot \hat{n} \right]$$

de modo que

$$\frac{D_R(\hat{n}, \theta + d\theta) - D_R(\hat{n}, \theta)}{d\theta} = \frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \hat{n} D_R(\hat{n}, \theta)$$

lo que conduce a

$$\frac{\partial}{\partial \theta} D_R(\hat{n}, \theta) = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{J} \cdot \hat{n} D_R(\hat{n}, \theta)$$

y, usando la condición de contorno de que $D_R(\hat{n}, 0) = \mathbb{1}$ se tiene

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

junto con la relación de conmutación $[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$.

\hat{D} es, como se dijo, el operador de las rotaciones y \hat{J} es un momento angular general. Se postula de esta forma para que \hat{D} cumpla las mismas propiedades que R y la misma relación de conmutación (lo cual los hace pertenecer al mismo álgebra)

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

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

de modo que la cuenta lleva a

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

la cual generalizando se llega a

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k \quad (1.1)$$

que son las relaciones de conmutación generales para momento angular \hat{J} . Esto vale para cualquier rotación, lo cual es más amplio que si es solo L , el momento angular.

EJEMPLO 1.1 Operador de rotación para partículas de spin 1/2

Para sistemas de spin 1/2 es

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

El efecto de la rotación se asocia a

$${}_R \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | e^{iS_z \phi / \hbar} S_x e^{-iS_z \phi / \hbar} | \alpha \rangle$$

una cosa que podemos considerar como un operador y los kets fijos en el tiempo. La base de autoestados de S_z es

$$S_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \quad S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle$$

los operadores S_x, S_y, S_z tienen sus expresiones usuales y evaluando resulta

$$D^\dagger S_x D = \frac{\hbar}{2} [(|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|) \cos \phi + i(|+\rangle \langle -| - |-\rangle \langle +|) \sin \phi]$$

que es como si el vector S_x se transformase como lo haría un vector. En efecto, se tiene

$$S_x \rightarrow \text{rotación} \rightarrow S_x \cos \phi - S_y \sin \phi$$

$$S_y \rightarrow \text{rotación} \rightarrow S_y \cos \phi + S_x \sin \phi$$

pero

$$S_z \rightarrow \text{rotación} \rightarrow S_z$$

lo cual se demuestra por conmutación en la expresión del operador.

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

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

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

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

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

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

Haciendo una rotación de $\phi = 2\pi$ (cosa que debiera dejar al ket incólume) se tiene

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

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

Se observó en 1975 que el patrón de interferencia se altera con el $-|\alpha\rangle$ de manera que tiene importancia ese signo en el ket.

En la picture se esquematiza. Hay neutrones a la izquierda y un campo magnético \mathbf{B} delante de la pared. Se ve en la interferencia que llega con el signo cambiado; le hacen dar una vuelta completa al spin.



4.1.1 Angulos de Euler

Se define una serie de rotaciones

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

lo cual equivale a

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

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

Pero desconozco cómo operar en los ejes móviles z', y' así que buscaré es-

Recordemos que en general no se sabe cómo actúan los operadores sobre un estado general sino sobre autoestados.

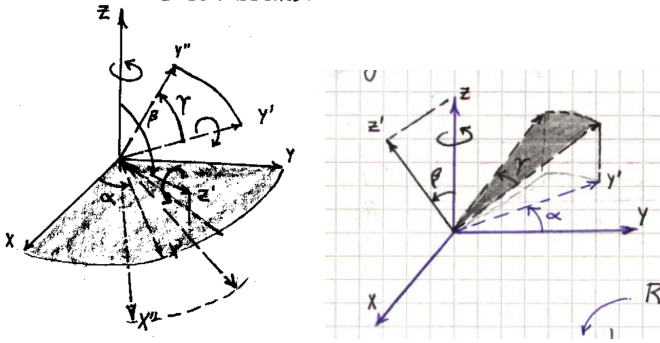


Figura 1.2 Los ángulos de Euler son una caracterización de una rotación general en 3D.

cribir las rotaciones de manera que se pueda hacer la cuenta, refiriéndolas a ejes fijos.

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha)$$

$$R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) R_{y'}^{-1}(\beta)$$

siendo estas dos expresiones generales (puede probarse)

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) \underbrace{R_{y'}^{-1}(\beta) R_{y'}(\beta)}_{\mathbb{I}} R_z(\alpha)$$

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha) R_z(\gamma) R_z(\alpha)$$

donde las que son sobre el mismo eje conmutan y entonces,

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma).$$

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

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

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

La ley de clausura no era tan obvia (el hecho de pedirla) [cuál es?]. No es una trivialidad como sí podrían serlo las otras tres propiedades.

El hecho de que si $R_1R_2 = R_3$ se pasaba a los operadores D , de acuerdo con $D(R_1)D(R_2) = D(R_3)$ solamente si los operadores J verificaban la relación de conmutación dada por la Ec. (1.1). La información contenida en dicha relación proporciona todo lo necesario acerca del sistema.

EJEMPLO 1.2 Ejercicio 7

Consideramos

$$|a\rangle_R = e^{-i/h S_z \varphi} |\alpha\rangle$$

y se pide el valor medio $\langle S_x \rangle_R$ que será

$${}_R \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | e^{i/h S_z \varphi} S_x e^{-i/h S_z \varphi} | \alpha \rangle$$

y podemos usar la expresión de S_x de la guía primera con lo cual, operando, resulta

$$\langle S_x \rangle_R = \frac{\hbar}{2} \langle \alpha | (\cos \varphi (|+\rangle \langle -| + |- \rangle \langle +|) + i \sin \varphi (|+\rangle \langle -| - |- \rangle \langle +|)) | \alpha \rangle$$

o bien

$$\langle S_x \rangle_R = \langle S_x \rangle \cos \varphi - \langle S_y \rangle \sin \varphi$$

y vemos que el valor medio del estado rotado es proyección de los valores medios de los estados no rotados.

La parte b) fija el ángulo de la rotación en $\varphi = 2\pi$, luego

$$|\alpha\rangle_R = e^{-i/h 2\pi S_z} |\alpha\rangle$$

y, incorporando una constante de normalización c , se tiene

$$e^{-i/h 2\pi S_z} c(a|+\rangle + b|-\rangle) = c(e^{-i\pi} a|+\rangle + e^{i\pi} b|-\rangle) = -|\alpha\rangle$$

y entonces vemos que rotar en 2π ha hecho aparece un signo menos.

EJEMPLO 1.3 Ejercicio 8

La parte a) está hecha en el libro de Sakurai. La parte b) pide

$$e^{-i/h \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \phi^2 \left(\frac{1}{2}\right)^n (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}})^n$$

donde

$$\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}$$

y uso representación $+-$. Se tiene

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^n (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}})^n$$

que con $n = 0$ da $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n} = 1$ y con $n = 1$ ya tenemos el producto escalar entre $\boldsymbol{\sigma}$ y \hat{n} . Con $n = 2$ es

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

y con $n = 3$ es similar a $n = 1$ mientras que $n = 4$ es similar a $n = 2$. Vemos que

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n} = \begin{cases} 1 & \text{par} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} & \text{impar} \end{cases}$$

Entonces, la sumatoria puede dividirse en dos

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n}}{(2n)!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n+1}}{(2n+1)!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^{2n+1} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n})$$

que da

$$\mathbb{1} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{n}). \quad (1.2)$$

Finalmente, el operador de rotación en la representación $|+\rangle, |-\rangle$ es

$$D(\hat{n}, \phi) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) n_z & -(n_y + i n_x) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (n_y - i n_x) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) n_z \end{pmatrix}$$

La parte d) involucra primeramente una rotación alrededor de \hat{y} en β (lo saco de \hat{z}) y en segundo lugar una rotación alrededor de \hat{z} en α . Recordemos que las rotaciones no conmutan.

Entonces, usando las expresiones anteriores de la rotación (1.2) resulta

$$D_R(z, \alpha) D_R(y, \beta) |+\rangle = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) |+\rangle + e^{i\alpha} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) |-\rangle.$$

Si roto primero en \hat{z} no lo saco en z y no sirve a los efectos. Esto por la no conmutatividad.

EJEMPLO 1.4 Ejercicio 2

La parte a) son cuentas fáciles (de las que le hubieran gustado a Piuselli).

La parte b) implica

$$U = \frac{a_0 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}}{a_0 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}} = \frac{(a_0 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})^2}{a_0^2 + |\mathbf{a}|^2}$$

donde hemos multiplicado arriba y abajo por el factor $a_0 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}$. Entonces, expandiendo el cuadrado

$$U = (a_0^2 - |\mathbf{a}|^2) \frac{\mathbb{1} + 2ia_0(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})}{a_0^2 + |\mathbf{a}|^2}$$

y las relaciones que se piden salen desde aquí.

4.1.2 Autoestados y autovalores de J

Partimos de

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

y tomamos $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ aprovechando que

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

siendo esto último muy importante y probándose por evaluación directa.

Lleva a

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

Se eligen J^2, J_z como observables que conmutan

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

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

Definiremos los operadores de subida y de bajada

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

que verifican

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

Entonces, queremos ver quiénes son a, b . Haciendo operar, se tiene

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

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

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

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

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

de manera que J_+ sube el J_z en una unidad de \hbar y J_- baja el J_z en una unidad de \hbar . Entonces,

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

donde C_{\pm} es una constante de normalización. Para averiguarla tenemos que tomar $(J_+)^* = J_-$. Empecemos

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

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

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

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

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

Esto significa que hay cota máxima para b . Como

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

debe dar el ket nulo puesto que no se puede seguir subiendo. No sé qué le hace al ket la siguiente combinación de operadores

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

pero se puede evaluar del siguiente modo;

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

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

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

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

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

y como no puede seguir bajando debe dar el ket nulo

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

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

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

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

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

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

Luego, para valor a fijo

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

y como J_+ sube de a un \hbar será

$$b_M = b_m + n\hbar$$

y entonces

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

y se da que j es entero o semientero.

Puede llegar desde uno a otro con J_+ .

Definiremos

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

pero como $b/\hbar = m$

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

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

esta es la degeneración del estado L^2 . En resumen

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

todo lo cual salió de la relación de conmutación.

4.1.3 La normalización de J_{\pm}

Nos falta aún la normalización.

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

Usando la ortonormalidad de los estados se ve que

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

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

y como puedo fijar la fase en la unidad, se tiene

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

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

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

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

Finalmente, se tienen

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

y

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

Se ve que los estados más bajos o más altos se aniquilan

$$J_- |j, -j\rangle = 0 \quad J_+ |j, j\rangle = 0$$

Los J_+ , J_- no mezclan estados con diferente j .

Los elementos de matriz de J^2 , J_z , J_+ serán, si se asume normalización de $|j, m\rangle$,

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

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

Y además

$$\langle j', m' | J_{\pm} | j, m \rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar \delta_{jj'} \delta_{m', m \pm 1}$$

que no es diagonal, aunque por poco. Los $|j', m'\rangle$ no son autoestados de J_{\pm} .

En el subespacio angular de j, m vale la completitud

$$\sum_j \sum_{m=-j}^j |j, m\rangle \langle j, m| = \mathbb{1},$$

pero para especificar bien el estado necesito de ciertos sistemas un número más, mínimamente, que es el de la energía

$$\sum_k \sum_j \sum_{m=-j}^j |k, j, m\rangle \langle k, j, m| = \mathbb{1}.$$

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

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

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

siendo que $\mathcal{D}(R)$ tiene por efecto rotar el sistema físico. Cuando $\hat{n} = \hat{z}$ es fácil, pero en caso contrario no sabemos cómo opera. Lo primero que hay que notar es que

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

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

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

y

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

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

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

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

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

donde $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ son las funciones de Wigner.

La matriz de $\mathcal{D}(R)$ (no caracterizada por un único j) puede ponerse en forma diagonal por bloques, lo cual surge de considerar la aplicación sobre $\alpha |j, m\rangle + \beta |j, m'\rangle$

$$\mathcal{D}_{(R)} |\gamma\rangle = \alpha |j_1, m_1\rangle + \beta |j_2, m_2\rangle$$

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

con cada bloque de $(2j_q+1) \times (2j_q+1)$ con $q = 1, 2, \dots$, pero siendo cada bloque irreducible. Cada bloque es un grupo; en efecto, las matrices de rotación con j fijo forman un grupo. $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ son los elementillos de la matriz.

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

donde el $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ es la amplitud de hallar al $|j, m\rangle$ rotado en $|j, m'\rangle$. La matriz lo que hace es hacer que varíen las proyecciones del ket sobre la base, pero conservando el valor de j .

Hay un dibujito pederro en la carpeta P37.

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

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

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)} = \langle j, m' | e^{-iJ_z\alpha/\hbar} e^{-iJ_y\beta/\hbar} e^{-iJ_z\gamma/\hbar} |j, m\rangle$$

donde acá sabemos qué es lo que hacen los que están a los lados, porque ya lo calculamos, y entonces

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

siendo el primer factor una fase. En los $d_{m'm}^{(j)}$, que son un subconjunto de las funciones de Wigner, está la dificultad de la cuenta.

4.2 Formalismo de spinores de Pauli

Apropiado para trabajar con sistemas de espín 1/2, que es lo más básico para los sistemas con momento angular. Estos sistemas son casos particulares de momento angular,

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

y se definen los spinores χ_{\pm} como

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

Acá hay una diferencia con lo que hay en la carpeta que lo meto dentro de un entorno de ejemplo para trabajarlo más adelante

EJEMPLO 2.1 Representación de Pauli

La representación de Pauli es una forma de escribir los kets. Podría usar otras muchas representaciones (incluso un espacio de kets con vectores de tres componentes o más). Es la misma física pero con diferente formalismo (que no es físico).

$$\begin{aligned} J_- |-\rangle &= 0 & J_+ |-\rangle &= \hbar |+\rangle \\ J_+ |+\rangle &= 0 & J_- |+\rangle &= \hbar |-\rangle \end{aligned}$$

y entonces tenemos

$$\begin{aligned} |+\rangle &\equiv \Psi_+ \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & |-\rangle &\equiv \Psi_- \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \langle + | &\equiv \Psi_+^\dagger \equiv (1 \ 0) & \langle - | &\equiv \Psi_-^\dagger \equiv (0 \ 1) \end{aligned}$$

Podemos juntar en una esperice de matriz los operadores J ,

$$\begin{pmatrix} ++ & +- \\ -+ & -- \end{pmatrix}$$

Se puede ver que

$$\langle + | J_y | + \rangle = \frac{i}{2} \langle + | J_- - J_+ | + \rangle = 0$$

$$\langle - | J_y | - \rangle = \frac{i}{2} \langle - | J_- - J_+ | - \rangle = 0$$

mientras que los cruzados

$$\langle + | J_y | - \rangle = \frac{i}{2} \langle + | J_- - J_+ | - \rangle = -i \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle - | J_y | + \rangle = \frac{i}{2} \langle - | J_- - J_+ | + \rangle = i \frac{\hbar}{2}$$

Luego, el J_y se puede vincular a una matriz σ_2 de acuerdo con

$$J_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_2$$

y construyo un vector de matrices $\boldsymbol{\sigma}$ que forma el

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$$

donde las otras dos matrices aparecen como

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_1 \quad J_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_3$$

y donde las propiedades de las matrices de Pauli aparecen más abajo.

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

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

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

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

que es una especie de vector

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

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

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

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

Las matrices de Pauli cumplen las propiedades básicas siguientes

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

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

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

Además,

$$\det(\sigma_i) = -1 \quad \text{Traza}(\sigma_i) = 0$$

lo que conduce a

$$\det(e^{ia\sigma_i}) = e^{ia \text{ Traza}(\sigma)} = 1$$

Vemos, además, que las matrices pertenecen a $SU(2)$ el grupo de matrices unitarias de determinante unitario, y a $U(2)$ el grupo de matrices unitarias con cualquier determinante.

Podemos obtener los estados S_x, S_y que en el análisis cualitativo del experimento de Stern-Gerlach dedujimos se trataba de combinaciones lineales de $|+\rangle, |-\rangle$

$$|S = 1/2; S_x = 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

$$|S = 1/2; S_x = -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$$

$$|S = 1/2; S_y = 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle)$$

$$|S = 1/2; S_y = -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - i|-\rangle)$$

Ahora tengo bien definidos los operadores con las matrices. Diagonalizo y listo, obtengo lo de arriba.

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

y también el resultado importante

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + i\vec{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (2.1)$$

Esto nos lleva a

$$J_+ = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

de forma que

$$J_+ |-\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar |+\rangle,$$

y el círculo se ha cerrado.

Este formalismo se puede aplicar a las rotaciones ahora.

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

pero

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

y escribiendo la serie que implica la exponencial, se tiene

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

donde identificamos la serie del coseno, y usando ahora el resultado (2.1) podemos escribir

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

que es el operador de rotación para sistemas de spin $1/2$ (donde $\mathbb{1} \in 2 \times 2$). **Todo esto vale para**
 Con esta expresión podemos evaluar $d_{m'm}^{j=1/2}(\beta)$, tomando $\hat{n} = \hat{y}$ en la $J = 1/2$.
 fórmula anterior llegamos a que debe valer

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

donde hemos usado los resultados

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

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

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

Usar $|+\rangle = (1; 0)$; etc. es utilizar una representación para hacer cálculos. A veces es útil “bajar” a una representación pictórica como esta para hacer ciertos cálculos y luego abstraerse nuevamente.

4.2.1 Ejemplo

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

de manera que

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

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

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

Este resultado es intuitivamente lógico.

4.2.2 Rotaciones en sistemas con $j = 1$

Queremos hacer la transformación

$$|S_z, +\rangle \longrightarrow |S_x, +\rangle$$

con una $D(\beta)$. Otra manera es hacer una rotación sobre el eje \hat{y} que rote \hat{z} hacia \hat{x} en $\beta = \pi/2$. Entonces se genera la matriz correspondiente D

$$D^{1/2} = \begin{pmatrix} \cos(\pi/4) & -\sin(\pi/4) \\ \sin(\pi/4) & \cos(\pi/4) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Si le aplico la matriz D al estado $|S_z; +\rangle$ paso al $|S_x; +\rangle$. Esto se ve desde

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

Ahora tenemos

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

y tendremos

$$|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

y recordando la expresión de J_y en términos de escaleras

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

y sabiendo cómo operan los J_+ y J_- sobre la base anterior es posible llenar la matriz de acuerdo con

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

Ahora se quiere obtener $e^{-iJ_y\beta/\hbar}$, y podemos empezar con J_y/\hbar

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

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

Después de probar los primeros elementos se ve la recurrencia y se llega a

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

Sumando y restando un término conveniente se puede ver que la expresión equivale a

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

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

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

EJEMPLO 2.2 Optativos

Los ejercicios 10,11,12 (matriz densidad) son de carácter optativo. Tengo asociado a Sakurai 3.4. Ejercicios 1,20-21 pasan a guía 4.

EJEMPLO 2.3 Ejercicio 13

Como $J_z |\psi\rangle = m\hbar |\psi\rangle$ se sigue que $|\psi\rangle = |j, m\rangle$ luego

$$\langle J_x \rangle_\psi = \langle J_y \rangle_\psi = 0$$

donde cada uno de estos operadores es una combinación lineal de J_+ y J_- . Luego es $\langle \mathbf{J} \cdot \hat{n} \rangle_\psi$ lleva a

$$\mathbf{J} \cdot (n_x, n_y, n_z) = \langle J_x \rangle n_x + \langle J_y \rangle n_y + \langle J_z \rangle n_z,$$

de los cuales los dos primeros son nulos mientras que el último es

$$\langle \mathbf{J} \cdot \hat{n} \rangle_\psi = \langle J_z \rangle_\psi \cos \beta = \langle j, m | J_z | j, m \rangle \cos \beta$$

de modo que $\langle \mathbf{J} \cdot \hat{n} \rangle_\psi = m\hbar \cos \beta$.

EJEMPLO 2.4 Ejercicio 14

Hay que construir matrices L^2, L_x, L_y, L_z y donde los estados posibles son el conjunto $\{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$ cuya equivalencia con los vectores 3D usuales es la dada en la sección 4.2.2 intercambiando el primero con el último. Utilizando el orden $\{|1, -1\rangle, |1, 1\rangle, |1, 0\rangle\}$ la matriz es

$$L_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

Para la parte a) tenemos que usando la base $\{|\ell, m_y\rangle\}$ de autoestados de L^2 y L_y se tienen

$$\begin{aligned} m_y = 0 \quad |1, 0\rangle_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, -1\rangle_z + |1, 1\rangle_z) \\ m_y = \hbar \quad |1, 1\rangle_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{i}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle_z |1, 0\rangle_z - \frac{i}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle_z \right) \\ m_y = -\hbar \quad |1, -1\rangle_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{i}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle_z |1, 0\rangle_z + \frac{i}{\sqrt{2}} |1, 1\rangle_z \right) \end{aligned}$$

La matriz S_y puede diagonalizarse entonces.

La parte b) utiliza el estado

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1\rangle_z - |1, -1\rangle_z)$$

y queremos ver las probabilidades P de los diferentes estados, donde ψ estará escrita en la base de L_z ,

$$P(m_y = 0) = |\langle 1, 0 | \psi \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 1, -1 |_z + \langle 1, 1 |_z) \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1\rangle_z - |1, -1\rangle_z) \right|^2 = 0$$

en cambio serán

$$P(m_y = \hbar) = \left| \frac{i}{2\sqrt{2}} + \frac{i}{2\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} \quad P(m_y = -\hbar) = \left| \frac{i}{2\sqrt{2}} - \frac{i}{2\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

de lo cual deducimos que $m_y = 0$ no se puede medir nunca y que los otros valores $m_y = \hbar$ y $m_y = -\hbar$ tienen probabilidad 1/2 cada uno.

La parte c) involucra el siguiente esquemita

$$L_z \longrightarrow \hbar \implies L_y \longrightarrow i?$$

donde las líneas simples implican un proceso de medición. Tenemos

$$P(m_z = \hbar) = |\langle 1, 1 | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

y luego de la medición se tiene $|\psi\rangle = |1, 1\rangle_z$ donde enfatizamos que el ket ψ es luego de medir.

EJEMPLO 2.5 Ejercicio 15 y 16

El 15 involucra que el operador rota en \hat{y} el estado

$$|j, j\rangle \longrightarrow \text{rotado } e^{-iJ_y/\hbar\epsilon} |j, j\rangle$$

y tenemos los elementillos de matriz $d_{m'm}^{(j)}$.

Para el 16 conviene utilizar las relaciones

$$\sum_i \epsilon_{ijk} \epsilon_{irs} = \delta_{jr} \delta_{ks} - \delta_{js} \delta_{kr} \quad \sum_i \epsilon_{ijk} \epsilon_{ijl} = 2\delta_{kl}$$

4.2.3 Teleportación. Tópico para entretener

Tenemos dos sistemas que serán identificados como Alicia y Roberto (castellanizaciones del típico para Alice and Bob) de manera que Alicia está caracterizada por

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$$

y necesita enviarle información de su estado $|\psi\rangle$ a Roberto. $|\psi\rangle$ es un ket desconocido, pero si mido afecta al sistema. Consideremos dos sistemas compuestos donde la partícula que pertenece a \mathcal{H}_A que está representada por el conjunto $\{|\phi_i\rangle_A\}$ mientras que la partícula que pertenece a \mathcal{H}_B está representada por el conjunto $\{|\psi_i\rangle_B\}$

Tomamos el espacio de Hilbert total que corresponde al producto tensorial $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \times \mathcal{H}_B$ siendo la base de este espacio $\{|\phi_i\rangle_A \otimes |\psi_j\rangle_B\}$.

Luego aplicamos a sistemas $S = 1/2$ de manera que escribimos explícitamente

$$\mathcal{H}_A = \{|+\rangle_A, |-\rangle_A\} \quad \mathcal{H}_B = \{|+\rangle_B, |-\rangle_B\}$$

y el espacio de Hilbert total tiene los productos

$$\mathcal{H} = \{|+\rangle_A \otimes |+\rangle_B, |+\rangle_A \otimes |-\rangle_B, |-\rangle_A \otimes |+\rangle_B, |-\rangle_A \otimes |-\rangle_B\}$$

para los cuales usaremos la notación

$$\mathcal{H} = \{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$$

siendo su dimensión de $2 \times 2 = 4$

EJEMPLO 2.6 Propiedades del \otimes

Si V, W son espacios de Hilbert y $|v\rangle \in V, |w\rangle \in W$ se tiene

$$i) z(|v\rangle \otimes |w\rangle) = z|v\rangle \otimes |w\rangle = |v\rangle \otimes z|w\rangle$$

$$ii) \left(\frac{|v_1\rangle + |v_2\rangle}{\sqrt{2}} \right) \otimes |w\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|v_1\rangle \otimes |w\rangle + |v_2\rangle \otimes |w\rangle)$$

Siendo el producto tensorial entre A y B un operador

$$(A \otimes B)(|v\rangle_1 + |w\rangle_2) = A|v\rangle_1 \otimes B|w\rangle_2$$

$$X_1 \equiv X_1 \otimes \mathbb{1}_2$$

Un estado general de \mathcal{H} puede escribirse como combinación lineal de la base de este espacio de acuerdo con

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

pero no se puede escribir como \otimes . Medir en un sistema (la primer partícula) es algo de la forma

$$P = |+\rangle \langle +| \otimes \mathbb{1},$$

donde vemos que no hace nada sobre la segunda partícula. Si tengo partículas interactuantes y envío una quedándome con la otra, al medir sobre la mía estoy seguro que la que mandé estará en el mismo estado.

Llegamos al concepto de *estados entrelazados* (*entangled states*), que son aquellos que no pueden escribirse como producto tensorial \otimes . Algo de la pinta

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

será un estados no entrelazado. Los estados entrelazados están correlacionados pues medir uno afecta al otro.

En la base de \mathcal{H} dada podemos hacer un cambio de base como

$$\{|\phi_+\rangle, |\phi_-\rangle, |\psi_+\rangle, |\psi_-\rangle\}$$

que es la base de Bell, entonces

$$|\phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle \pm |--\rangle) \quad |\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle \pm |-+\rangle)$$

son cuatro estados entrelazados ortogonales que generan \mathcal{H} .

La base son autoestados de $\mathbb{1} \otimes \sigma_z, \sigma_z \otimes \mathbb{1}$ que serán respectivamente $\hbar/2, \hbar/2, -\hbar/2, -\hbar/2$ y $\hbar/2, -\hbar/2, +\hbar/2, -\hbar/2$. En la base de Bell se tienen

	$\mathbb{1} \otimes \sigma_x$	$\sigma_z \otimes \sigma_z$
$ \phi\rangle_+$	+	+
$ \phi\rangle_-$	+	-
$ \psi\rangle_+$	-	+
$ \psi\rangle_-$	-	-

Volvemos ahora al asunto de Alicia y Roberto. Usamos estados entrelazados. En momento (0) Alicia y Roberto juntos con una partícula de spin 1/2 y generan el estado entrelazado

$$|\psi\rangle_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_2 |+\rangle_3 + |-\rangle_2 |-\rangle_3)$$

Suponemos que Alicia se queda con la partícula 2 y Roberto se lleva la partícula 3. Conservan el estado entrelazado. Luego, en el momento (1) Alicia le manda el estado

$$|\psi\rangle_{123} = |\psi_1\rangle \otimes |\psi\rangle_{23}$$

que es un sistema de tres partículas y se puede escribir $|\psi\rangle_{123} = \sum |\rangle_{12} \otimes |\rangle_3$ y luego de un álgebra importante puede llevarse a la forma

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{123} = \frac{1}{2} [& |\phi_+\rangle_{12} \otimes (\alpha |+\rangle_3 + \beta |-\rangle_3) + \\ & |\phi_-\rangle_{12} \otimes (\alpha |+\rangle_3 - \beta |-\rangle_3) + |\psi_+\rangle_{12} \otimes (\alpha |-\rangle_3 + \beta |+\rangle_3) + \\ & |\psi_-\rangle_{12} \otimes (\alpha |-\rangle_3 - \beta |+\rangle_3)] \end{aligned}$$

En el momento (2) se mide en la base de Bell el sistema 12 y entonces ... [?]

Qué pasó con esto, Me cansé?

4.3 Momento angular orbital

Volvamos al momento angular usual, es decir a

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

el cual verifica el mismo álgebra que \mathbf{J} , i.e.

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

El momento angular será un operador que genera rotaciones, como en mecánica clásica. Así, por ejemplo,

$$L_z = xp_y - yp_x$$

Consideremos ahora una rotación en torno a z , en un $\delta\phi$, para un sistema que no tiene spin. Se tiene

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

esto es una traslación en \hat{x} de valor $x\delta\phi$ y una en \hat{y} de valor $-y\delta\phi$,

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

Esta traslación es una rotación infinitesimal de magnitud $\delta\phi$ en torno a z , que por ello genera las rotaciones clásicas en torno a z . Considerando la función de onda del estado α se tiene

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

y en coordenadas esféricas,

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

Podemos hallar una expresión para L_z en esféricas, utilizando una expansión de Taylor a primer orden, la cual luego de igualar término a término conduce a

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

identificamos

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

donde

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

es el operador L_z en esféricas.

Esta construcción usa que

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

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

Usando

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

y los resultados

$$\langle r, \theta, \varphi | L_x | \alpha \rangle = -i\hbar \left(-\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} - \cotg\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle$$

$$\langle r, \theta, \varphi | L_y | \alpha \rangle = -i\hbar \left(\cos\theta \frac{\partial}{\partial\theta} - \cotg\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle$$

$$\langle r, \theta, \varphi | L_{\pm} | \alpha \rangle = -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial\theta} - \cotg\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \langle r, \theta, \varphi | \alpha \rangle$$

se llega a

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

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

donde $\nabla_{\theta, \varphi}^2$ es la parte angular del laplaciano en coordenadas esféricas.

Esto puede obtenerse también partiendo de

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

EJEMPLO 3.1 Ampliación del último claim

Recordemos que L^2 se puede escribir

$$\sum_k L_k L_k = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} x_i p_j \epsilon_{lmk} x_m p_k$$

y luego utilizando el colapso de la suma de los dos Levi-Civita (ver Apéndice XXX),

$$L^2 = \sum_{ijk} (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) x_i p_j x_m p_k.$$

Hay algo más en la carpeta pero un poco sloopy.

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

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

son la solución a problemas de simetría de revolución. Los Y son los armónicos esféricos. Todo potencial con simetría esférica tiene como solución

de la parte angular a los armónicos esféricos. Podemos separar en radial y angular de acuerdo con

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

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

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

Trabajaremos solamente en la parte angular $|\theta, \phi\rangle \equiv |\hat{n}\rangle$ (esta nomenclatura es común)

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

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

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

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

de manera que

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

y entonces

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

Para L^2 se tiene

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

y de modo ídem

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

lo que conduce finalmente a

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

Esta última supongo que es lo mismo que

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + l(l+1) \right] Y_\ell^m(\theta, \phi) = 0.$$

Luego, se puede ver que $\ell \in \mathbb{Z}$ y no puede ser semientero; en ese caso los $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ son base de cualquier función de dichos ángulos. Como L tiene

correlato clásico, el momento angular de toda la vida, necesito que ℓ y m sean enteros.

Entonces, con la ortogonalidad y la completitud se tienen, respectivamente

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad \int d\Omega |\hat{n}\rangle \langle \hat{n}| = 1$$

donde $d\Omega$ es el diferencial de ángulo sólido. De esta manera que llegamos a

$$\int d\Omega \langle l', m' | \hat{n} \rangle \langle \hat{n} | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm},$$

o bien

$$\int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

La cuenta puede hacerse integrando así

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_l^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{l'l} \delta_{m'm}.$$

EJEMPLO 3.2 Ejercicio 17

La parte a) propone la función de onda

$$\psi(\mathbf{x}) = (x + y + 3z)f(r) = r(\cos \varphi \sin \theta + \sin \varphi \cos \theta + 3 \cos \theta)f(r)$$

o sea algo de la forma

$$\psi(\mathbf{x}) = r f(r) F(\theta, \varphi) = \langle x | \psi \rangle$$

luego esta función F puede ser vista como una combinación lineal de armónicos esféricos Y_l^m . Mirando los primeros vemos que

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

y entonces vemos que nos podemos construir (por inspección)

$$F(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{1}{2} (1+i) Y_1^{-1} + \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{1}{2} (1-i) Y_1^1 + 3 \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0$$

y vemos que todos los términos tienen el mismo $l = 1$. Entonces

$$L^2 \psi(\mathbf{x}) = l(l+1) \hbar^2 \psi(\mathbf{x})$$

y entonces $2\hbar^2$ es el autovalor.

Para la parte b) estamos midiendo L_z ; con lo cual mediremos $-1, 0, 1$ pues

$$-l \geq m \geq l \quad -1 \geq m \geq 1$$

Sumamos los tres módulos al cuadrado para normalizar. Deberíamos llegar a

$$P(m=0) = \frac{9}{11} \quad P(m=1) = \frac{1}{11} \quad P(m=-1) = \frac{1}{11}$$

Poner que $d\Omega = d\phi d\theta$ con el factor usual?

En la parte c) la función $\psi(\mathbf{x})$ es la autofunción con autovalor E . ¿Cuál es el $V(r)$?

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x})$$

y la función $\psi(\mathbf{x})$ es esféricamente simétrica, de lo cual podemos separar en parte radial y parte angular.

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}) = \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r)) - \frac{L^2}{r^2} R(r) \right] F(\theta, \varphi)$$

pero sabemos que $L^2 = 2\hbar^2$ de manera que en la ecuación anterior y reemplazando en la de Schrödinger la forma separada $\psi(\mathbf{x}) = R(r)F(\theta, \varphi)$ se puede despejar $V(r)$.

Ahora queremos una expresión en términos de una ecuación diferencial sencilla. Para ello empezamos desde

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

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

lo que lleva a

$$Y_l^m(\theta, \phi) = c_l e^{il\phi} \sin^l \theta.$$

Esta última proviene del paso intermedio que separa la parte en ϕ ,

$$\left(i \frac{\partial}{\partial \theta} - i l \cot \theta \right) g(\theta) = 0,$$

donde $g(\theta)$ será el seno de θ .

Ahora quisiéramos determinar algún Y_ℓ^m y luego generar los siguientes con un operador *piola* como en el caso del oscilador armónico. Luego usamos L_- para hallar sucesivamente los demás Y_ℓ^m a partir de

$$Y_\ell^\ell(0, \varphi) = c_\ell \sin \theta e^{i\ell\varphi}$$

donde

$$c_\ell = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}}.$$

Usando el operador L_-

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

se llega a una especie de relación de recurrencia

$$Y_l^{m-1}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_l^m(\theta, \phi)$$

y por este camino se llega a

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

con

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)(Y_l^m(\theta, \phi))^*$$

y

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell \cos \theta}{d(\cos^\ell \theta)} \sin \theta)^{2\ell} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta),$$

donde $P_l(\cos \theta)$ son los polinomios de Legendre.

Se puede llegar al estado \hat{n} rotando desde \hat{z}

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

pues en efecto usando una $D(R) = D(\alpha = \varphi, \beta = \theta, \gamma = 0)$ y

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

donde sumo entre todas las combinaciones. El armónico esférico conjugado es

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

y como el primer braket no es otra cosa que $D(R)\delta_{\ell\ell'}$ resulta

$$Y_{\ell'}^{m'*}(\theta, \phi) = \sum_m D_{m'm}^{(\ell)}.$$

Además,

$$\langle \ell, m | \hat{z}\rangle = Y_\ell^{m*}(\theta, \phi_{\text{indef.}}) \delta_{m0}$$

porque para $\theta = 0$ el ángulo ϕ resulta indefinido. Si no fueran nulos tenemos un problema porque sobre \hat{z} no puede depender de ϕ .

$$\langle \ell, m | \hat{z}\rangle = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta)|_{\cos \theta=1} \delta_{m0}$$

entonces la matriz de rotación en este caso particular es un armónico esférico,

$$Y_\ell^{m*}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} D_{m'0}^{(\ell)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0).$$

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

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

entonces ψ no será univaluada

Además,

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

Suma de momentos angulares

5.1 Armónicos esféricos como matrices de rotación

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

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

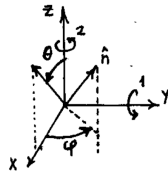


Figura 1.1 .

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

La Ψ tiene la misma simetría que el potencial.

5.2 Suma de momentos angulares

Sea un estado con valor J máximo, entonces

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

Y se ve que si j es muy grande, $J_z = j\hbar$ y $|j| = \sqrt{j(j+1)}\hbar$ están muy cerca. Casi todo el $|j\rangle$ está en \hat{z} .

Clásicamente con $j \rightarrow \infty$ veremos que J_x, J_y son casi nulos y es casi todo J_z . El problema es que dada la incerteza en J_x, J_y no puedo sumar todos los momentos $J_x + J_y + J_z$. Este desconocimiento no es tan terrible por la cuantización de los momentos. En mecánica clásica un desconocimiento de esta índole traería consecuencias desastrosas.

Es importante sumar momentos angulares para hacer cuentas como $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, o en ciertos cálculos de física nuclear.

Dos momentos de espín 1/2

Sean dos estados de espín 1/2, donde es $S = 1/2$ y definimos

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

donde la identidad implica no realizar cambios sobre un estado particular. En cada espacio valen las relaciones usuales de conmutación

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

donde el último indica que operadores de espacios diferentes conmutan.

Clasificaremos los autoestados como $|s_1, m_1\rangle, |s_2, m_2\rangle$ de modo que

$$S_1^2 |s_1, m_1\rangle = s_1(s_1 + 1)\hbar^2 |s_1, m_1\rangle \quad S_{2z} |s_2, m_2\rangle = m_2\hbar |s_2, m_2\rangle$$

Un estado general se puede escribir según

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

dándose que $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ conmutan entre sí. Por ello podemos acoplar **Explicarlo mejor.** los cuatro índices como se hizo arriba.

Dado que estamos en el caso de spin 1/2 tenemos cuatro estados posibles

$$|++\rangle \quad |+-\rangle \quad |-+\rangle \quad |--\rangle \quad (2.1)$$

Esto no nos da información del spin suma de las dos partículas, sino del spin de cada una de ellas. Si se quiere saber $S^2 = S_1^2 + S_2^2, S_z = S_{1z} + S_{2z}$ otro examen tiene que ser hecho. Nótese que $[S^2, S_{2z}] \neq 0$ puesto que $(S_1 + S_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$.

Se puede elegir otro COCC como S_1^2, S_2^2, S^2, S_z base inteligente para clasificar la suma de los momentos. Así tendremos $|S_1, S_2; S, m\rangle$ donde el tercero y cuarto están asociados a S^2 y S_z , respectivamente. Entonces

$$S^2 |S_1, S_2; S, m\rangle = s(s + 1)\hbar^2 |S_1, S_2; S, m\rangle$$

$$S_z |S_1, S_2; S, m\rangle = m\hbar |S_1, S_2; S, m\rangle$$

Combinando dos estados de spin 1/2 surgen

$$\begin{aligned} \{|1/2, 1/2, 1, 1\rangle, |1/2, 1/2, 1, 0\rangle, |1/2, 1/2, 1, -1\rangle\} & \quad \text{triplete } [s = 1] \\ \{|1/2, 1/2, 0, 0\rangle\} & \quad \text{singlete } [s = 1/2] \end{aligned} \quad (2.2)$$

Tenemos escritos los estados en dos bases (2.1) y (2.2), siendo la primera muy sencilla pero menos útil que la segunda. Tratemos de pasar entre bases. Vemos que

$$|++\rangle = |S_1 = 1/2, S_2 = 1/2, m_1 = 1/2, m_2 = 1/2\rangle,$$

desde lo cual podemos ver algo por inspección. [sigue acá info entretejida con lo anterior]

Hay cuatro estados

$$S_1 \quad S_2 \quad m_1 \quad m_2$$

$$\begin{aligned}
&|1/2, 1/2; \quad 1/2, \quad 1/2\rangle \\
&|1/2, 1/2; \quad 1/2, -1/2\rangle \\
&|1/2, 1/2; -1/2, -1/2\rangle \\
&|1/2, 1/2; -1/2, \quad 1/2\rangle
\end{aligned}$$

$$S_1 \quad S_2 \quad S_{1z} \quad S_{2z}$$

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

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

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

Así tendremos

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

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

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

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

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

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

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

5.2.1 Cambio entre bases

Podemos hallar a ojo que

- $|++\rangle = |1/2, 1/2; 1, 1\rangle \equiv |1, 1\rangle$
- $|--\rangle = |1, -1\rangle$

porque acoplamos máximos de cada partícula lo que dará el máximo o mínimo en la suma; la única forma de tener $m = 1$ es con los dos spines up y la única forma de tener $m = -1$ es con los dos spines down.

Se hallan los otros con el operador de bajada

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

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

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

y ahora si opero con S_- ,

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

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

Luego, queda por hallar $|00\rangle$, que será algo como

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

y puedo usar ortonormalidad

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

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

Se puede ver entonces que son simétricos los miembros del triplete y antisimétricos los del singlete porque al intercambiar $+$ con $-$ en las expresiones cambian los valores o no cambian: ahí está la simetría. Usualmente interesa la matriz del cambio de base y sus coeficientes (los de Clebsh-Gordan).

5.2.2 Teoría formal de suma de momentos angulares

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

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

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

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

donde en el último renglón cada J actúa en el espacio en donde *vive*. El momento total \mathbf{J} cumple que

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

donde vemos que

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

pero

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

Esto deja dos opciones para elegir un CCOC

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

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

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

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

con la restricción de que $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$ y $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$. Los $C_{m_1 m_2}^j$ son los coeficientes de Clebsh-Gordan. Los coeficientes inversos son paridos desde

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

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

con $-j \leq m \leq j$ y con $j \rightarrow \infty$, porque la sumatoria en j es infinita, aunque se verá que muchos son nulos. En 2 la \sum sería en $j \rightarrow \infty$, pero veamos la relacion que hace algunos $C_{m_1 m_2}^j = 0$. Ante todo abreviaremos suprimiendo los índices j_1, j_2 con lo cual

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

Tenía anotado que en la base acoplada se suele abreviar no expresando los dos índices comunes j_1, j_2 en el ket.

En la página 51 de la carpeta bajo “caso general de suma de J” tengo anotadas algunas expresiones de resumen de la práctica que deberían repetir esto.

A partir de

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

se ve que

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

$$\hbar(m - m_1 - m_2) \langle m_1, m_2 |j, m\rangle = \hbar(m - m_1 - m_2) C_{m_1 m_2}^j = 0$$

entonces para que $C_{m_1 m_2}^j$ sea no nulo se necesita $m = m_1 + m_2$. Esta condición restringe los coeficientes un poco.

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

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

Notemos que para $j_1 \rightarrow 2j_1 + 1, j_2 \rightarrow 2j_2 + 1$; luego tendemos combinaciones por $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ en la base desacoplada.

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

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

y juntando todo se tiene

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

o lo que es equivalente

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

En la base desacoplada, la restricción limita el no llegar al infinito. Ambas bases tienen la misma dimensión si sumamos entre los límites dados

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} 2j+1 = (2j_1+1)(2j_2+1).$$

Recordemos que cada j tiene $2j+1$ estados posibles (los m correspondientes a cada j) ($|m| \leq j$).

Esta es una demostración más o menos deficiente. Podemos volver al ejemplo de $j_1 = 1/2$ y $j_2 = 1/2$ considerando

$$j \quad \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 1 \oplus 0$$

$$\dim \quad 2 \otimes 2 = 3 \oplus 1$$

Cualesquiera cosas que cumplan el álgebra del momento angular permiten hacer una analogía es un espacio símil.

Esto es un claim muy importante de group theory.

EJEMPLO 2.1 Partículas

Sean dos partículas con $j_1 = 2$ y $j_2 = 1$ que tendrán 5 y 3 estados posibles. El número total de estados posibles será quince. Veamos todas las combinaciones posibles en la base (m_1, m_2) que se pueden agrupar en la tabla siguiente

m	3	2	1	0	-1	-2	-3
(m_1, m_2)	(2, 1)	(1, 1)	(0, 1)	(-1, 1)	(2, 1)		
(m_1, m_2)		(2, 0)	(1, 0)	(0, 0)	(-1, 0)	(-2, 0)	
(m_1, m_2)			(2, -1)	(1, -1)	(0, -1)	(-1, -1)	(-2, -1)

Luego, se tienen

$$\begin{array}{lll}
 m = 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3 & j = 3 & 7 \text{ estados (septete)} \\
 m = 2, 1, 0, -1, -2 & j = 2 & 5 \text{ estados (quintuplete)} \\
 m = 1, 0, -1 & j = 1 & 3 \text{ estados (triplete)}
 \end{array}$$

Esto nos da los valores de j que podemos alcanzar; pero no nos dice que los estados son ellos todos. Así, $|j = 3, m = 2\rangle$ se forma como combinación lineal de $(1, 1)$ y $(2, 0)$. Me he construido de esta forma los multipletes $j = 3, j = 2, j = 1$ y se puede generalizar. Estuvimos haciendo

$$\begin{aligned}
 j \quad 2 \otimes 1 &= 3 \oplus 2 \oplus 1 \\
 \dim \quad 5 \otimes 3 &= 7 \oplus 5 \oplus 3
 \end{aligned}$$

Queremos calcular los coeficientes de Clebsh-Gordan

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle C_{m, m_2}^j \quad (2.3)$$

sumatorias sujeta a $m_1 + m_2 = m$.

Consideremos un caso sencillo: $j_1 = 1$ y $j_2 = 3/2$ de modo que $j = 5/2, 3/2, 1/2$. Si sumamos $j_1 = 1, j_2 = 3/2$ tendremos

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

Para hacer la cuenta (2.3) tengo 12 coeficientes muchos de los cuales serán nulos. Miramos de qué forma podemos llegar a $m_1 + m_2 = 3/2$, por ejemplo si es que queremos formar el estado $|1, 3/2; 5/2, 3/2\rangle$. Entonces, como

$$j_1 = 1 \rightarrow \{1, 0, -1\} \quad j_2 = \frac{3}{2} \rightarrow \left\{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right\}$$

obtengo $3/2$ con $(0, 3/2)$ y $(1, 1/2)$ de manera que tendremos

$$C_{0, 3/2}^{5/2} |1, 3/2; 0, 3/2\rangle + C_{1, 1/2}^{5/2} |1, 3/2; 1, 1/2\rangle$$

Como tenemos libertad de elegir fase para los coeficientes, elegimos que la matriz sea real y como es unitaria por ser un cambio de base, será ortogonal. El $|1, 3/2; 5/2, 5/2\rangle$ solo lo puedo alcanzar con los vectores paralelos sumados entre sí. El coeficiente de Clebsh-Gordan del más alto vale uno porque es el único. A partir de este puedo usar operadores de subida y de bajada para construirme los faltantes.

Por ortonormalidad se tiene

$$\begin{aligned}
 \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | &= \delta_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2 m_2} \\
 \sum_{j, m} |j_1, j_2; j, m\rangle \langle j_1, j_2; j, m|
 \end{aligned}$$

pero esta condición es fea y no la usaremos. Es más conveniente esta otra

$$\begin{aligned}\langle j', m' | j, m \rangle &= \delta_{j'j} \delta_{m'm} \\ \sum_{m_1, m_2} \langle j', m' | m_1, m_2 \rangle \langle m_1, m_2 | j, m \rangle &= \delta_{j'j} \delta_{m'm} \\ \sum_{m_1, m_2} \langle m_1, m_2 | j, m \rangle^2 &= 1\end{aligned}$$

siendo esto último la ortonormalidad.

Nos podemos construir a partir de uno con una recurrencia. Partimos de

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

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

y multiplicando por un bra $\langle m_1, m_2 |$ la expresión anterior, se llega a la relación de recurrencia

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

que nos dice que necesito conocer dos coeficientes para conocer otro.

5.3 Coeficientes de Clebsh-Gordan

Habíamos probado ciertas condiciones para los coeficientes de Clebsh-Gordan

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

con $m_1 + m_2 = m$ y donde j verifica $j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2|$.

Veamos un caso de sumar $\mathbf{L} + \mathbf{S}$ (momento angular más spin) en el caso de spin 1/2. Identificamos entonces $j_1 = \ell, m_1 = m_\ell, j_2 = 2 = 1/2$ y $m_2 = m_s = \pm 1/2$ Esto nos lleva a

$$|\ell - \frac{1}{2}| \leq j \leq \ell + \frac{1}{2}$$

y

$$j = \ell \pm \frac{1}{2} \quad \ell > 0 \quad j = \frac{1}{2} \quad \ell = 0$$

La expresión de [1] nos dice simplemente que sumando spin más momento angular se tiene $\ell + 1/2$ o $\ell - 1/2$ si están simétricos o antisimétricos.

Veamos los coeficientes de Clebsh-Gordan que no serán nulos, Tendremos dos estados

$$\begin{aligned} \left| \ell + \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \left\langle m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \left| \ell + \frac{1}{2} m \right\rangle \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \left\langle m - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left| \ell + \frac{1}{2} m \right\rangle \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \end{aligned}$$

donde el braket del primer término es A y el del segundo es B.

$$\begin{aligned} \left| \ell - \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \left\langle m - \frac{1}{2} \frac{1}{2} \left| \ell - \frac{1}{2} m \right\rangle \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \left\langle m + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left| \ell - \frac{1}{2} m \right\rangle \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \end{aligned}$$

donde el braket del primer término es C y el del segundo es D. Además se ve que no nulos serán $m = m_1 + m_2 = m_\ell \pm 1/2$ y $m_1 = m \pm 1/2$. Dado el caso que estamos tratando, S solo tiene dos valores que dan $m = m_1 + m_2$. Los coeficientes de Clebsh-Gordan vinculan los estados con $j = \ell \pm 1/2$ y m . Podemos poner todo en una matriz

Tiramos j_1, j_2 para simplificar la notación.

$$\ell - \frac{1}{2} \quad m \quad \ell + \frac{1}{2} \quad m$$

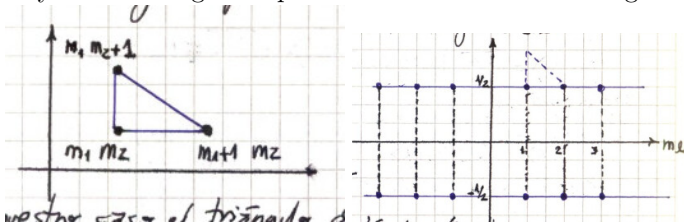
$$\begin{pmatrix} m + \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ m - \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D & B \\ C & A \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}$$

Acá hay que armar alguna cosa customizada para poner sobre los bordes de la matriz la equivalencia de filas columnas (yo me entiendo).

Por convención se toma coeficiente de $\sin \alpha > 0$. La equivalencia ha llegado a una matriz ortogonal por la realidad de sus coeficientes. Calcularemos algún coeficiente

$$\cos \alpha = \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \ell + \frac{1}{2}, m \right\rangle \right.$$

Hay un modelo gráfico para la recurrencia. Podemos graficar ahora



En nuestro caso el triángulo de recurrencia no conecta hacia arriba porque para spin solo tengo $+1/2$ o $-1/2$, con lo cual no tengo el trío sino un dúo de coeficientes. Trabajando encontramos que

$$\left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \ell + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle = \sqrt{\frac{(\ell + m + 1/2)}{\ell + m + 3/2}} \left\langle m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \ell + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2} \right. \right\rangle$$

Esta relación puede aplicarse hasta $m + 1/2 \rightarrow \ell$. Entonces llegamos a

$$\left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| \ell + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle = \sqrt{\frac{(\ell + m + 1/2)}{2\ell + 1}} \left\langle \ell, \frac{1}{2} \left| \ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} \right. \right\rangle$$

Llegamos a los máximos valores (todo en \hat{z} el momento angular, todo en \hat{z} el spin S) con lo cual debe dar el máximo y entonces el coeficiente debe dar uno $\langle \ell, 1/2 | \ell + 1/2, \ell + 1/2 \rangle = 1$. Identificamos

$$\sqrt{\frac{(\ell + m + 1/2)}{2\ell + 1}} \equiv \cos \alpha \quad \sqrt{\frac{(\ell - m + 1/2)}{2\ell + 1}} \equiv \sin \alpha$$

donde siempre podemos fijar inicialmente la fase para que sea real. Es útil en el acoplamiento spin-órbita. Allí teníamos

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

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} |\ell, s, j, m\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] = \begin{cases} \frac{\ell\hbar^2}{2} & j = \ell + \frac{1}{2} \\ -\frac{(1+\ell)\hbar^2}{2} & j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Sea una cosa con $\ell = 1, s = 1/2$ lo que significa $1 \otimes 1/2 = 3/2 \oplus 1/2$ o en términos de dimensiones $3 \otimes 2 = 4 \oplus 2$. Escribo un estado en términos de la base mostrada

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle$$

El término $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ aparece en el lagrangiano de interacción nuclear.

5.3.1 Uso de la tabla de Clebsh-Gordan

$j_1 \times j_2$		$J = 3/2$		$J = 1/2$	
m_1	m_2	M	C	M	C
1	1/2	3/2	$\sqrt{1/3}$	1/2	$\sqrt{2/3}$
1	-1/2	1/2	$\sqrt{2/3}$	-1/2	$\sqrt{1/3}$
0	1/2	-1/2	$\sqrt{1/3}$	1/2	$\sqrt{2/3}$
0	-1/2	-3/2	$\sqrt{2/3}$	-1/2	$\sqrt{1/3}$

El primero y el final siempre valen uno porque acoplan estados máximos o mínimos.

El $\sqrt{2/3}$ acopla $j = 3/2, M = 1/2, m_1 = 0, m_2 = 1/2$. Consideremos un ejemplo $2 \times 3/2$ lo cual corresponde a $j = 7/2, 5/2, 3/2, 1/2$.

$$\left| \frac{7}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{7}} \left| 0, \frac{3}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{4}{7}} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{7}} \left| 2, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

Miro en la tabla 2×3 .

Queremos ver cuándo un operador cumple propiedades vectoriales. En mecánica clásica teníamos la transformación ante rotaciones $V_i \rightarrow \sum_j R_{ij} V_j$ de modo que como $|\alpha\rangle \rightarrow D(R)|\alpha\rangle$ entonces

$$\langle \alpha | \mathcal{O} | \alpha \rangle \rightarrow \langle \alpha | D^\dagger(R) \mathcal{O} D(R) | \alpha \rangle \quad [\mathcal{O}, J] = 0$$

Supongamos una rotación infinitesimal, se escribe el $D(R) = \mathbb{1} - i\epsilon \mathbf{J} \cdot \hat{n}/\hbar$

$$D^\dagger \mathcal{O} D = \left(1 + \frac{i\epsilon \mathbf{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} \right) \mathcal{O} \left(1 - \frac{i\epsilon \mathbf{J} \cdot \hat{n}}{\hbar} \right) = \mathcal{O} + \frac{i\epsilon}{\hbar} [\mathcal{O}, \mathbf{J} \cdot \hat{n}] + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Al tomar valor medio resultará \mathcal{O} . Un operador vectorial en mecánica cuántica quedará definido al hacer el traspaso

$$\langle \alpha | V_i | \alpha \rangle \rightarrow \langle \alpha | D^\dagger V_i D | \alpha \rangle \equiv \sum_j R_{ij} \langle \alpha | V_j | \alpha \rangle$$

$$D^\dagger V_i D = \sum_j R_{ij} V_j$$

que es un operador vectorial, donde

$$V_i + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_i, \mathbf{J} \cdot \hat{n}] = \sum_j R_{ij} V_j$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$$

$$V_x + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_x, J_z] = V_x - \epsilon V_y$$

$$V_y + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_y, J_z] = V_y + \epsilon V_x$$

$$V_z + \frac{\epsilon}{i\hbar} [V_z, J_z] = V_z$$

Es buena pensar qué CL general produce el $|7/2, 3/2\rangle$.

Qué mal elegido justo que usamos orden \mathcal{O} y un operador \mathcal{O} .

Entonces, un operador es un operador vectorial cuando verifica que

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

y vemos que J es una especie de patrón de operadores vectoriales.

EJEMPLO 3.1 Ejercicio 1

Consideremos $s = 1/2, \ell = 1$ con $|\ell, s, m_\ell, m_s\rangle$ sujetos a $|\ell - s| \leq j \leq \ell + s$. Tenemos que elegir 1, 1/2 para formar el 3/2 lo que implica que $j \leq 3/2$ y $m_{\max} = 3/2$.

$$|3/2, 3/2\rangle = |1, 1/2, 1, 1/2\rangle$$

Usemos $J_- = L_- + S_-$

$$J_- |3/2, 3/2\rangle = \hbar\sqrt{3} |3/2, 1/2\rangle$$

y

$$L_- S_- |1, 1/2, 1, 1/2\rangle = \hbar(\sqrt{2} |1, 1/2, 0, 1/2\rangle + 1/\sqrt{3} |1, 1/2, 1, -1/2\rangle)$$

y luego

$$|3/2, 1/2\rangle = \sqrt{2/3} |1, 1/2, 0, 1/2\rangle + 1/\sqrt{3} |1, 1/2, 1, -1/2\rangle$$

Usamos la tabla para hallar los otros coeficientes

$$|3/2, -1/2\rangle = \sqrt{2/3} |1, 1/2, 0, -1/2\rangle + 1/\sqrt{3} |1, 1/2, -1, 1/2\rangle \quad |3/2, -3/2\rangle = 1 |1, 1/2, -1, -1/2\rangle$$

Faltan dos estados, y sale caminando mirando la tabla o completando por ortogonalidad que es el

$$|1/2, 1/2\rangle = \sqrt{2/3} |1, 1/2, -1, 1/2\rangle - \sqrt{1/3} |1, 1/2, 0, 1/2\rangle$$

(este es lo mismo que multiplicarlo todo por -1) y

$$\langle L_z \rangle = 2/3\hbar \quad \langle S_z \rangle = -\hbar/6 \quad \langle J_z \rangle = \hbar/2$$

EJEMPLO 3.2 Ejercicio 6

Tenemos dos partículas de spin 1/2

Parte a)

$$\text{Sujeto A} \rightarrow (S_{1x}, S_{1y}, S_{1z})$$

$$\text{Sujeto B} \rightarrow (S_{2x}, S_{2y}, S_{2z})$$

y el nulo es

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2; 1/2, -1/2\rangle - |1/2, 1/2; -1/2, 1/2\rangle)$$

La probabilidad de $S_{1z} = \hbar/2$ es 1/2, lo cual se ve a ojo. Pero la otra probabilidad no es tan fácil. Conviene escribir S_x en combinación lineal de autoestados de S_z

$$|1/2, 1/2, 1/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2, m_x = 1/2, -1/2\rangle + |1/2, 1/2, m_x = -1/2, -1/2\rangle)$$

$$|1/2, 1/2, -1/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2, m_x = 1/2, 1/2\rangle - |1/2, 1/2, m_x = -1/2, 1/2\rangle)$$

$$|1/21/2\rangle \otimes |1/2 - 1/2\rangle$$

Son los cuatro ortogonales (este es el problema)

$$|00\rangle = \frac{1}{2} (|1/2, 1/2, m_x = 1/2, -1/2\rangle + |1/2, 1/2, m_x = -1/2, -1/2\rangle + \\ |1/2, 1/2, m_x = 1/2, 1/2\rangle - |1/2, 1/2, m_x = -1/2, 1/2\rangle)$$

y

$$P(S_x = \hbar/2) = \frac{1}{2}.$$

Para la parte b) consideramos

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2, 1/2; 1/2, -1/2\rangle - |1/2, 1/2; -1/2, 1/2\rangle)$$

y como B mide $S_{2z} = \hbar/2$ se tiene

$$|\Psi\rangle_{\text{DM}} = |1/2, 1/2; -1/2, 1/2\rangle$$

pero A mide $-\hbar/2$ de tal manera que $P(S_{1z} = -\hbar/2) = 1$ puesto que A seguro mide $-\hbar/2$.

Si las partículas fueron separadas la medición de B afecta el resultado de A . Si B mide $S_{2z} = \hbar/2$ entonces ahora A mide con certeza $-\hbar/2$.

Luego, dos caminos

$$|00\rangle \begin{cases} P = 1/2 & |1/2, 1/2; 1/2, -1/2\rangle & \text{mide } A \text{ } -\frac{\hbar}{2} \text{ con } P = 1 \\ P = 1/2 & |1/2, 1/2; -1/2, 1/2\rangle & \text{mide } A \text{ } \frac{\hbar}{2} \text{ con } P = 1 \end{cases}$$

No se viola nada. Hay una correlación entre los estados; pero no se transmite información y por ello no violamos la relatividad.

5.3.2 Suma de L y S

Sea suma L y S , entonces

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Esto tórnase práctico para acoplamiento spin-órbita

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

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

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

5.4 Operadores vectoriales

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

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

En mecánica cuántica tenemos que al rotar

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

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

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

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

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

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

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

EJEMPLO 4.1 Fragmento de teoría en la práctica

Tal vez este cacho corresponda al capítulo siguiente. No lo sé a esta altura.

$$U_{\pm 1}^1 = \mp \frac{U_x \pm iU_y}{\sqrt{2}}, \quad U_0^1 = U_z$$

$$V_{\pm 1}^1 = \mp \frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}}, \quad V_0^1 = V_z$$

y quiero construirme tensores con estos elementos. El primero sale directo [?]

$$T_2^2 = U_1^1 V_1^1, \quad k = 2, 1, 0$$

y

$$T_1^2 = \square U_0^1 V_1^1 + \square U_1^1 V_0^1$$

y merced a la tabla de coeficientes de Clebsh-Gordan

$$T_1^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (U_0^1 V_1^1 + U_1^1 V_0^1)$$

Será también

$$T_0^2 = \square U_0^1 V_0^1 + \square U_{-1}^1 V_1^1 + \square U_1^1 V_{-1}^1$$

$$T_0^2 = \sqrt{\frac{2}{3}} U_0^1 V_0^1 + \sqrt{\frac{1}{6}} U_{-1}^1 V_1^1 + \sqrt{\frac{1}{6}} U_1^1 V_{-1}^1$$

finalmente $T_{-2}^2 = U_{-1}^1 V_{-1}^1$ y los otros los podemos construir fácilmente.

5.5 Operadores tensoriales

En mecánica clásica, un tensor transforma de la manera

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

que es un tensor de rango dos. Esto es un tensor cartesiano. Su problema es que no es irreducible, entonces puede descomponerse en objetos que transforman diferente ante rotaciones. Convendrá pasar de tensores escritos en bases cartesianas a bases esféricas. Sea la díada $U_i V_j$, tensor de rango dos, que puede escribirse como

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

que son términos de dimensión 1, 3, 5; un escalar, una matriz antisimétrica con traza nula y un término de traza no nula. Hemos reducido el tensor cartesiano en tensores irreducibles ante rotaciones. Podemos asociar esta descomposición con las multiplicidades de objetos con momento angular $\ell = 0, \ell = 1, \ell = 2$. Es decir que,

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

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

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

Se define

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

donde $-k \leq q \leq k$ y son $(2k+1)$ objetos. Un tensor esférico de rango k se transforma como

$$\mathcal{D}(R)T_{q'}^{(k)}\mathcal{D}(R)^\dagger = \sum_{q=-k}^k \mathcal{D}(R)_{qq'}^{(k)}T_{q'}^{(k)} \quad (5.1)$$

Tendremos un tensor esférico de rango 0 ($\ell = 0$), un escalar, que denotaremos

$$s = T_0^{(0)},$$

un tensor esférico de rango 1 ($\ell = 1$), vector,

$$(T_1^{(1)}, T_0^{(1)}, T_{-1}^{(1)})$$

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

$$\begin{aligned} Y_\ell^m(\theta, \varphi) &= Y_\ell^m(\hat{n}) \xrightarrow{\text{paso}} \widehat{\hat{n} \longrightarrow \vec{v}} \quad Y_\ell^m(\vec{v}) \equiv Y_k^q(\vec{v}) = T_q^{(k)} \\ \hat{n} &= (n_x, n_y, n_z) = \left(\frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r}\right) \longrightarrow \mathbf{v} = (rn_x, rn_y, rn_z) \\ \hat{n} &= (\cos(\phi)\sin(\theta), \sin(\phi)\sin(\theta), \cos(\theta)) \\ Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}n_z \longrightarrow T_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}V_z \\ Y_1^{\pm 1} &= \mp\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{n_x \pm in_y}{\sqrt{2}} \longrightarrow T_{\pm 1}^{(1)} = \mp\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Calculando en (5.1), con una $\mathcal{D}(R)$ del tipo de una rotación infinitesimal, llegamos a las relaciones de conmutación para tensores.

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

donde vemos que el tensor le suma q unidades de \hbar .

Cualquier vector lo puedo escribir como combinación lineal de la base $T_1^{(0)}, T_{\pm 1}^{(1)}$.

Teorema de Wigner-Eckart

Este teorema facilita el cálculo de elementos de matriz de un tensor. Un operador cualquiera puede descomponerse tensorialmente. Es importante para el cálculo de transiciones evaluar elementos de matriz de operadores tensoriales. Si determino qué coeficientes son nulos entonces eso significa que no hay probabilidad entre ellos.

Los elementos matriciales de operadores tensoriales respecto de auto-estados de momento satisfacen

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

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

La regla de selección se construye

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

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

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

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

Este coeficientes será nulo si $m' = m + q$ pues $T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle \propto | \alpha, j, m + q \rangle$

El teorema nos dice que

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

donde el valor de este último coeficiente es independiente de la componente q y de m, m' . Estos elementos de matriz tienen reglas de selección parecidas a las de los coeficientes de Clebsh-Gordan. En efecto, la expresión (1) será nula salvo cuando $m' = m + q, |j - k| \leq j' \leq j + k$. Veamos cómo demostrar dicha expresión.

Una idea de la demostración del teorema parte de que

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

que se descompone a

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

Pero ésta es la misma relación de recurrencia vista para los coeficientes de Clebsh-Gordan, si reemplazamos

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

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

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

Logramos la igualdad metiendo una constante $C(j, j', k)$ independiente de m', q, m de tal manera que

$$\begin{aligned} \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j, m \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \pm 1 | j_1, j_2; j, m \rangle = \\ \langle j_1, k; m, q \pm 1 | j, k; j', m' \rangle C(j, j', k). \end{aligned}$$

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

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

EJEMPLO 0.1 Ejemplo del teorema para escalares y vectores

Sea un escalar (número), o bien un tensor de rango cero $S = T_0^{(0)}$, entonces

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

que es el coeficiente de Clebsh-Gordan de sumar $j + 0 = j$, salvo que $j = j'$ es nulo, por lo cual aparece $\delta_{j'j}$; pero $m + 0 = m = m'$ y entonces

$$\langle \alpha', j', m' | T_0^{(0)} | \alpha, j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm} \frac{\langle \alpha', j' | S | \alpha, j \rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

se ve que el S no conecta estados con m, j diferentes. La transición es independiente de m lo cual puede mostrarse así

$$(j = 5, m = 5) \rightarrow (j = 5, m = 5) \equiv (j = 5, m = 4) \rightarrow (j = 5, m = 4).$$

Sea ahora un vector (tensor de rango uno):

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

Como $k = 1$ se tienen $q = 1, 0, -1$, lo cual conduce a que

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

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

Entonces, el vector conectará estados con $j - j' = \pm 1, 0$. No produce transiciones entre j y j' alejados en más de una unidad. Para m tendré lo mismo. La constante que completa la proporcionalidad será la misma para varios coeficientes. Esto tiene suma importancia en la conexión de estados $j = 0 + 1 = 1$.

6.1 Teorema de proyección

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

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

Como caso especial, si $\alpha' = \alpha$ estoy en un subespacio donde coinciden los números cuánticos salvo m . Allí vale que

$$V_{\alpha,j} = \frac{\langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} \rangle_{\alpha,j}}{\hbar^2 j(j+1)} \mathbf{J},$$

donde los subíndices α, j implican respecto a quien estoy tomando valor medio. Esto vale para cualquier vector en el mismo subespacio,

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

Intentemos probar esto. Reescribimos, con otra normalización, lo siguiente:

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{V} = J_0 V_0 - J_{+1} V_{-1} - J_{-1} V_{+1}$$

$$V_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x \pm i V_y)$$

$$V_0 = V_z, \quad J_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} J_{\pm}, \quad J_0 = J_z$$

y luego

$$\begin{aligned} \langle \alpha', j, m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, j, m \rangle &= m \hbar \langle \alpha', j, m | V_0 | \alpha, j, m \rangle + \\ &\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(j-m)(j-m+1)} \langle \alpha', j, m-1 | V_{-1} | \alpha, j, m \rangle + \\ &-\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \langle \alpha', j, m+1 | V_{+1} | \alpha, j, m \rangle \end{aligned}$$

Cada una de las tres componentes del segundo miembro es proporcional a $\langle \rangle$ lo que lleva a

$$\langle \alpha', j, m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha', j, m \rangle = C_{j,m} \langle \alpha, j | \mathbf{V} | \alpha, j \rangle$$

donde C_{jm} en realidad solo depende de j . Consideremos ahora $\mathbf{V} = \mathbf{J}$ y $\alpha = \alpha'$ (nos metemos en un subespacio).

$$\langle \alpha, j, m | \mathbf{J}^2 | \alpha, j, m \rangle = C_j \langle \alpha, j | \mathbf{V} | \alpha, j \rangle$$

y entonces

$$\frac{\langle \alpha', j, m' | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, j, m \rangle}{\langle \alpha, j, m' | \mathbf{J}^2 | \alpha, j, m \rangle} = \frac{\langle \alpha', j | \mathbf{V} | \alpha, j \rangle}{\langle \alpha, j | \mathbf{J} | \alpha, j \rangle}.$$

Ahora introducimos el teorema de Wigner-Eckart,

$$\frac{\langle \alpha', j, m' | V_q | \alpha, j, m \rangle}{\langle \alpha, j, m' | J_q | \alpha, j, m \rangle} = \frac{\langle \alpha', j | \mathbf{V} | \alpha, j \rangle}{\langle \alpha, j | \mathbf{J} | \alpha, j \rangle} \frac{\text{CG } (2j+1)^{-1/2}}{\text{CG } (2j+1)^{-1/2}}$$

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

Puede pensarlo como $|\alpha, j, m\rangle = |\alpha, j\rangle \otimes |m\rangle$ y

$$\langle \alpha, j | \langle j, m' | V_q | \alpha, j \rangle | j, m \rangle \propto \langle \alpha, j | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, j \rangle,$$

siendo el yeite el hecho de que dentro de un subespacio todos los vectores son proporcionales entre sí.

6.1.1 Aplicación del teorema de proyección

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

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

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

Si meto un campo B en \hat{z} tendré

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

lo cual debería romper la degeneración. Pero este factor 2 no puedo saber cómo operarlo porque los números cuánticos E, ℓ, s, j, m no dan manera de sperarar cuanto de L_z y cuánto de S_z , pues asocié j a $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ y no a $\mathbf{J} = \mathbf{L} + 2\mathbf{S}^1$.

Utilizando el teorema de proyección para escribir \mathbf{L} y \mathbf{S} en términos de \mathbf{J} se puede escribir

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

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

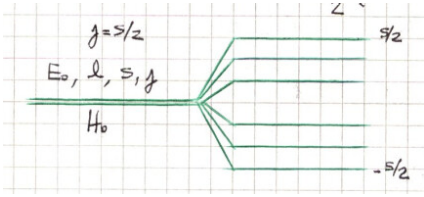
$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{L} = L^2 + \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

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

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

¹Podría hacerlo con *brute force* pasando a una base desacoplada donde tengo m_ℓ y m_s como números cuánticos.

El factor 2 que acompaña al S_z no es una boludez demostrarlo; es el factor giromagnético de Landé.



EJEMPLO 1.1 Ejercicio 9

Para un vector en \mathbb{R}^3 , rotación en \hat{y} es

$$M \equiv \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix}$$

Luego,

$$M \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta V_x + \sin \beta V_z \\ V_y \\ -\sin \beta V_x + \cos \beta V_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix}$$

Los vectores transforman $V'_i = R_{ij} V_j$

$$V'_z = \sum_{q'} d_{qq'}^{(1)} V_q^{(1)} \quad V_q^{(1)} = \sum_{q'} d_{qq'}^{(1)} V_q^{(1)}$$

y

$$V_z = V_0^1, \quad V'_0 = \sum_{q'} d_{0q'} V_{q'}$$

donde

$$d_{0q'} = \left(\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}, \cos \beta, -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \right)$$

y entonces tendremos para V'_0

$$V'_0 = \left(\frac{\sin \beta}{\sqrt{2}}, \cos \beta, -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \right) \begin{pmatrix} V_1^1 \\ V_0^1 \\ V_{-1}^1 \end{pmatrix}$$

y

$$V'_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta [V_1^1 - V_{-1}^1] + \cos \beta V_0^1$$

$$V'_{\pm 1} = \mp \left(\frac{V_x \pm i V_y}{\sqrt{2}} \right) V_0 = -\sin \beta V_x + \cos \beta V'_0$$

Los otros pueden hacerse en forma similar.

EJEMPLO 1.2 Ejercicio 10

Teorema de Wigner-Eckart, sistema con momento angular $\{|\alpha, j, m\rangle\} \Leftrightarrow \{H, J^2, J_z\}$ y sea T_q^k un tensor esférico.

$$\langle \alpha', j', m' | T_q^k | \alpha, j, m \rangle = \langle j, k, m, q | j, k, j', m' \rangle \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha', j' || T || \alpha, j \rangle$$

Sabemos que los coeficientes de Clebsh-Gordan no nulos serán $m' = m + q$ tales que $|j - k| \leq j' \leq j + k$. Tengo (1) que no sé que es y

$$\left\langle n', \ell', m' \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) \right| n, \ell, m \right\rangle$$

y lo quiero llevar a algo en que pueda aplicar W-E, entonces

$$(-1) \langle n', \ell', m' | T_1^1 | n, \ell, m \rangle = (-1) \langle \ell, 1, m, 1 | \ell, 1, \ell', m + 1 \rangle \text{cte.}$$

y los que sobreviven son estos: con $\ell = 0$ hacia $\ell' = 1$ se tiene

$$(-1) \text{cte} \langle 0, 1, 0, 1 | 0, 1, 1, 1 \rangle$$

Pero para (2)

$$\langle m', \ell', m' | z | m, \ell, m \rangle = \langle T_0' \rangle \langle n', \ell', m' | T_0' | n, \ell, m \rangle \neq 0$$

si $|\ell - 1| \leq \ell' \leq \ell + 1$ y $m = m'$.

EJEMPLO 1.3 Ejercicio 11

Conviene escribir lo que está en el sandwich como combinación lineal de los tensores esféricos.

$$\begin{aligned} V_0^1 &= z & V_1^1 &= -\frac{(x + iy)}{\sqrt{2}} & V_{-1}^1 &= \frac{(x + iy)}{\sqrt{2}} \\ T_2^2 &= V_1^1 V_1^1 = \frac{1}{2}(x^2 - y^2 + 2ixy) \\ T_{-2}^2 &= V_{-1}^1 V_{-1}^1 = \frac{1}{2}(x^2 - y^2 - 2ixy) \end{aligned}$$

Simetrías en mecánica cuántica

Las simetrías son las que originan las fuerzas, en algún sentido. Desde el punto de vista actual las fuerzas (interacciones) tienen su origen en simetrías básicas que cumplen los constituyentes de la materia. Esta característica de las simetrías es amén del hecho de su utilidad para resolver problemas.

En mecánica clásica tenemos el teorema de Noether

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

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

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{d}{dt} (p_i) = 0 \quad \rightarrow \quad \partial p_i = cte.$$

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

$$\$ = \mathbb{1} - i \frac{\varepsilon}{\hbar} G \quad G \equiv \text{generador hermítico (de la transf.)}$$

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

$$S^\dagger H S = H \quad \rightarrow \quad [H, \$] = 0$$

Luego,

$$[H, G] = 0 \rightarrow \frac{dG}{dt} = 0 \rightarrow G \text{ es cte. de movimiento}$$

es decir que el generador de la transformación es una constante. Esto significa que el autovalor asociado no varía con el tiempo. Es algún *deja vu* del teorema de Noether de la mecánica clásica.

Sea $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, luego como $[H, G] = 0$ se tiene

$$G|n\rangle = k|n\rangle \quad \text{pués} \quad H(G|n\rangle) = E_n(k|n\rangle)$$

de modo que tienen la misma base de autoestados. Si no hay degeneración

$$G|n\rangle = k(\text{fase})|n\rangle$$

mientras que si hay degeneración $G|n\rangle \neq |n\rangle$. Invariancia frente a traslaciones $G = \mathbf{p}$ e invariancia frente a rotaciones $G = \mathbf{J}$ [?]. Acá tal vez quise poner invariancia frente a traslaciones, \mathbf{p} constante y frente a rotaciones \mathbf{J} constante.

Hay degeneraciones, por ejemplo con $[H, J^2] = 0$ entonces $[H, J_z]$ lleva a degeneración $2j + 1$ para $|n, \ell, m\rangle$.

7.0.1 Transformaciones discretas

Durante algún tiempo se consideraron solo tres transformaciones discretas; P(paridad), C(carga) y T(inversión temporal). Toda interacción debería verificar estas tres simetrías. Se vio en los 50's que la fuerza débil no cumple, en forma separada, CPT pero que las maneras de no cumplirla es tal que se conserva CPT como un todo (siempre se deja de cumplir de igual manera).

Simetría de paridad

Es la reflexión especular. Transforma un RHS en LHS. Es decir que hace

$$\mathbf{x} \longrightarrow -\mathbf{x}$$

con una matriz asociada

$$R = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

En mecánica cuántica solicitaremos un operador unitario llamado paridad que verifique

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

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

$$\langle \alpha' | \mathbf{x} | \alpha' \rangle = -\langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle$$

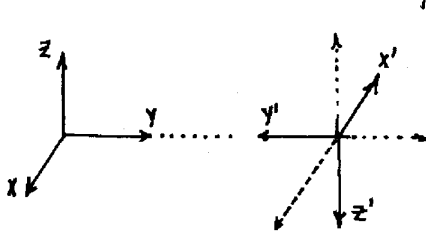


Figura 0.1

$$\langle \alpha | \Pi^\dagger \mathbf{x} \Pi | \alpha \rangle = -\langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle \rightarrow \Pi^\dagger \mathbf{x} \Pi = -\mathbf{x}$$

y entonces

$$\{\mathbf{x}, \Pi\} = 0,$$

anticonmuta con \mathbf{x} . Debido a ello

$$\Pi | \mathbf{x}' \rangle = | -\mathbf{x}' \rangle \quad \Pi^2 \equiv \mathbb{1}$$

lo cual dice que los autovalores son ± 1 y Π es unitario y hermítico. Como $\hat{\Pi}$ no depende del tiempo (lo aplico a \mathbf{P})

No veo el vínculo de que no variando con el tiempo se aplique a \mathbf{p} .

$$\Pi^\dagger \mathbf{p} \Pi = \Pi^\dagger \frac{d\mathbf{x}}{dt} \Pi = \frac{d}{dt} (\Pi^\dagger \mathbf{p} \Pi) = \frac{d-\mathbf{x}}{dt} \rightarrow \{\mathbf{p}, \Pi\} = 0$$

y vemos que anticonmuta con \mathbf{p} . Se ve que \mathbf{x} , \mathbf{p} son operadores impares.

En cambio, el pseudovector $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ es un operador par, entonces

$$[\mathbf{L}, \Pi] = 0 \quad [\mathbf{J}, \Pi] = 0$$

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

$$[\Pi, \mathcal{D}(R)] = 0 \longrightarrow [\Pi, \mathbf{J}] = 0,$$

donde $\mathcal{D}(R) = \exp(-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi/\hbar)$, puesto que esta cosa vale en mecánica clásica, donde se tenía

$$R^{(\text{paridad})} R^{(\text{rotación})} = R^{(\text{rotación})} R^{(\text{paridad})},$$

y por ello se le pide que lo mismo valga en mecánica cuántica. Esto nos dice que \mathbf{J} es un operador par (un pseudovector).

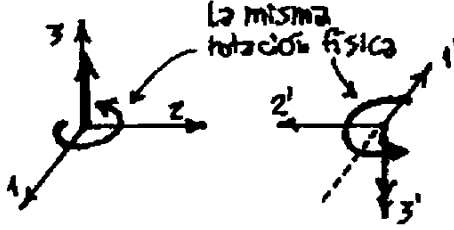


Figura 0.2

Veamos cómo actúa sobre vectores y sobre escalares (productos internos),

$$\Pi^\dagger \square \Pi = \begin{cases} +\square & \text{par vector axial (pseudovector)} \\ -\square & \text{impar vector polar} \end{cases}$$

$$\Pi^\dagger \square \Pi = \begin{cases} +\square & \text{par escalar} \\ -\square & \text{impar pseudoescalar} \end{cases}$$

Así, por ejemplo, para $\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}$ pseudoescalar se tiene

$$\Pi^\dagger \mathbf{S} \cdot \mathbf{x} \Pi = \Pi^\dagger \mathbf{S} \Pi \cdot \Pi^\dagger \mathbf{x} \Pi = \mathbf{S} \cdot (-\mathbf{x}) = -\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}.$$

Veamos ahora qué sucede con la función de onda bajo paridad.

$$\Psi_\alpha(x') = \langle x' | \alpha \rangle = \langle x' | \Pi | \alpha \rangle = \langle x' | \alpha' \rangle = \langle -x' | \alpha \rangle$$

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

$$\Psi_{\alpha'}(x') = \Psi_\alpha(-x').$$

Sea $|\alpha\rangle$ autoestado de paridad, entonces considerando que $[H, \Pi] = 0$ y no hay degeneración (como en el caso del oscilador armónico),

$$\Pi |\alpha\rangle = \pm |\alpha\rangle$$

los autovalores serán ± 1

$$\langle x' | \alpha' \rangle = \pm \langle x' | \alpha \rangle = \langle -x' | \alpha \rangle$$

$$\Psi_\alpha(-x') = \begin{cases} +\Psi_\alpha(x') & \text{función de onda par} \\ -\Psi_\alpha(x') & \text{función de onda impar} \end{cases}$$

no toda función de onda tiene paridad bien definida. No hay que confundir la paridad de la función de onda con la del operador. Un hamiltoniano que se conmute con Π tendrá una descomposición en una parte par y en una impar.

Consideremos ahora problemas con simetrías radial, y queremos ver qué hace el operador paridad allí. El cambio de paridad

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

involucra

$$(r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \phi \rightarrow \phi + \pi).$$

Entonces para

$$\langle x' | \alpha, \ell, m \rangle = R_\alpha(r) Y_\ell^m(\theta, \phi),$$

con el cambio $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ será

$$Y_\ell^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi)$$

entonces

$$\Pi |\alpha, \ell, m\rangle = (-1)^\ell |\alpha, \ell, m\rangle$$

donde ℓ define la paridad y $(-1)^\ell$ es el autovalor de paridad. Si $[H, \Pi] = 0$ y no hay degeneración

$$H |\alpha\rangle = E_\alpha |\alpha\rangle \quad \Pi |\alpha\rangle = \pm |\alpha\rangle$$

Para la partícula libre es $H = p^2/(2m)$ y $[H, \Pi] = 0$ pero lo feo es que siendo $|\mathbf{p}'\rangle$ autoestado de H , no es autoestado de Π ,

$$\Pi |\mathbf{p}'\rangle = |-\mathbf{p}'\rangle.$$

Esto surge por la degeneración de que $|\mathbf{p}'\rangle, |-\mathbf{p}'\rangle$ tienen la misma energía.

Luego, tengo que utilizar la *manganeta* habitual

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}'\rangle + |-\mathbf{p}'\rangle)$$

y

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\mathbf{p}'\rangle - |-\mathbf{p}'\rangle)$$

que verifican

$$\Pi |S\rangle = +1 |S\rangle \quad \Pi |A\rangle = -1 |A\rangle.$$

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

EJEMPLO 0.1 De paridad

Sean $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ autoestados cumpliendo que

$$\Pi |\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\alpha\rangle \quad \Pi |\beta\rangle = \varepsilon_\beta |\beta\rangle$$

donde $\varepsilon_{\alpha,\beta} = \pm 1$ Luego $\langle \alpha | \mathbf{X} | \beta \rangle = 0$ si $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta$

$$\langle \beta | \pi^2 \mathbf{X} \pi^2 | \alpha \rangle = -\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \langle \beta | \mathbf{X} | \alpha \rangle = \langle \beta | \mathbf{X} | \alpha \rangle$$

entonces se tienen que

$$\begin{cases} \varepsilon_\alpha = -\varepsilon_\beta & \text{el elemento no será nulo.} \\ \varepsilon_\alpha \neq -\varepsilon_\beta & \text{el elemento es nulo.} \end{cases}$$

Entonces

$$\langle \alpha | \mathbf{X} | \alpha \rangle = 0.$$

La utilidad de esto es que dada la paridad podemos descartar probabilidades. Dos cosas pares no pueden interactuar con una impar y así.

7.0.2 Teorema

Sea $[H, \pi] = 0$ y $|n\rangle$ autoestados no degenerados de H

$\Rightarrow |n\rangle$ es autoestado de Π .

La demostración

$$\left(\frac{1}{2} \pm \frac{\Pi}{2}\right) |n\rangle = \frac{\Pi^2 \pm \Pi}{2} |n\rangle = \Pi \left(\frac{\pm 1 + \Pi}{2}\right) |n\rangle = \pm \Pi \frac{1 \pm \Pi}{2} |n\rangle$$

y entonces es autoestado de paridad con autovalor ± 1 .

$$H \frac{1}{2} (1 \pm \Pi) |n\rangle = \frac{1}{2} E_n |n\rangle \pm \frac{E_n}{2} \Pi |n\rangle = E_n \left[\left(\frac{1}{2} \pm \frac{\Pi}{2} \right) \right]$$

y es autoestado de H , de manera que

$$\left(\frac{1 \pm \Pi}{2}\right) |n\rangle = |n\rangle \Rightarrow |n\rangle \quad \text{es autoestado de paridad}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} |n\rangle \pm \frac{\Pi}{2} |n\rangle &= |n\rangle \\ \pm \frac{\Pi}{2} |n\rangle &= + \frac{|n\rangle}{2} \Rightarrow \Pi |n\rangle = \pm |n\rangle \end{aligned}$$

Un caso donde falla el teorema

$$[H, \Pi] = 0 \quad \text{con} \quad H = \frac{p^2}{2m}$$

pero $|p'\rangle$ no es autoestado de Π por la degeneración $|p'\rangle, |-p'\rangle$ son ambos correspondientes al autovalor $p'^2/2m$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} |p'\rangle = \frac{p'^2}{2m} |p'\rangle \quad \frac{\hat{p}^2}{2m} |-p'\rangle = \frac{p'^2}{2m} |-p'\rangle$$

$$\Pi |p'\rangle = |-p'\rangle$$

y $|p'\rangle$ no es autoestado de Π .

Para un oscilador armónico será

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad [H, \Pi] = 0$$

y los estados tienen paridad definida, no son degenerados. Luego, $|n\rangle$ tendrán paridad $(-1)^n$.

7.0.3 Reglas de selección de paridad Π

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

$$\Pi |\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\alpha\rangle \quad \Pi |\beta\rangle = \varepsilon_\beta |\beta\rangle$$

siendo para el caso impar

$$\langle \beta | \square | \alpha \rangle = - \langle \beta | \Pi^\dagger \square \Pi | \alpha \rangle = -\varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \langle \beta | \square | \alpha \rangle,$$

y en el caso par

$$\langle \beta | \square | \alpha \rangle = \langle \beta | \Pi^\dagger \square \Pi | \alpha \rangle = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta \langle \beta | \square | \alpha \rangle$$

Si el operador \square es impar (como \mathbf{x}, \mathbf{p}) entonces $\varepsilon_\alpha = 1, \varepsilon_\beta = -1$ o bien $\varepsilon_\alpha = -1, \varepsilon_\beta = 1$.

Si el operador \square es par (como \mathbf{L}, \mathbf{S}) entonces $\varepsilon_\alpha = 1, \varepsilon_\beta = 1$ o bien $\varepsilon_\alpha = -1, \varepsilon_\beta = -1$.

- Operadores impares solo conectan estados de paridad opuesta.
- Operadores pares solo conectan estados de la misma paridad.

Partiendo desde

$$\langle \beta | \mathbf{x} | \alpha \rangle = 0,$$

entonces tenemos

$$\int \int dx' dx'' \langle \beta | x'' \rangle \langle x'' | \mathbf{x} | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = 0$$

y como es $\langle x'' | \mathbf{x} | x' \rangle = x' \delta(x' - x'')$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \beta | x' \rangle x' \langle x' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \Psi_\beta^*(x') x' \Psi_\alpha(x')$$

EJEMPLO 0.2 Ejercicio 2

Sea T_j traslación y $\mathcal{D}(\hat{n}, \phi)$. Habría que probar, parece que

- a) $[T_j, T_{j'}] = 0$
- b) $[\mathcal{D}(\hat{n}', \phi), \mathcal{D}(\hat{n}, \phi)] \neq 0$
- c) $[T_j, \Pi] \neq 0$
- d) $[\mathcal{D}(\hat{n}, \phi), \Pi] = 0$

Esto podría hacerse empleando background de anteriores capítulos.

EJEMPLO 0.3 Ejercicio 4

Se tiene

$$Y_{\ell}^{j=\ell \pm 1/2, m} = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{\ell \pm m + 1/2} & Y_{\ell}^{m-1/2}(\theta, \varphi) \\ \pm\sqrt{\ell \mp m + 1/2} & Y_{\ell}^{m+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

El problema es una combinación de $s=1/2$ sumado a un potencial esféricamente simétrico; es decir espacios del tipo $\langle \theta, \varphi | \ell, m \rangle \otimes |\text{spin}\rangle$. Los estados de spin son los de siempre $|+\rangle, |-\rangle$ y se tiene $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ con $|\ell - s| \leq j \leq |\ell + s|$.

La parte a) es sencillamente

$$Y_{\ell=0}^{j=1/2, m=1/2} = \begin{pmatrix} Y_0^0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

La parte b) involucra obtener $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}) Y_{\ell=0}^{j=1/2, m=1/2}$ en términos de $Y_{\ell}^{j, m}$. El producto escalar de $\boldsymbol{\sigma}$ se pone en función de armónicos esféricos, lo cual será

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x} = r(\sin \theta \cos \varphi \sigma_x + \sin \theta \sin \varphi \sigma_y + \cos \varphi \sigma_z)$$

y entonces

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x} Y_{\ell=0}^{j=1/2, m=1/2} = \frac{r}{\sqrt{4\pi}} \left(\begin{bmatrix} 0 \\ \cos \theta \sin \varphi \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ i \sin \theta \sin \varphi \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \cos \varphi \\ 0 \end{bmatrix} \right)$$

lo cual se puede, usando la tablita de armónicos esféricos, llevar a la forma

$$\frac{r}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \frac{r}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} Y_1^0(\varphi, \theta) \sqrt{4\pi/3} \\ Y_1^1(\varphi, \theta) \sqrt{8\pi/3} \end{pmatrix} = -r Y_{\ell=1}^{j=1/2, m=1/2}.$$

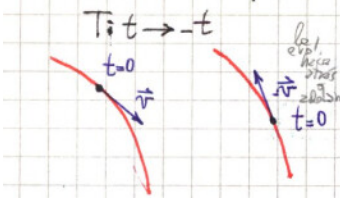
La parte c) empezamos con $\ell = 0$ finalizando con $\ell = 1$. El $\mathbf{s} \cdot \mathbf{x} = \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}$ no varía ante rotaciones por ser un escalar. Entonces por qué varió ℓ , la respuesta es porque $\mathbf{s} \cdot \mathbf{x}$ es un pseudoescalar y la transformación es de paridad. La paridad del estado final es impar.

7.1 Inversión temporal (reversión de movimiento)

Es simplemente el reemplazo

$$t \longrightarrow -t$$

que en mecánica clásica sería como *pasar la película hacia atrás*. Los sistemas que verifican esta simetría son aquellos para los cuales no es distinguible la evolución hacia atrás o hacia adelante. En mecánica clásica los sistemas no disipativos cumplen estas condiciones; en lo referente a ir y volver partiendo y terminando en un mismo punto con iguales condiciones.



Esto surge del carácter de las ecuaciones de Newton. En sistemas sin fuerzas disipativas se tiene

$$m\ddot{x} = -\frac{d}{dx}V(x)$$

siendo $x(t)$ y $x(-t)$ soluciones de $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ puesto que si $t \rightarrow -t$ se tiene

$$m\ddot{x} = -\frac{d}{dx}V(x)$$

dado que

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} = \frac{d^2x(-t)}{dt^2}.$$

En un sistema disipativo existe una pérdida de energía en ir y venir por lo cual no acabamos en la misma situación.

En mecánica cuántica tendremos

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V \right) \Psi(x, t)$$

y si hacemos el cambio $t \rightarrow -t$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, -t)}{\partial t} = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V \right) \Psi(x, t)$$

se ve que $\Psi(x, -t)$ no es solución de Schrödinger. La ecuación de Schrödinger no se queda inamovible ante tal cambio.

Pero notemos que $\Psi^*(x, -t)$ sí cumple la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*(x, -t)}{\partial t} = -i\hbar \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t}$$

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

$$\Psi_\alpha(x') = \langle x' | \alpha \rangle \quad \Psi_\alpha^*(x') = \langle x' | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | x' \rangle.$$

Se necesitará un operador $\hat{\Theta}$, y veremos que no puede ser unitario. Dados dos estados

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \hat{\Theta} |\alpha\rangle \quad |\tilde{\beta}\rangle = \hat{\Theta} |\beta\rangle,$$

si el operador era unitario se tenía que se conservaba el producto interno

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \hat{\Theta}^\dagger \hat{\Theta} | \alpha \rangle = \langle \beta | \mathbb{1} | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle$$

y no obtengo un producto interno conjugado.

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

- Antiunitariedad

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$$

- Antilinealidad

$$\hat{\Theta}[C_\alpha |\alpha\rangle + C_\beta |\beta\rangle] = C_\alpha^* \hat{\Theta} |\alpha\rangle + C_\beta^* \hat{\Theta} |\beta\rangle$$

Todo operador antiunitario y antilineal puede escribirse como producto

$$\Theta = UK$$

donde U es unitario y K la conjugación compleja, que opera

$$Kc |\alpha\rangle = c^* K |\alpha\rangle.$$

Queremos ver qué hace K y para ello consideramos un $|\alpha\rangle$ tal que

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \quad K |\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle a' | \alpha \rangle^* K |a'\rangle$$

donde vemos que en el segundo término no hace nada; K sobre un autoestado no cambia nada, pues $|\alpha\rangle$ es un autoestado en la base canónica. La expresión del operador K dependerá de la base sobre la cual trabaje.

Para ver que un operador es antiunitario simplemente deberíamos chequear si cumple las propiedades 1 y 2. Así

$$UK(c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle) = c_\alpha^* UK |\alpha\rangle + c_\beta^* UK |\beta\rangle$$

y vemos que UK es antilineal.

Los operadores antiunitarios actúan de forma misteriosa sobre un bra.

EJEMPLO 1.1 Descolgado

K no cambia los autoestados, porque en base canónica un autoestado tiene un solo elemento (1) que no es nulo.

$$\begin{aligned} K(C|\alpha\rangle) &= CK|\alpha\rangle = C^*K(\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle) = \\ &= C^*(\sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*K|a'\rangle) = C^*(\sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*|a'\rangle) \end{aligned}$$

Veamos que UK es antiunitario. Tenemos dos estados

$$|\hat{\alpha}\rangle = UK|\alpha\rangle = \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*U|a'\rangle \quad |\hat{\beta}\rangle = UK|\beta\rangle = \sum_{a''}\langle a''|\beta\rangle^*U|a''\rangle,$$

y sobre este último tomo dual conjugado, lo cual puede verse como un *trick* para no reverla cómo opera K sobre un bra,

$$\langle\hat{\beta}| = \sum_{a''}\langle a''|\beta\rangle\langle a''|U^\dagger$$

entonces, desarrollando

$$\langle\hat{\beta}|\hat{\alpha}\rangle = \sum_{a''}\langle a''|\beta\rangle\langle a''|U^\dagger\sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*U|a'\rangle,$$

se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{a',a''}\langle a''|\beta\rangle\langle a'|\alpha\rangle^*\langle a''|U^\dagger U|a'\rangle &= \sum_{a'}\langle a'|\beta\rangle\langle a'|\alpha\rangle^* = \\ &= \sum_{a'}\langle\beta|a'\rangle^*\langle a'|\alpha\rangle^* = \langle\beta|\alpha\rangle^* \end{aligned}$$

y entonces UK es antinunitario.

Notemos que no se define $\hat{\Theta}^\dagger$ actuando sobre bras. La demostración anterior esperó a quitarse de encima \hat{K} para hacer dual conjugado al $|\hat{\beta}\rangle$.

7.1.1 Operadores ante $\hat{\Theta}$

Usaremos la notación

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

donde $|\tilde{\alpha}\rangle$ es el estado reversión temproal. Es de esperar que si $\Pi|\mathbf{x}\rangle = |-\mathbf{x}\rangle$ entonces $\Theta|\mathbf{p}\rangle = |-\mathbf{p}\rangle$, pero veremos lo que sucede en los valores de expectación. hay que tener en cuenta

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

pues Θ^\dagger no está definido.

Entonces, viendo valores de expectación, sería razonable esperar que

$$\langle \hat{a} | \mathbf{p} | \hat{a} \rangle = -\langle \alpha | \mathbf{p} | \alpha \rangle \quad \langle \hat{a} | \mathbf{x} | \hat{a} \rangle = \langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle$$

Veamos qué sucede para operadores hermíticos como $\hat{\mathcal{O}}$. Siendo

$$\langle \alpha | \mathcal{O} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \gamma \rangle$$

$$\langle \hat{a} | \hat{\gamma} \rangle^* = \langle \alpha | \gamma \rangle \Rightarrow \langle \hat{a} | \hat{\gamma} \rangle = \langle \gamma | \alpha \rangle$$

y como $\langle \hat{a} | \Theta | \gamma \rangle = \langle \hat{a} | \Theta \mathcal{O} | \alpha \rangle$. Luego metemos un $\Theta^{-1}\Theta = 1$

$$\langle \hat{a} | \Theta \mathcal{O} \Theta^{-1} \Theta | \alpha \rangle = \langle \hat{a} | \Theta \mathcal{O} \Theta^{-1} | \hat{a} \rangle = \langle \alpha | \mathcal{O} | \alpha \rangle$$

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

Chequear que esto esté claro, porque en la carpeta tengo otra versión de esta cuenta.

Entonces requeriremos

$$\Theta \hat{p} \Theta^{-1} = -\hat{p} \quad \Theta \hat{j} \Theta^{-1} = -\hat{j}$$

$$\hat{\Theta} \hat{p} = -\hat{p} \hat{\Theta} \Rightarrow \{\hat{\Theta}, \hat{p}\} = 0$$

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

$$\Theta \hat{x} \Theta^{-1} = \hat{x}$$

$$\hat{\Theta} \hat{x} = -\hat{x} \hat{\Theta} \Rightarrow [\hat{\Theta}, \hat{x}] = 0$$

y \mathbf{x} operador par.

Los operadores pares conmutan con Θ ,

$$\Theta |x'\rangle = |x'\rangle \quad \Theta |p'\rangle = |-p'\rangle,$$

y entonces tendrán base en común.

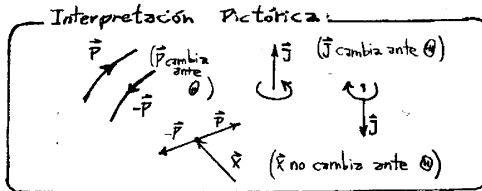


Figura 1.3

Cualquier hamiltoniano razonable

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

es par y conmutará con Θ . Consideramos que $V(\mathbf{x})$ se puede poner en serie de potencias respecto de \mathbf{x} y asimismo $[H, \Theta] = 0$. Veamos ahora la continuidad para $|\alpha\rangle = \int d^3x' |x'\rangle \langle x' | \alpha\rangle$ que se convierte en

$$\Theta |\alpha\rangle = \int d^3x' \langle x' | \alpha\rangle^* \Theta |x'\rangle = \int d^3x' |x'\rangle \langle x' | \alpha\rangle^*$$

donde el braket último dentro de la integral es $\psi_\alpha^*(x')$.

Pero físicamente, ¿qué significa que H, Θ conmuten? Veamos el hamiltoniano ante reversión de movimiento, considerando para ello la reversión de un sistema en estado $|\alpha\rangle$, si su evolución un δt está dada por

$$|\alpha, t = \delta t\rangle = \left(\mathbb{1} - i \frac{\delta t}{\hbar} H \right) |\alpha\rangle$$

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

$$\underbrace{U}_{+\delta t} \Theta |\alpha\rangle = \underbrace{\Theta U}_{-\delta t} |\alpha\rangle,$$

es decir que estamos pidiendo que se obtenga el mismo estado.

- Si revertimos el movimiento y evolucionamos δt .
- Si evolucionamos hacia atrás $-\delta t$ y revertimos el movimiento.

Veamos que vale lo anterior, pensando que si vale se tiene

$$\begin{aligned} \left(1 - i \frac{\delta t}{\hbar} H \right) \Theta |\alpha\rangle &= \Theta \left(1 + i \frac{\delta t}{\hbar} H \right) |\alpha\rangle \\ -i \frac{\delta t}{\hbar} H \Theta |\alpha\rangle &= \Theta i \frac{\delta t}{\hbar} H |\alpha\rangle \\ -i H \Theta |\alpha\rangle &= \Theta (i H |\alpha\rangle) \\ [H, \Theta] &= 0 \end{aligned}$$

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

$$\Theta^{-1} \frac{p^2}{2m} \Theta = -\frac{p^2}{2m} < 0$$

partícula libre con energía negativa. Justificaría así energías negativas hasta el infinito y pierde significado el concepto de “piso” del estado fundamental. Por ello H debe ser par frente a Θ .

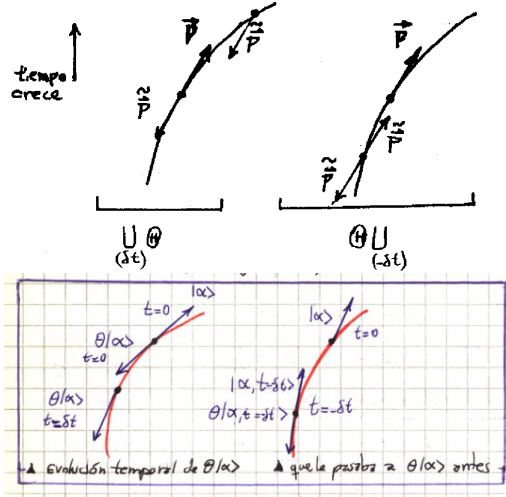


Figura 1.4

7.1.2 Función de onda

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

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

$$\Theta |\alpha\rangle = \int dx' \langle x' | \alpha \rangle^* \Theta |x'\rangle = \int dx' \langle x' | \alpha \rangle^* |x'\rangle$$

$$\Psi_\alpha(x') \longrightarrow \Theta \longrightarrow \Psi_\alpha^*(x')$$

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

7.1.3 Reversión de movimiento sobre J

Veamos qué hace Θ sobre autoestados de momento angular. No se puede decir que $\Theta |J\rangle = |-J\rangle$ puesto que carece de sentido al no conmutar J_x, J_y, J_z entre ellos. El J no tiene expresión en términos de numeritos j_x, j_y, j_z . Analizaremos $|\ell, m\rangle$

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) \longrightarrow \Theta \longrightarrow Y_\ell^m(\theta, \phi)^* = Y_\ell^{-m}(\theta, \phi)(-1)^m$$

$$\Theta |\ell, m\rangle \equiv (-1)^m |\ell, -m\rangle$$

Esto es lo que antes metí como “la continuidad”. Claramente hay que consolidar las dos cosas.

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

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

con j par.

7.1.4 Reversión para sistemas de spin 1/2

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

$$\hat{S} \cdot \hat{n} |\hat{n}; +\rangle = \frac{\hbar}{2} |\hat{n}; +\rangle$$

entonces

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} |+\rangle &\equiv |\hat{n}; +\rangle \\ \Theta |\hat{n}; +\rangle &= e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} \eta |-\rangle \\ \Theta |\hat{n}; +\rangle &= \eta |\hat{n}; -\rangle \end{aligned}$$

pero

$$|\hat{n}; -\rangle = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} |+\rangle$$

dado que

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_y} |+\rangle &= |-\rangle \\ \Theta |\hat{n}; +\rangle &= \eta e^{-i\frac{\alpha}{\hbar}S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar}S_y} e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_y} |+\rangle \\ \Theta &= \eta e^{-i\frac{\pi}{\hbar}S_y} \text{ (Para sistemas de spin } 1/2) \end{aligned}$$

donde

$$\Theta |+\rangle = \eta_+ |-\rangle \quad \Theta |-\rangle = \eta_- (-|+\rangle)$$

y como

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

$$\begin{aligned} \Theta^2(c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle) &= \Theta(c_+^* \eta_+ |-\rangle + c_-^* \eta_- |+\rangle) = \\ &= -c_+ \eta_+^* \eta |+\rangle - c_- \eta_-^* \eta |-\rangle = -(c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle) \end{aligned}$$

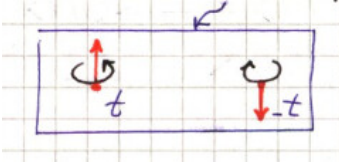
luego

$$\Theta |j, m\rangle = i^{2m} |j, -m\rangle = (-1)^m |j, -m\rangle$$

para todo j entero o semientero.

El dibujito apareció en la práctica asociado a este tema: la idea es que cambia la proyección de \hat{z} en $-\hat{z}$ al invertir el tiempo.

Esto vale para los casos de spin entero, donde se trabaja con Y_ℓ^m .

**EJEMPLO 1.2 Para casos de spin 1/2**

Esto es muy parecido a lo anterior, pero copio acá porque difieren en cosas. Consolidar más adelante. Se tienen

$$\Theta J = -J\Theta, \quad \Theta |\pm\rangle = \eta_{\pm} K |\mp\rangle$$

donde η es la fase y recordemos que K no hace nada. Un estado genérico $|\alpha\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle$ cumple

$$\begin{cases} |-\rangle = e^{-i\pi S_y/\hbar} K |+\rangle \\ e^{-i\pi S_y/\hbar} |-\rangle = -|+\rangle \end{cases} \text{ Vuelta en } 2\pi \text{ que altera el signo}$$

Combinando este sistemita llegamos a una expresión para Θ

$$\Theta = \eta e^{-i\pi S_y/\hbar} K,$$

donde esto vale solo para casos de spin 1/2. Entonces

$$\Theta |\alpha\rangle = c_+^* \eta |+\rangle + c_-^* \eta |-\rangle$$

y

$$\Theta^2 |\alpha\rangle = -c_+ |+\rangle - c_- |-\rangle$$

o bien $\Theta^2 = -\mathbb{1}$. Se puede escribir entonces

$$\Theta |j, m\rangle = i^{2m} |j, -m\rangle.$$

EJEMPLO 1.3 Ejercicio 7

H no degenerado, invariante frente a inversión temporal

Parte a) Se tiene $\Theta H |n\rangle = E_n |n\rangle$ y entonces

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

por conmutatividad. Luego $\Theta |n\rangle$ es autoestado del H , de lo cual, dado que no hay degeneración

$$\Theta e^{i\alpha} |n\rangle = \Theta |n\rangle$$

donde α es una fase arbitraria. Del primer punto y del segundo se obtiene la igualdad

$$\langle \mathbf{x} | n \rangle = e^{-i\alpha} \langle n | \mathbf{x} \rangle$$

y con $\alpha = 0$ obtenemos $\langle \mathbf{x} | n \rangle = \langle n | \mathbf{x} \rangle$. Entonces, siempre puedo elegir la función de onda para que sea real, lo cual se logra con $\alpha = 0$.

Parte b) Tengo $A e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$ y esto no puedo hacerlo real, y no viola lo que aseveráramos en la parte a) porque es perteneciente a un hamiltoniano degenerado. No viola invariancia de inversión temporal. El \hbar considerado es, por ejemplo, el de una partícula libre.

EJEMPLO 1.4 Ejercicio 9

La idea es considerar $\Theta \mathcal{D}_{(R)} |j, m\rangle$. La rotación se puede escribir como serie

$$= e^{i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi/\hbar} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar} \right)^k$$

Consideraremos $\Theta \mathcal{D}_{(R)} \Theta^{-1} \Theta$ en lugar de $\Theta \mathcal{D}_{(R)}$. Veamos unos pocos términos

$$\begin{aligned} k=0 & \quad \Theta \mathbb{1} \Theta^{-1} \\ k=1 & \quad \Theta \left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar} \right) \Theta^{-1} = -i \left(\frac{\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar} \right) \\ k=2 & \quad \Theta \left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar} \right) \Theta^{-1} \Theta \left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar} \right) \Theta^{-1} = \left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar} \right)^2 \end{aligned}$$

y vemos que no se altera nada, entonces

$$\Theta \mathcal{D}_{(R)} \Theta^{-1} = \mathcal{D}_{(R)}$$

de manera que $[\Theta, \mathcal{D}_{(R)}] = 0$, es decir que conmutan. Entonces,

$$\Theta \mathcal{D}_{(R)} |j, m\rangle = \mathcal{D}_{(R)} \Theta |j, m\rangle = \mathcal{D}_{(R)} i^{2m} |j, -m\rangle$$

y

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)*}(R) = (-1)^{m-m'} \mathcal{D}_{-m', -m}^j(R),$$

donde

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

La idea es forzar la aparición de Θ en la anterior ecuación y tratar de probar lo previo.

Multiplicando y dividiendo por $i^{2m'}$, y luego insertando un uno apropiado, se tiene

$$\begin{aligned} \langle j, m | e^{i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi/\hbar} i^{2m'} \Theta | j, -m' \rangle &= \langle j, m | \Theta e^{i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi/\hbar} (-i)^{2m'} | j, m' \rangle = \\ &= \sum_{m''} \langle j, m | \Theta | j, m'' \rangle \langle j, m'' | e^{i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi/\hbar} (-i)^{2m'} | j, m' \rangle = \\ &= \left\langle j, m \left| \sum_{m''} (-i)^{2m''} \right| j, m'' \right\rangle \langle j, m'' | e^{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi/\hbar} (-i)^{2m'} | j, m' \rangle = \\ &= i^{-2m} (-i)^{2m'} \langle j, -m | e^{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi/\hbar} | j, m' \rangle = (-1)^{m-m'} \mathcal{D}_{-m', -m}^j(R). \end{aligned}$$

y esto era lo que se intentaba probar.

EJEMPLO 1.5 Ejercicio 10

Parte a) Por ser no degenerado el problema se tiene $\Theta |n\rangle = e^{i\alpha} |n\rangle$. Luego

$$\langle vbL \rangle = \langle n | \mathbf{L} | n \rangle = -\langle n' | \mathbf{L} | n' \rangle = -\langle n' | e^{-i\alpha} \mathbf{L} e^{i\alpha} | n' \rangle$$

donde $|n'\rangle$ es el inverso temporal de $|n\rangle$. De ello deducimos que $\langle vbL \rangle = -\langle vbL \rangle$ que lleva a $\langle vbL \rangle = 0$.

Parte b) Tenemos $\sum_{\ell} \sum_m F_{\ell m}^*(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$. Usando inversión temporal hay que ver las restricciones que resultan sobre $F_{\ell m}$. Para ello consideramos

$$\langle \mathbf{x} | n' \rangle = \sum_{\ell} \sum_m F_{\ell m}^*(r) Y_{\ell}^{m*}(\theta, \varphi) = e^{i\alpha} \sum_{\ell} \sum_m F_{\ell m}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

de modo que

$$\sum_{\ell} \sum_m F_{\ell m}^*(r) (-1)^m Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = e^{i\alpha} \sum_{\ell} \sum_m F_{\ell m}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

pero como los $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ son ortogonales se ve que $F_{\ell, -m}^*(r) (-1)^m = e^{i\alpha} F_{\ell n}(r)$ donde α es independiente de ℓ, m . Luego, con $\alpha = 0, 2\pi$ se tiene

$$F_{\ell, -m}^*(r) (-1)^m = F_{\ell, m}(r).$$

7.1.5 Teorema

Sea H invariante ante Θ y los $|n\rangle$ no degenerados, entonces la autofunción de energía puede hacerse real tomando una fase apropiada. Recordemos que $[H, \Theta] = 0$.

Demostración

$$H\Theta|n\rangle = \Theta H|n\rangle = E_n\Theta|n\rangle \longrightarrow \Theta|n\rangle = \delta|n\rangle$$

donde la fase δ puede hacerse uno (luego se hará)

$$\Psi_n = \langle \mathbf{x} | n \rangle \longrightarrow \Psi_{\tilde{n}} = \langle \mathbf{x} | \tilde{n} \rangle = \langle n | \mathbf{x} \rangle = \Psi_n(\mathbf{x})^*$$

y esto por ser antinunitario Θ

$$\Psi_{\tilde{n}} = \langle \mathbf{x} | \Theta | n \rangle = \delta \langle \mathbf{x} | n \rangle = \delta \Psi_n(\mathbf{x})$$

sea $\delta = 1$ entonces

$$\Psi_n^* = \Psi_n \longrightarrow \Psi_n(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$$

Esto vale cuando no hay degeneración; cuando la halla deja de valer y pueden aparecer componentes imaginarias en la función de onda.

Si le aplico al sistema transformaciones dadas por operadores que conmutan con el H no lo sacamos del autoestado en que se encuentra con el paso del tiempo. En ese sistema solo será razonable medir variables representadas por esos operadores; puesto que de lo contrario estamos alterando el sistema y nos es imposible saber donde ha quedado.

EJEMPLO 1.6 Fermiones

Consideremos un sistema de m fermiones cuyo estado se describe con $[H, \Theta] = 0$. Entonces $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ y $H(\Theta|n\rangle) = E_n(\Theta|n\rangle)$ donde suponemos que $\Theta|n\rangle$ y $|n\rangle$ representan el mismo estado físico y son iguales salvo una fase. Es decir,

$$\Theta|n\rangle = e^{i\delta}|n\rangle$$

luego

$$\Theta^2|n\rangle = e^{-i\delta}\Theta|n\rangle = |n\rangle.$$

Si j es impar, número impar de fermiones, los estados $\Theta|n\rangle$ y $|n\rangle$ son estados distintos, aunque con la misma energía. Hay degeneración. Puedo romper esa degeneración aplicando un campo magnético \mathbf{B} . Allí surgirá que se puede ver, visualmente, observada la diferencia entre ir hacia t e ir hacia $-t$.

¿Qué se habrá querido decir con esto?

Capítulo 8

Métodos perturbativos

Se basan en un hamiltoniano

$$H = H_0 + \lambda V \quad \lambda \ll 1,$$

donde λ es un parámetro para controlar la perturbación y donde

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

es el problema sin perturbar.

$$H |n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |n(\lambda)\rangle \quad (1)$$

que sería la solución exacta. Como estamos pensando que $H, E_n(\lambda)$ tienen expresión complicada podemos desarrollar en serie perturbativa cada autoestado n según

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots$$

$$|n(\lambda)\rangle = |0_n\rangle + \lambda |1_n\rangle + \lambda^2 |2_n\rangle + \dots$$

siendo $(0), (1), (2)$ los órdenes del desarrollo perturbativo. Luego, usando estas expresiones en el problema original (1), se obtiene

$$(H_0 + \lambda V) \left[\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |i_n\rangle \right] = \left(\sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)} \right) \left(\sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |i_n\rangle \right)$$

o bien

$$\sum_{i=0}^{\infty} H_0 \lambda^i |i_n\rangle + \lambda V \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |i_n\rangle = \sum_{i,j} \lambda^j E_n^j \lambda^i |i_n\rangle.$$

En la carpeta la notación es un poco diferente. Se dice que el espectro es discreto y que no hay degeneración. Se cumple la normalización usual y la delta de kronecker.

Aproximando los primeros términos

$$\begin{aligned}
 H_0 |0_n\rangle + H_0 \lambda |1_n\rangle + H_0 \lambda^2 |2_n\rangle + V \lambda |0_n\rangle + V \lambda^2 |1_n\rangle + \dots = \\
 E_n^0 |0_n\rangle + E_n^0 \lambda |1_n\rangle + E_n^0 \lambda^2 |2_n\rangle + E_n^1 \lambda |0_n\rangle + \\
 E_n^1 \lambda^2 |1_n\rangle + E_n^1 \lambda^3 |2_n\rangle + E_n^2 \lambda^2 |0_n\rangle + \dots
 \end{aligned}$$

e igualando orden a orden resultan

$$\begin{array}{ll}
 \lambda^0 & H_0 |0_n\rangle = E_n^0 |0_n\rangle \\
 \lambda^1 & H_0 |1_n\rangle + V |0_n\rangle = E_n^0 |1_n\rangle + E_n^1 |0_n\rangle \\
 \lambda^2 & H_0 |2_n\rangle + V |1_n\rangle = E_n^0 |2_n\rangle + E_n^2 |0_n\rangle + E_n^1 |1_n\rangle \\
 \dots & \dots
 \end{array}$$

En la carpeta se escriben los órdenes más piolas y eso deja ver la forma del término i-ésimo.

Pediremos una normalización a cada orden $\langle n(\lambda) | n(\lambda) \rangle = 1$ y considerando $\langle 0_n | n(\lambda) \rangle \in \mathbb{R}$. Este no es el único modo de hacerlo, en efecto John Jun lo hace de otra manera.

$$\begin{array}{c}
 (\langle 0_n | + \lambda \langle 1_n | + \lambda^2 \langle 2_n |) (|0_n\rangle + \lambda |1_n\rangle + \lambda^2 |2_n\rangle) = \\
 \langle 0_n | 0_n \rangle + \lambda \langle 1_n | 0_n \rangle + \lambda^2 \langle 2_n | 0_n \rangle \\
 \lambda \langle 0_n | 1_n \rangle + \lambda^2 \langle 1_n | 1_n \rangle + \lambda^3 \langle 2_n | 1_n \rangle \\
 \lambda^2 \langle 0_n | 2_n \rangle + \lambda^3 \langle 1_n | 2_n \rangle + \lambda^4 \langle 2_n | 2_n \rangle \\
 \hline
 \lambda^0 \qquad \qquad \lambda^1 \qquad \qquad \lambda^2 \qquad \qquad \lambda^3 \qquad \qquad \lambda^4
 \end{array}$$

de lo cual se extraen; para el orden cero

$$\langle 0_n | 0_n \rangle = 1,$$

para el orden uno

$$\langle 0_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 0_n \rangle + \langle 0_n | 1_n \rangle = 1 \longrightarrow \langle 1_n | 0_n \rangle = -\langle 0_n | 1_n \rangle$$

y para el orden dos

$$\langle 0_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 0_n \rangle + \langle 0_n | 1_n \rangle + \langle 2_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 1_n \rangle + \langle 0_n | 2_n \rangle = 1$$

o bien

$$\langle 0_n | 2_n \rangle = \langle 2_n | 0_n \rangle = -\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle.$$

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

Resolvamos ahora nuevamente todos los órdenes. A orden cero será

$$(H_0 - E_n^0) |0_n\rangle = 0 \quad \text{y se define} \quad |0_n\rangle \equiv |\varphi_n\rangle$$

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

$$\langle \varphi_n | H_0 - E_n^0 | 1_n \rangle + \langle \varphi_n | V - E_n^1 | 0_n \rangle = 0$$

$$E_n^1 = \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle$$

y la energía hasta orden uno es

$$E_n = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle.$$

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

$$|1_n\rangle = \sum_p (\langle \varphi_p | 1_n \rangle) |\varphi_p\rangle,$$

donde φ_p son los autoestados del hamiltoniano sin perturbar, y sea $p \neq n$

$$\langle \varphi_p | H_0 - E_n^0 | 1_n \rangle + \langle \varphi_p | V - E_n^1 | 0_n \rangle = 0$$

$$(E_p^0 - E_n^0) \langle \varphi_n | 1_n \rangle + \langle \varphi_p | V | 0_n \rangle = E_n^1 \langle \varphi_p | 0_n \rangle = 0$$

lo que significa que a un mismo orden (cero) diferentes autoestados son ortogonales. Entonces

$$\langle \varphi_p | 1_n \rangle = \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0},$$

donde claramente el denominador no debiera ser muy pequeño porque de lo contrario la perturbación sería brutísima. Sea $p = n$ entonces

$$\langle \varphi_n | 1_n \rangle = \langle 0_n | 1_n \rangle = 0$$

ya lo vimos antes, en la normalización

$$|n(\lambda)\rangle = |0_n\rangle + \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p\rangle$$

autoestado hasta orden uno.

Veamos ahora qué sucede a orden dos. Se tiene

$$(H_0 - E_n^0) |2_n\rangle + (V - E_n^1) |1_n\rangle - E_n^2 |0_n\rangle = 0$$

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi_n | H_0 - E_n^0 | 2_n \rangle + \langle \varphi_n | V - E_n^1 | 1_n \rangle - \langle \varphi_n | E_n^2 | 0_n \rangle &= 0 \\
 \langle \varphi_n | V | 1_n \rangle &= E_n^2 \underbrace{\langle \varphi_n | 0_n \rangle}_{=1} + E_n^1 \underbrace{\langle \varphi_n | 1_n \rangle}_{=0} \\
 E_n^2 &= \langle \varphi_n | V | 1_n \rangle \\
 E_n^2 &= \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_n | V | \varphi_p \rangle \\
 E_n^2 &= \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0}
 \end{aligned}$$

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

$$|2_n\rangle = \sum_p (\langle \varphi_p | 2_n \rangle) |\phi_p\rangle$$

sea $p \neq n$

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi_p | H_0 - E_n^0 | 2_n \rangle + \langle \varphi_p | V - E_n^1 | 1_n \rangle &= \langle \varphi_p | E_n^2 | 0_n \rangle \\
 (H_0 - E_n^0) \langle \varphi_p | 2_n \rangle + \langle \varphi_p | V | 1_n \rangle - E_n^1 \langle \varphi_p | 1_n \rangle &= E_n^2 \underbrace{\langle \varphi_p | 0_n \rangle}_{=0} \\
 \langle \varphi_p | 2_n \rangle &= \frac{E_n^1 \langle \varphi_p | 1_n \rangle}{E_p^0 - E_n^0} - \frac{\langle \varphi_p | V | 1_n \rangle}{E_p^0 - E_n^0} \\
 \sum_k \frac{\langle \varphi_n | V | 1_n \rangle}{E_p^0 - E_n^0} \langle \varphi_p | \varphi_q \rangle \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} + \frac{1}{E_n^0 - E_p^0} \left\langle \varphi_p \left| V \sum_k \frac{\langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \right| \varphi_k \right\rangle \\
 \langle \varphi_p | 2_n \rangle &= \frac{\langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle \langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{(E_p^0 - E_n^0)(E_n^0 - E_p^0)} + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle}{(E_n^0 - E_p^0)(E_n^0 - E_k^0)}
 \end{aligned}$$

Sea $p = n$

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\langle 0_n | 0_n \rangle}_{=1} + \underbrace{\langle 1_n | 0_n \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle 0_n | 1_n \rangle}_{=0} + \langle 2_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 1_n \rangle + \langle 0_n | 2_n \rangle &= 1 \\
 \langle 2_n | 0_n \rangle + \langle 0_n | 2_n \rangle &= -\langle 1_n | 1_n \rangle \\
 \langle 0_n | 2_n \rangle &= -\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle \\
 -\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle &= \sum_k -\frac{1}{2} \langle 1_n | 0_k \rangle \langle 0_k | 1_n \rangle
 \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_k^0)^2} = \langle 0_n | 2_n \rangle$$

$$|2_n\rangle = \sum_{p \neq n} -\frac{V_{nn} V_{pn}}{(E_p^0 - E_n^0)^2} |\varphi_p\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_{k \neq n} \frac{V_{pk} V_{kn}}{(E_n^0 - E_p^0)(E_n^0 - E_k^0)} |\varphi_p\rangle - \frac{1}{2} \sum_p \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^0 - E_k^0)^2} |\varphi_p\rangle$$

y el autoestado hasta orden dos

$$|n(\lambda)\rangle = |0_n\rangle + \sum_{p \neq n} \frac{V_{pn}}{\Delta E_{np}^0} |2_n\rangle + |2_n\rangle$$

con la energía hasta orden dos

$$E_n = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_p^0)^2}$$

EJEMPLO 0.1 Oscilador armónico perturbado

Consideremos el hamiltoniano de un oscilador armónico perturbado

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad V_{\text{pert}} = \frac{1}{2} \epsilon m \omega^2 x^2 \quad \epsilon \ll 1$$

$$H = H_0 + V_{\text{pert}} = \frac{p^2}{2m} + (1 + \epsilon) \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Conozco la solución del H_0 , que es

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

y si $\omega \rightarrow \omega' = \omega\sqrt{1+\epsilon}$ será

$$E_n^0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \sqrt{1+\epsilon} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \left[1 + \frac{\epsilon}{2} - \frac{\epsilon^2}{8} + \dots\right]$$

Definiendo $|\varphi_n\rangle \equiv |n\rangle$ puedo escribir fácilmente el potencial V en términos de los operadores a, a^\dagger de manera que

$$V = \frac{1}{4} \epsilon \hbar \omega (a^\dagger + a)^2 = \frac{1}{4} \epsilon \hbar \omega (a^{\dagger 2} + a^2 + 2a^\dagger a + 1),$$

y usando la expresión de dichos operadores y sus condiciones de normalización (ver el lugar apropiado) solo pueden estar relacionados estados que difieran en dos cuantos (los $a^{\dagger 2}, a^2$) luego los que no serán nulos son

$$\begin{aligned} \langle n+2 | a^{\dagger 2} | n \rangle &= \sqrt{(n+1)(n+2)} & \langle n-2 | a^2 | n \rangle &= \sqrt{n(n-1)} \\ \langle n | a^\dagger a | n \rangle &= n & \langle n | n \rangle &= 1 \end{aligned}$$

Reemplazando estos resultados

$$\langle n+2 | V | n \rangle = \frac{1}{4} \epsilon \sqrt{(n+1)(n+2)} \hbar \omega \quad \langle n-2 | V | n \rangle = \frac{1}{4} \epsilon \sqrt{n(n-1)} \hbar \omega$$

$$\langle n | V | n \rangle = \frac{1}{2} \epsilon \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Ahora vigilemos orden por orden las contribuciones

$$\epsilon^0 \quad \epsilon_n^0 = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

$$\epsilon^1 \quad \epsilon_n^1 = \langle n | V | n \rangle = \frac{1}{2} \epsilon \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

$$\epsilon^2 \quad \epsilon_n^2 = \sum_{p \neq n} \frac{|\langle p | V | n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_p^0)}$$

Pero sólo hay dos términos: $p = n+2, n-2$

$$\epsilon_n^2 = \frac{|\langle n+2 | V | n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_{n+2}^0)} + \frac{|\langle n-2 | V | n \rangle|^2}{(E_n^0 - E_{n-2}^0)}$$

Finalmente, reemplazando por lo que ya sabemos se obtiene

$$\epsilon_n^2 = -\frac{1}{8} \epsilon^2 \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

8.0.1 Caso degenerado

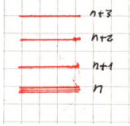
Sea que hay degeneración de orden g en el autoestado N (a orden cero). Para tratarla ampliaremos la notación

$$H_0 |\varphi_n^k\rangle = E_N^0 |\varphi_n^k\rangle \quad k = 1, 2, \dots, g$$

Creo que debiera ser N en el lhs.

Podremos esperar que la perturbación *rompa* la degeneración cambiando las energías. Para esto necesitaré diagonalizar el potencial V .

Pictóricamente:



Suponemos existe combinación lineal

$$|0_N^j\rangle = \sum_k a_k^j |\varphi_N^k\rangle$$

para escribir un estado degenerado en función de los otros.

$$(H_0 - E_N^0) |1_N^j\rangle + (V - E_N^{1j}) |0_N^j\rangle = 0$$

$$\underbrace{\langle 0_N^j | H_0 - E_N^0 | 1_N^j \rangle}_{=0} + \langle 0_N^j | V - E_N^{1j} | 0_N^j \rangle = 0$$

$$\begin{aligned}
 \sum_k \langle 0_N^j | (V - E_N^{1j}) a_k^j | \varphi_N^j \rangle &= 0 \\
 \sum_k a_k^j \langle 0_N^j | V - E_N^{1j} | 0_N^j \rangle &= 0 \\
 \sum_k a_k^j \langle 0_N^j | V | 0_N^j \rangle &= \sum_k a_k^j \langle 0_N^j | E_N^{1j} | 0_N^j \rangle \\
 \sum_k a_k^j \langle 0_N^j | V | 0_N^j \rangle &= \sum_k a_k^j E_N^{1j} \delta_{ik} = a_k^j E_N^{1j}
 \end{aligned}$$

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

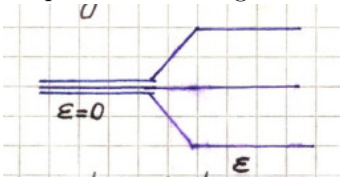
$$(\mathbb{V} - E_N^{1j} \mathbb{1}) \mathbf{a} = 0 \quad \det(\mathbb{V} - E_N^{1j} \mathbb{1}) = 0$$

que permite diagonalizar la matriz de V en la base $|\varphi_n^k\rangle$. Sus autovalores serán las correcciones $a_k^j E_N^{1j}$ de primer orden a la energía.

$$\langle 0_n^i | V | 0_n^j \rangle = E_N^{1j} \delta_{ij}$$

Los autoestados $|1_n^j\rangle$ serán los autovectores del problema.

Hemos roto la degeneración de los estados que estaban degenerados. Una vez diagonalizado el V estamos en un problema no degenerado; podemos pasar a orden segundo.



EJEMPLO 0.2 Ejercicio 1

Consideraremos un oscilador armónico con un hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + bx$$

donde el potencial extra es el término $V = bx$ y donde usaremos la siguiente notación

$$|0^{(0)}\rangle = |0\rangle \quad E_0^{(0)} = \frac{\hbar\omega}{2} \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Parte a) Tenemos la energía escrita como

$$E_0 = E_0^{(0)} + V_{00} + \sum_{k \neq 0} \frac{|V_{0k}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots$$

Entonces, el primer orden

$$V_{00} = \langle 0 | bx | 0 \rangle = 0,$$

puede verse por paridad, por ejemplo. El segundo orden

$$V_{0k} = b \langle 0 | x | k^{(0)} \rangle = b \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{k+1} \delta_{0,k+1} + \sqrt{k} \delta_{0,k-1})$$

y la energía a orden dos

$$E_0^2 = -\frac{b^2}{2m\omega^2},$$

de manera que la energía del fundamental hasta orden dos será

$$E_0 \approx \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{b^2}{2m\omega^2}.$$

Parte b) En el hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left(x^2 + \frac{2bx}{m\omega^2} \right)$$

entonces completando cuadrados

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left(x + \frac{b}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{b^2}{2m\omega^2},$$

se pueden reescribir el hamiltoniano y las energías como

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{b^2}{2m\omega^2}$$

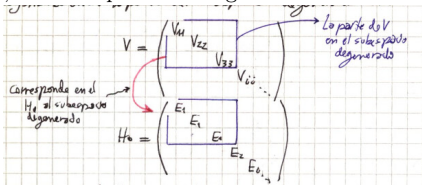
de modo que es

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{b^2}{2m\omega^2}.$$

Para el caso degenerado tenemos

$$\sum_{k \neq 0} \frac{|V_{0k}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

donde el denominador tiende a cero, y para solventarlo haremos que el numerador sea cero, lo cual equivale a diagonalizar la matriz.



Entonces

$$V |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

con energías $E_1 = E^{(0)} + E_+^{(1)}$ y $E_2 = E^{(0)} + E_-^{(1)}$.

EJEMPLO 0.3 Ejercicio 3

Consideramos ahora un hamiltoniano separable

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2)$$

Parte a) La energía se expresa como

$$E_{n_x n_y} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$$

y entonces los estados de menor energía serán $n_x = n_y = 0$, $n_x = 1, n_y = 0$ y $n_x = 0, n_y = 1$ que conducen a energías $E_{00} = \hbar\omega$ y $E_{01} = E_{10} = 2\hbar\omega$ de donde vemos que hay degeneración de orden dos.

Parte b) Tenemos una perturbación de la forma $V = \delta m\omega^2 xy$ donde $\delta \ll 1$. A orden cero $E_{00} \rightarrow |00\rangle = |00^{(0)}\rangle$ mientras que a orden uno

$$E^{(1)} = V_{00} = \langle 00^{(0)} | \delta m\omega^2 xy | 00^{(0)} \rangle = \delta m\omega^2 \langle x | x \rangle_x \langle y | y \rangle_y = 0$$

y se ve que son nulos porque no existen elementos diagonales. Luego, $E_{00} = \hbar\omega$ a orden uno.

Los niveles E_{01} y E_{10} son degenerados; entonces diagonalizaremos V en este subespacio para hallar la corrección a orden cero en los estados y a orden uno en las energías.

$$\langle 10 | V | 10 \rangle = \langle 01 | V | 01 \rangle = 0$$

$$\langle 10 | V | 01 \rangle = \frac{\hbar\omega\delta}{2} = \langle 01 | V | 10 \rangle$$

Entonces es una matriz simétrica (orden 01 10)

$$V = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar\delta\omega}{2} \\ \frac{\hbar\delta\omega}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

y vemos que es proporcional a σ_x [really?]. Diagonalizando resultará en $E_{pm} = \pm \frac{\hbar\omega\delta}{2}$ con

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, 1\rangle + |1, 0\rangle)$$

y podemos construimos la tablita

$$E_{00} = E_{00}^{(0)} = \hbar\omega$$

$$E_{01} = E_{01}^{(0)} + \frac{\hbar\delta\omega}{2} = \hbar\omega \left(2 + \frac{\delta}{2} \right)$$

$$E_{10} = E_{10}^{(0)} - \frac{\hbar\delta\omega}{2} = \hbar\omega \left(2 - \frac{\delta}{2} \right)$$

Entonces, se tienen E_{00} corresponde a un estado a orden cero dado por $|00\rangle$, mientras que E_{10}^+ se corresponde a un estado a orden cero de $1/\sqrt{2}(|0, 1\rangle + |1, 0\rangle)$ mientras que E_{01}^- se corresponde a un estado a orden cero de $1/\sqrt{2}(|0, 1\rangle - |1, 0\rangle)$ porque ahora los estados están como combinación lineal de \pm .

Parte c) Consideramos ahora un hamiltoniano no separable

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2) + \delta m\omega^2 xy.$$

Se puede resolver exactamente con un cambio de variables

$$X = \frac{x+y}{\sqrt{2}} \quad Y = \frac{x-y}{\sqrt{2}}$$

$$P_x = \frac{p_x + p_y}{\sqrt{2}} \quad P_y = \frac{p_x - p_y}{\sqrt{2}}$$

Amasando se llega a

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(1+\delta)X^2 - \frac{m\omega^2}{2}(1-\delta)Y^2$$

con

$$E_{00} = \hbar\omega_x \left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y \left(n_y + \frac{1}{2}\right)$$

de donde a orden cero es $E_{00} = \hbar\omega$ y luego [a orden 1 o para $n > 0$]

$$\frac{\hbar}{2} [\omega(1+\delta)^{1/2} + \omega(1-\delta)^{1/2}] \approx \hbar\omega \left(1 - \frac{\delta^2}{4}\right).$$

A primer orden en δ , parda la solución exacta

$$\begin{aligned} E_{00} &\approx \hbar\omega \\ E_{10} &= \hbar\omega_x \frac{3}{2} + \hbar\omega_y \frac{1}{2} \\ E_{01} &= \hbar\omega_x \frac{1}{2} + \hbar\omega_y \frac{3}{2} \end{aligned}$$

vemos que se recuperarían las energías halladas por perturbaciones (podemos hacer las cuentas nosotros [quiénes?])

EJEMPLO 0.4 Ejercicio 6

Es bastante *hard*; hay que consultarlo. Al diagonalizar, la degeneración no se va.

8.1 Efecto Stark

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

$$0 \leq \ell < n \quad -\ell \leq m \leq \ell \quad \ell = 0, 1 \quad m = -1, 0, 1$$

Supongamos $n = 2$ con $E = -e^2/(8a_0)$, lo cual me lleva a cuatro estados

$$\begin{cases} |200\rangle \\ |211\rangle \\ |210\rangle \\ |21-1\rangle \end{cases}$$

todos con la misma energía ϵ_2 . Consideremos un campo eléctrico en \hat{z} y entonces $V = -ez|\mathbf{E}|$. Luego el potencial se representará por una matriz de 4×4 . Sus elementos serán

$$\langle n\ell'm' | V | n\ell m \rangle = -e|\mathbf{E}| \langle n\ell'm' | z | n\ell m \rangle$$

y para evaluarlos usaremos ideas de simetría.

EJEMPLO 1.1 refurbished

Uso un entorno de ejemplo porque la carpeta tiene otra notación y explica más.

$$n = 2 \rightarrow \begin{cases} \ell = 0 & 2s & m = 0 \text{ (1 estado)} \\ \ell = 1 & 2p & m = -1, 0, 1 \text{ (3 estados)} \end{cases}$$

Entonces, las ideas de simetría me llevan a que como son $2s, 2p$ pares

$$\langle 2s | V | 2s \rangle = \langle 2p | V | 2p \rangle = 0$$

y esto son diez elementos nulos. Pero la paridad no nos autoriza a anular $\langle 2s | V | 2p \rangle$. Como $V \propto z$ y $z \propto T_{q=0}^{k=1}$ sabiendo que

$$\langle \alpha', j', m' | T_q^k | \alpha, j, m \rangle \propto \langle j, k; m, q | j, k; j', m' \rangle$$

con $m + q = m'$, lo cual garantiza el teorema de Wigner-Eckart, surge que el único componente no nulo es

$$\langle 2, 0, 0 | V | 2, 1, 0 \rangle = 3ea_0|E| = \gamma|E|$$

siendo nulos

$$\langle 2, 0, 0 | V | 2, 1, \pm 1 \rangle = 0$$

La matriz en la base considerada será [sigue fuera].

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

$$\langle n\ell m | z | n\ell m \rangle = 0$$

$$\langle n\ell m' | z | n\ell m \rangle = 0$$

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

$$\Pi |2, \ell = 1, m\rangle = -|2, \ell = 1, m\rangle \quad \text{impares}$$

$$\Pi |2, \ell = 0, 0\rangle = -|2, \ell = 0, 0\rangle \quad \text{par}$$

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

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma|E| \\ 0 & 0 & \gamma|E| & 0 \end{pmatrix}$$

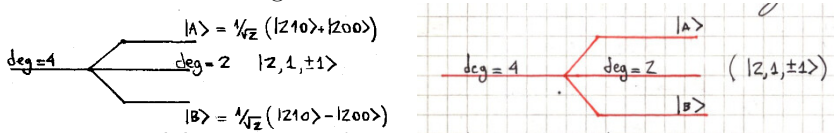
No se podrá romper la degeneración de los estados superiores, todos con cero, en el subbloque superior de 2×2 . No obstante, se puede diagonalizar considerando estas combinaciones

$$|A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, 1, 0\rangle + |2, 0, 0\rangle) \quad |B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, 1, 0\rangle - |2, 0, 0\rangle)$$

y obtener una matriz

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma|\mathbf{E}| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma|\mathbf{E}| \end{pmatrix}.$$

En este caso no se rompe la degeneración por completo. A orden uno aún tenemos dos estados degenerados



Se ha roto parcialmente la degeneración pero si quisiéramos pasar a orden 2 debiéramos seguir trabajando.

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

Partimos de la suposición de que a orden uno se ha roto toda la degeneración (en el efecto Stark, como se acaba de ver, no sucedía esto). Hemos trabajado hasta el primer orden y ahora veremos el segundo.

$$\lambda^2 (H_0 - E_N^0) |2_N^j\rangle + (V - E_N^{1j}) |1_N^j\rangle - E_N^{2j} |0_N^j\rangle = 0$$

Entonces, haciendo producto escalar, obtenemos la corrección a segundo orden de la energía

$$\langle 0_N^j | H_0 - E_N^0 | 2_N^j \rangle + \langle 0_N^j | V - E_N^{1j} | 1_N^j \rangle = E_N^{2j}$$

es decir

$$\langle 0_N^j | V | 1_N^j \rangle = E_N^{2j}$$

pues $\langle 0_N^j | 0_N^j \rangle = 0$. El asunto es que no conocemos la expresión de los $|1_N^j\rangle$. Se sabe que $H_0 |\varphi_n^j\rangle = E_n^0 |\varphi_n^j\rangle$ y luego

$$|1_N^j\rangle = \sum_{i \text{ posibles para cada } k} b_k^i |\varphi_k^i\rangle.$$

Entonces podemos escribir, por conveniencia,

$$|1_N^j\rangle = \sum_{k, i \neq 1} b_k^i |\varphi_k^i\rangle + \sum_i b_i^j |\varphi_N^i\rangle$$

y como se tiene $\langle 0_N^j | 1_N^j \rangle = 0$ esto nos lleva a

$$\sum_{k, i \neq 1} b_k^i \langle 0_N^j | 0_K^i \rangle + \sum_i b_N^i \langle 0_N^j | 0_N^i \rangle = 0,$$

de lo cual surge $b_N^j = 0$ para siga valiendo que el escalar es nulo. Hemos pedido la nulidad del braket anterior por condiciones de normalización. Para el braket

$$\langle 0_n^j | V | \left(\sum_{k, i \neq 1} b_k^i | \varphi_k^i \rangle + \sum_i b_N^i | \varphi_N^i \rangle \right)$$

y de aquí resulta que no me interesarán los b_n^i porque $\langle 0_n^j | V | 0_n^i \rangle$ con $i \neq j$ será

$$\langle 0_n^j | V | 0_n^i \rangle = V_i \delta_{ij} = 0$$

y de ello vemos que se anula el aporte. Solamente nos interesarán entonces los b_k^i . Trabajemos con lo que resta así

$$\langle \varphi_p^\ell | (H_0 - E_n^0) | 1_n^j \rangle = - \langle \varphi_p^\ell | V - \epsilon_{1n}^j | 0_n^j \rangle \quad p \neq n$$

y desde

$$\begin{aligned} \langle \varphi_p^\ell | (H_0 - E_n^0) | \left(\sum_{k \neq n} b_k^i | \varphi_k^i \rangle + \sum_{i \neq j} b_n^i | 0_n^i \rangle \right) \\ (E_n^0 - E_p^0) \sum_{k \neq n} b_k^i \langle \varphi_p^\ell | \varphi_k^i \rangle = - \langle \varphi_n^{(i)} | V | 0_n^{(j)} \rangle \end{aligned}$$

que conduce directamente a

$$b_p^{(i)} = \frac{\langle \varphi_n^{(i)} | V | 0_n^{(j)} \rangle}{E_n^0 - E_p^0}$$

Finalmente, a segundo orden el valor de la energía resulta

$$E_N^{2j} = \sum_{p \neq N} \frac{|\langle 0_N^j | V | 0_p^i \rangle|^2}{E_N^0 - E_p^0}$$

donde N es un estado degenerado y la suma es entre los i posibles.

8.2 Estructura fina del átomo de hidrógeno

La solución tradicional del átomo de hidrógeno usa el potencial coulombiano, lo cual es una sobresimplificación. Esto desemboca en las funciones $|n, \ell, m\rangle$, que tiene una degeneración muy grande. Sin embargo la introducción de ajustes en la forma de *perturbaciones* permite romper algo la degeneración. Algunas expresiones familiares eran

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad E_n = -\frac{\alpha^2 m_e^2 c^2}{2n^2} \quad a_0 = \hbar^2 / (m_e c^2)$$

$$v/c = p/(mc) = \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx 1/137$$

donde a_0 es el radio de Bohr, α es la constante de estructura fina.

Agrupemos o clasifiquemos las correcciones. Tenemos :

a) Corrección cinemática (relativista)

Las correcciones al átomo de hidrógeno son del orden de α^2 (finas) y son por ende muy pequeñas.

$$E = c\sqrt{p^2 + m_e^2 c^2} = m_e c^2 \sqrt{1 + p^2 / (m_e^2 c^2)} \approx m_e c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_e^2 c^2} + \frac{3}{8} \frac{p^4}{m_e^4 c^4} \right)$$

$$E \approx m_e c^2 + \frac{p^2}{2m_e} + \frac{3p^4}{8m_e^3 c^2}$$

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

b) Acoplamiento spín-órbita Se puede pensar considerando un e^- en reposo con un protón orbitando que genera un \mathbf{B}_{eff}

$$\mathbf{B}_{\text{eff}} = -\frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad \boldsymbol{\mu}_s = \frac{e\mathbf{S}}{2m_e c}$$

y dado que el campo eléctrico será

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{e} \nabla(V(r)) = \frac{1}{r^3} \mathbf{r}$$

se tiene para el acoplamiento $-\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}}$

$$W_{so} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{R^3} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}}$$

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

c) Término de Darwin o de contacto

$$W_D = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla^2 V(r)$$

que afectará a estados s que tienen función de onda en el origen. Este término intenta considerar la extensión de la distribución de carga del electrón como distribución espacial que no es un punto. Entonces el potencial se verá como

$$\int_{p \sim \lambda_e} d^3 \rho f(\rho) V(\mathbf{x} + \mathbf{p})$$

$$V(\mathbf{x} + \mathbf{p}) = V(r) + \#_1 \nabla V \cdot \mathbf{p} + \#_2 \nabla^2 V(r) p^2 + \dots$$

Este cálculo se puede hacer bien con al utilización de la ecuación de Dirac y tomando el límite de baja velocidad en la ecuación relativista. Es una corrección del orden $W_D/H_0 \approx \alpha^2$.

Hay otras correcciones hiperfinas que provienen del espín del electrón y del espín del protón. Pero van como $\alpha^2/2000$.

Consideramos el sistema con $n = 2, \ell = 0, 1$ que representan los estados $2s$ y $2p$ se tienen $m_\ell = 1, 0, -1$ $m_s = 1/2, -1/2$ y

$$4 \otimes 2_{\text{spin } p} \otimes 2_{\text{spin } e} = 16,$$

es decir una matriz de 16×16 . Serán ocho estados $\langle n, \ell, m_\ell, m_s \rangle$ (base completa).

$$W = \underbrace{W_{mv}}_{\sim p^4} + \underbrace{W_{so}}_{\sim \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}} + \underbrace{W_D}_{\sim |\mathbf{r}|}$$

y esta corrección W es par ante Π y como

$$W_{mv} \sim p^4, \quad W_{so} \sim \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad W_D \sim |\mathbf{x}|$$

habrá estados que no se pueden conectar: no hay vínculo entre $\ell = 0$ y $\ell = 1$. Sólo habrá elementos de matriz $\neq 0$ que sean de la misma paridad, se tiene algo como

$$\begin{array}{cc} 2s & 2p \\ 2s \left(\begin{array}{c} [2 \times 2] \\ [6 \times 6] \end{array} \right) & 2p \end{array}$$

$|2s\rangle$ es par ($\ell = 0$) y $|2p\rangle$ es impar ($\ell = 1$) y entonces $|2s\rangle, |2p\rangle$ no están conectados.

En cada subespacio serán diagonales $W_{mv} \sim 1\#_1$ diagonal en la base (porque no le interesa el spin), $W_D \sim 1\#_2$ diagonal en la base y W_{so} no será diagonal porque está degenerado.

Calculemos algunos elementos de matriz ahora.

$$\langle 2s | W_{mn} | 2s \rangle = - \left\langle 2s \left| \frac{p^4}{8m_e^3 c^2} \right| 2s \right\rangle, \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

donde $p^4 = 4m_e^2(H_0 - V(r))^2$ con $V = -e/r$. Por otra parte,

$$\langle | W_{mv} | \rangle = -\frac{1}{2m_e c^2} [E_n^2 + 2E_n e^2 \langle 1/R \rangle + e^4 \langle 1/R^2 \rangle]$$

Aquí, desarrollo el p^4 en un término que no depende de spin-up o spin-down. Los términos de matriz necesitan integrarse como

$$\langle 1/R^q \rangle = \int dr d\Omega \frac{1}{r^q} \varphi_{n\ell m}^* \varphi_{n\ell m} = \int dr r^{2-q} |R_{n\ell m}|^2,$$

donde ha hemos hecho la integral en ángulo sólido. Veamos unos números

$$\langle W_{mv} \rangle_{2s} = -\frac{13}{128} \alpha^4 m_e c^2 \quad \langle W_{mv} \rangle_{2p} = -\frac{7}{384} \alpha^4 m_e c^2.$$

El término de contacto supone un cálculo más sencillo

$$\langle n, \ell, m | W_D | n, \ell, m \rangle = \frac{\hbar^2 4\pi e^2}{8m_e^2 c^2} |\varphi_{n\ell m}(r=0)|^2,$$

luego, la única función de onda en $r=0$ es la $\ell=0$ y entonces

$$\langle W_D \rangle_{2s} = \frac{1}{16} \alpha^4 m_e c^2 \quad \langle W_D \rangle_{2p} = 0$$

Para el caso espín-órbita se tienen los conmutadores

$$[\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{L}] \neq 0 \quad [\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \mathbf{S}] \neq 0$$

pero $[\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, J^2] = 0$ si $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. El cambio de base $|\ell, m_\ell, s, m_s\rangle \rightarrow |j, \ell, s, m\rangle$ hace que se diagonalice automáticamente la matriz

$$\langle \ell, s, j, m | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \ell, s, j, m \rangle = \begin{cases} \frac{\ell \hbar^2}{2} & j = \ell + \frac{1}{2} \\ \frac{\ell \hbar^2}{2} & j = \ell + \frac{1}{2} \end{cases}$$

para el caso spin 1/2. Se tiene lo siguiente para los estados

$$\begin{array}{ll} 2s_{1/2} = 0 + \frac{1}{2} \longrightarrow 0 & \text{Corrección nula} \\ 2p_{1/2} \longrightarrow & -\hbar^2 \quad \text{Corrección negativa} \\ 2p_{3/2} \longrightarrow & \frac{\hbar^2}{2} \end{array}$$

$$\langle W_{so} \rangle_{2s_{1/2}} = 0 \quad \langle W_{so} \rangle_{2p_{1/2}} = -\frac{1}{48}\alpha^4 m_e c^2 \quad \langle W_{so} \rangle_{2p_{3/2}} = \frac{1}{96}\alpha^4 m_e c^2$$
$$\begin{array}{l} 2s_{1/2} \quad \alpha^4 m_e c^2 \left(-\frac{13}{128} + \frac{1}{16} + 0 \right) = -\frac{5}{128} \alpha^4 m_e c^2 \\ 2p_{1/2} \quad \alpha^4 m_e c^2 \left(-\frac{7}{384} + 0 - \frac{1}{48} \right) = -\frac{5}{128} \alpha^4 m_e c^2 \\ 2p_{3/2} \quad -\frac{1}{128} \alpha^4 m_e c^2 \end{array}$$

deg 8

$-\frac{5}{128} \alpha^4 m c^2$

deg 4

$-\frac{1}{128} \alpha^4 m c^2$

deg 2 $2S_{1/2}$

deg 2 $2P_{1/2}$

$$E = \frac{mc^2}{\left[1 + \alpha/(n - (j + 1/2) + \sqrt{(j + 1/2)^2 - \alpha^2})\right]^{1/2}},$$

De manera que hay ocho estados $|n = 2, \ell, m_\ell, s, m_s\rangle$ que al calcular esta perturbación W resultan

Los dos primeros niveles tienen la misma ΔE porque en MCR e ve que $E = E(n, j)$, es decir que no depende directamente de ℓ, s .

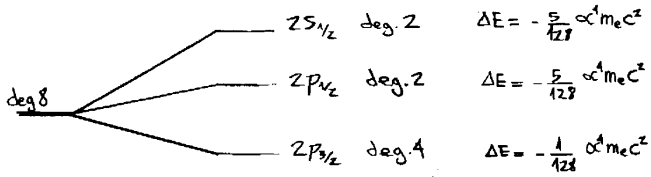


Figura 2.1

Un sketch de los métodos perturbativos

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & & & & & & \\ & E_2 & & & & & \\ & & E & & & & \\ & & & E & & & \\ & & & & \dots & & \\ & & & & & E & \\ & & & & & & E_3 \\ & & & & & & & E_4 \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & V_3 & & & & \\ & & & V_4 & & & \\ & & & & \dots & & \\ & & & & & & V_{nn} \end{pmatrix}$$

En H tenemos un bloque de energías degeneradas y se diagonalizará el bloque correspondiente en la matriz del potencial perturbativo V .

Partículas idénticas

Más apropiado sería partículas indistinguibles. Si en algún punto del espacio se solapan las funciones de onda (interfieren) de dos partículas del mismo tipo cosa de que tengan misma masa, carga, etc. (dos electrones por ejemplo) no podemos distinguir cual es cual. Sean dos estados $|k'\rangle, |k''\rangle$ con $k^{(i)}$ índice colectivo. En la zona de interferencia es

$$|k'\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2 \quad \text{o} \quad |k''\rangle_1 \otimes |k''\rangle_2$$

donde ambos estados son ortogonales y los subíndices numéricos identifican a la partícula.

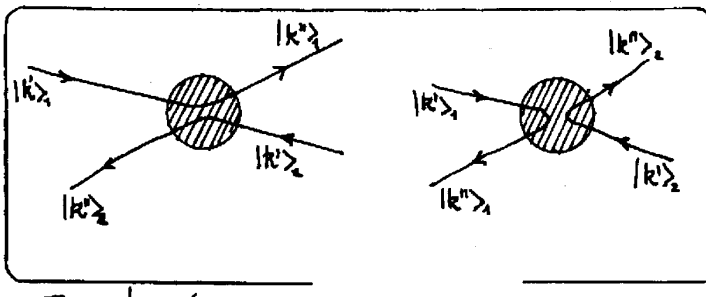
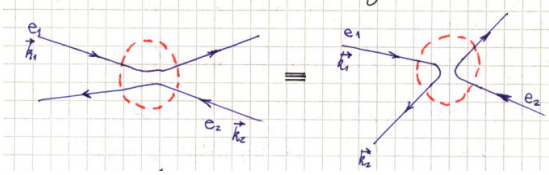


Figura 0.1



Entonces un estado general será

$$|K\rangle = c_1 |k'\rangle_1 \otimes |k''\rangle_2 + c_2 |k''\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2$$

con $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Esta es la “degeneración de intercambio”.

9.0.1 Permutación

Definimos este operador como

$$P_{12}(|k'\rangle_1 \otimes |k''\rangle_2) = |k''\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2$$

$$P_{12} = P_{21} \quad P_{12}^2 = \mathbb{1} \quad P_{12}^\dagger = P_{12} \quad P_{12}P_{12}^\dagger = 1 \quad \text{autovalores: } \pm 1$$

Su función es la de intercambiar etiquetas, no el orden de las partículas.

Sean operadores \hat{A}_1, \hat{A}_2 que actúan sobre las partículas 1,2; es decir

$$\hat{A}_1 \equiv \hat{A}_1 \otimes \mathbb{1}_2, \quad \hat{A}_2 \equiv \mathbb{1}_1 \otimes \hat{A}_2$$

$$\hat{A}_1 |a'\rangle |a''\rangle = a' |a'\rangle |a''\rangle \quad \hat{A}_2 |a'\rangle |a''\rangle = a'' |a'\rangle |a''\rangle$$

$$P_{12}A_1P_{12}^{-1}P_{12}|a'\rangle|a''\rangle = P_{12}a'|a'\rangle_1|a''\rangle_2 = a'|a''\rangle_1|a'\rangle_2$$

$$= P_{12}A_1P_{12}^{-1}|a''\rangle_1|a'\rangle_2 = a'|a''\rangle_1|a'\rangle_2$$

$$= A_2|a''\rangle_1|a'\rangle_2 = a'|a''\rangle_1|a'\rangle_2$$

y

$$P_{12}\hat{A}_1P_{12}^{-1} = \hat{A}_2, \quad P_{21}A_1 - A_2P_{12} = 0$$

Luego \hat{A} es simétrico si $[\hat{P}_{12}, \hat{A}_{12}] = 0$. Sea $[\hat{P}_{12}, \hat{H}] = 0$ entonces es P_{12} constante de movimiento y

$$P_{12}|\alpha\rangle = \pm |\alpha\rangle$$

Sea

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + v(|x_1 - x_2|) + V_e(\mathbf{x}_1) + V_e(\mathbf{x}_2)$$

donde si las partículas son idénticas es $m_1 = m_2 \equiv m$ y defino dos estados

$$|k'k''\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 + |k''\rangle_1 |k'\rangle_2) \quad |k'k''\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 - |k''\rangle_1 |k'\rangle_2)$$

con

$$P_{12} | \rangle_s = + | \rangle_s \quad P_{12} | \rangle_a = - | \rangle_a$$

Puedo introducir operadores de simetrización y antisimetrización

$$\hat{S}_{12} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} + \hat{P}_{12})$$

$$\hat{A}_{12} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} - \hat{P}_{12})$$

que verifican

$$S^2 = S, \quad A^2 = A, \quad SA = AS = 0, \quad [S, A] = 0$$

$$\hat{S}_{12}(c_1 |k'\rangle |k''\rangle + c_2 |k''\rangle |k'\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 + c_2)(|k'\rangle |k''\rangle + |k''\rangle |k'\rangle)$$

es simétrico y

$$\hat{A}_{12}(c_1 |k'\rangle |k''\rangle + c_2 |k''\rangle |k'\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 - c_2)(|k'\rangle |k''\rangle - |k''\rangle |k'\rangle)$$

es antisimétrico. En general se complica bastante con más de dos partículas

$$P_{ij}(|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 \dots |k^i\rangle_i \dots |k^j\rangle_j \dots) = (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 \dots |k^j\rangle_i \dots |k^i\rangle_j \dots)$$

pués tenemos

$$[P_{ij}, P_{k\ell}] \neq 0 \quad \text{en general}$$

Las permutaciones para tres partículas pueden descomponerse

$$P_{123} = P_{12}P_{13}$$

$$P_{123} |k'\rangle |k''\rangle |k'''\rangle = P_{12} |k'''\rangle |k''\rangle |k'\rangle = |k''\rangle |k'''\rangle |k'\rangle$$

Con tres partículas hay $3!$ estados; uno totalmente simétrico $| \rangle_s$, uno totalmente antisimétrico $| \rangle_a$ y cuatro sin simetría definida. En estados simétricos serán

$$|k'k''k'''\rangle_{s/a} = \frac{1}{\sqrt{6}} (|k'k''k'''\rangle + |k''k'''\rangle + |k'''\rangle + |k''k'k'''\rangle + |k'k'''\rangle + |k''k'k'''\rangle + |k'k'k'''\rangle + |k'k''k'''\rangle + |k''k'k'''\rangle + |k''k'''\rangle + |k'''\rangle + |k'k'k'''\rangle + |k'k''k'''\rangle + |k''k'k'''\rangle + |k''k'''\rangle + |k'''\rangle)$$

donde el $|\rangle_a$ tiene el signo $(-)$ en las permutaciones anticíclicas y el $(+)$ en las cíclicas. Existe un determinante de Slater como método mnemotécnico de obtener los estados $|\rangle_a$.

$$|\Psi\rangle_a = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} |k'\rangle & |k''\rangle & |k'''\rangle \\ |k'\rangle & |k''\rangle & |k'''\rangle \\ |k'\rangle & |k''\rangle & |k'''\rangle \end{vmatrix}$$

La obtención de estos estados corresponde a aplicar

$$A_{123} = \frac{1}{\sqrt{3!}} (\mathbb{1} + P_{231} + P_{312} - P_{212} - P_{132} - P_{321})$$

$$(\mathbb{1} + P_{23}P_{21} + P_{31}P_{32} - P_{21}P_{23} - P_{13}P_{12} - P_{32}P_{31})$$

Si dos $k^{(i)}$ coinciden ya no hay estado antisimétrico posible.

9.1 Postulado de simetrización

Permitirá romper la degeneración de intercambio. Postulamos que toda partícula es de uno de dos tipos de acuerdo a su simetría

Sistemas de N part. idénticas	N	simetrica	BE	entero
	N	antisimetrica	FD	semientero

En la naturaleza no ocurren simetrías mixtas.

9.1.1 Principio de exclusión de Pauli

Para fermiones supongamos sistema de dos partículas idénticas

$$|\Psi\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 - |k''\rangle_1 |k'\rangle_2)$$

y entonces si $k' = k''$ se tiene que

$$|\Psi\rangle_a = 0.$$

No es posible tener dos fermiones con iguales números cuánticos. Por el contrario los bosones sí pueden tener iguales números cuánticos.

9.1.2 Sistema de dos electrones de spin 1/2

Sistema de dos electrones de spin 1/2. Son fermiones. Sea que $[H, S] = 0$ con $S = S_1 + S_2$. Se tendrá

$$|\Psi\rangle^{sist} = |\Psi\rangle^{spa} \otimes |\Psi\rangle^{spin}$$

Como $|\Psi\rangle^{sist}$ es simétrica tendremos

$$P_{12} |\Psi\rangle^{sist} = -|\Psi\rangle^{sist}$$

$$P_{12} |\Psi\rangle^{sist} = P_{12} |\Psi\rangle^{spa} \otimes P_{12} |\Psi\rangle^{spin}$$

Para dos electrones con spin 1/2 se tiene $j_1 + j_2$ entonces $0 \leq j \leq 1$ de modo que $|m_1| \leq j_1$ y $|m_2| \leq j_2$ entonces $0 \leq S \leq 1$ y $|m_{s_1}| \leq s_1$ y $|m_{s_2}| \leq s_1$.

$$\left. \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \end{array} \right\} \text{triplete } s = 1 \quad \text{Estados simétricos}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \left\} \text{singlete } s = 0 \quad \text{Estados antisimétricos}$$

Entonces

$$s = 0 \quad \Rightarrow |\Psi\rangle^{spa} \text{ es simétrica}$$

$$s = 1 \quad \Rightarrow |\Psi\rangle^{spa} \text{ es antisimétrica}$$

Vistos desde el CM de los electrones

$$P_{12} = \Pi$$

y entonces

$$P_{12} |n\ell m\rangle = (-1)^\ell |n\ell m\rangle$$

$$\ell \text{ par} \rightarrow |\Psi\rangle^{spa} = P_{12} |\Psi\rangle^{spa} \quad \ell \text{ impar} \rightarrow -|\Psi\rangle^{spa} = P_{12} |\Psi\rangle^{spa}$$

Necesitaré ℓ par con $s = 0$ entonces $\ell + s = j$ par. En cambio, si ℓ impar con $s = 1$ entonces $\ell + s = j$ par. Dos electrones sólo se acoplan a momento total j par.

Sean los siguientes estados

$$|\Psi\rangle_{sa} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle |k''\rangle \pm |k''\rangle |k'\rangle)$$

$$|\Psi_F\rangle_{sa} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a'\rangle|a''\rangle \pm |a''\rangle|a'\rangle)$$

y la probabilidad será

$$\begin{aligned} \text{Prob} &= |{}_{sa}\langle\Psi|\Psi\rangle_{sa}|^2 = \left| \frac{1}{2}({}_1\langle a'|{}_2\langle a''|\pm{}_1\langle a''|{}_2\langle a'|)(|k'\rangle_1|k''\rangle_2 \pm |k''\rangle_1|k'\rangle_2) \right|^2 = \\ &= \frac{1}{4} |\langle a'|\langle a''| |k'\rangle|k''\rangle \pm \langle a''|\langle a'| |k'\rangle|k''\rangle \pm \langle a'|\langle a''| |k''\rangle|k'\rangle \pm \langle a''|\langle a'| |k''\rangle|k'\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4} |2\langle a'|k'\rangle\langle a''|k''\rangle \pm 2\langle a''|k'\rangle\langle a'|k''\rangle|^2 \\ &= \left| \underbrace{\langle a'|k'\rangle\langle a''|k''\rangle}_{\text{término directo}} \pm \underbrace{\langle a''|k'\rangle\langle a'|k''\rangle}_{\text{término de intercambio}} \right|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Prob} &= |{}_{sa}\langle\Psi|\Psi\rangle_{sa}|^2 = |\langle a'|k'\rangle\langle a''|k''\rangle|^2 + |\langle a''|k'\rangle\langle a'|k''\rangle|^2 \\ &\quad \pm 2\mathcal{R}e\left(\underbrace{\langle a'|k'\rangle\langle a'|k''\rangle^*\langle a''|k''\rangle\langle a''|k'\rangle^*}_{\text{Interferencia}}\right) \end{aligned}$$

Vemos que aparece una interferencia que será importante solamente si hay solapamiento. En el caso de no solaparse o con partículas clásicas solo el primer término es de importancia.



9.2 El átomo de helio

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

y si el último término es ~ 0 decimos que en ese caso H está desacoplado

$$\Psi = \Psi_1 \otimes \Psi_2$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{S}] = 0 \quad \mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

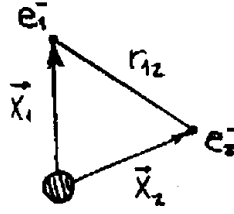


Figura 2.2

S es constante de movimiento y para la $|\psi_{spin}\rangle$ se tiene

$$\begin{aligned}
 S = 0 & \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad \text{singlete} \\
 S = 1 & \quad \begin{aligned} & |\uparrow\uparrow\rangle \\ & |\downarrow\downarrow\rangle \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned} \quad \text{triplete}
 \end{aligned}$$

Sea $e_1^- |100\rangle$ y $e_2^- |n\ell m\rangle$

$$|\Psi\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle |n\ell m\rangle \pm |n\ell m\rangle |100\rangle) |\Psi_{spin}\rangle$$

de modo que con $S = 0$ será

$$|\Psi\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle |n\ell m\rangle + |n\ell m\rangle |100\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

y en cambio con $S = 1$

$$|\Psi\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle |n\ell m\rangle - |n\ell m\rangle |100\rangle) \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \end{cases}$$

Podemos pensar en teoría de perturbaciones ahora y calcular

$$E_{He} = E_{100} + E_{n\ell m} + \Delta E$$

donde

$$\Delta E = \left\langle \Psi \left| \frac{e}{r_{12}} \right| \Psi \right\rangle$$

y el término en el *sandwich* lo considero una perturbación.

$$\Delta E = \langle \Psi^{spin} |^{\dagger} \frac{1}{2} (\langle 100 | \langle n\ell m | \pm \langle n\ell m | \langle 100 |) \frac{e}{r_{12}} (|100\rangle |n\ell m\rangle \pm |n\ell m\rangle |100\rangle) | \Psi^{spin} \rangle$$

$$\Delta E = \langle 100 | \langle n\ell m | \frac{e}{r_{12}} |100\rangle |n\ell m\rangle \pm \langle n\ell m | \langle 100 | \frac{e}{r_{12}} |100\rangle |n\ell m\rangle$$

que se puede escribir más resumidamente como

$$\Delta E = I \pm J$$

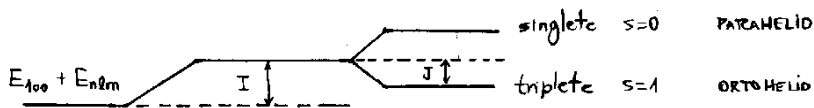
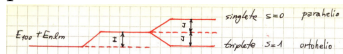


Figura 2.3

Esta separación de los niveles en $\pm J$ se debe al carácter de fermión de las partículas.



Picture de interacción y perturbación dependiente del tiempo

Puédese escribir perturbaciones dependientes del tiempo

$$H = H_0 + V(t)$$

con $|n\rangle$ no dependiente del tiempo. Se estudiarán transiciones entre autoestados del H_0 (que son estacionarios). Un autoestado permanece en el tiempo como tal pero con fase oscilante

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0, t\rangle_s &= e^{-iH/\hbar(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle_s \\ &= e^{-iH/\hbar(t-t_0)} e^{-iV(t)/\hbar(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_n e^{-iH_0/\hbar t} e^{-iV(t)/\hbar t} |n\rangle \langle n | \alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_n e^{-iE_n^0/\hbar t} |n\rangle e^{-iV(t)/\hbar t} \langle n | \alpha, t_0\rangle \\ e^{iH_0/\hbar t} |\alpha, t_0, t\rangle_s &= \sum_n \underbrace{e^{-iV(t)/\hbar t} \langle n | \alpha, t_0\rangle}_{C_n(t)} |n\rangle = |\alpha, t_0, t\rangle_I \end{aligned}$$

es decir

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0/\hbar t} |\alpha, t_0, t\rangle_s$$

Aquí se puede pensar que

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

- $e^{-iE_n^0 t/\hbar}$ evoluciona por H_0

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

	Dirac	Schrödinger	Heisenberg
estados $ \alpha\rangle$	evolucionan con $V(t)$	evolucionan con H	fijos
operadores	evolucionan con H_0	fijos	evolucionan con H
base $ a'\rangle$	fijos	fijos	evolucionan

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I) = H e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$i\hbar e^{-iH_0 t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V(t) e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V(t) |\alpha, t_0, t\rangle_I,$$

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

$${}_s \langle A_s \rangle_s = {}_I \langle A_I \rangle_I$$

$${}_I \langle \alpha, t_0, t | A_I | \alpha, t_0, t \rangle_I = {}_s \langle \alpha, t_0, t | e^{-iH_0 t/\hbar} A_I e^{iH_0 t/\hbar} | \alpha, t_0, t \rangle_s = {}_s \langle \alpha, t_0, t | A_s | \alpha, t_0, t \rangle_s =$$

Y los operadores evolucionan según

$$A_I = e^{iH_0 t/\hbar} A_s e^{-iH_0 t/\hbar}$$

$$\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_I, H_0]$$

que es igual que la ecuación de Heisenberg pero con \hat{H}_0 en lugar de H . Los kets base permanecen fijos, porque así lo hacen en Schrödinger, en realidad oscila su fase; entonces

$$|n, t_0, t\rangle_s = e^{-iHt/\hbar} |n, t_0\rangle_s$$

$$|n, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iHt/\hbar} |n, t_0\rangle_s = e^{-iVt/\hbar} |n, t_0\rangle_s = e^{iH_0 t/\hbar} |n, t_0\rangle_s$$

$$|n, t_0, t\rangle_I = e^{iE_0 t/\hbar} |n, t_0, t\rangle_s$$

10.0.1 Evolución de los coeficientes

$$\begin{aligned}
 |\alpha, t_0, t\rangle_I &= \sum_n |n\rangle \langle n | \alpha, t_0, t\rangle_I = \sum_n C_n(t) |n\rangle \\
 C_n(t) &= e^{iVt/\hbar} \langle n | \alpha, t_0\rangle_s \\
 \langle n | \alpha, t_0, t\rangle_I &= C_n(t)
 \end{aligned}$$

con $|n\rangle, |m\rangle$ autoestados de H_0 , le pego un $\langle n|$ a la ecuación de evolución de kets,

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \alpha, t_0, t\rangle_I &= \langle n | V_I(t) | \alpha, t_0, t\rangle_I \\
 &= \sum_m \langle n | V_I(t) | m\rangle \langle m | \alpha, t_0, t\rangle_I \\
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) &= \sum_m C_m(t) \langle n | V_I(t) | m\rangle \\
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) &= \sum_m C_m(t) \langle n | V_s | m\rangle e^{it(E_n - E_m)/\hbar} \\
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) &= \sum_m C_m(t) V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t}
 \end{aligned}$$

donde $V_{nm}(t) \equiv \langle n | V(t) | m\rangle$ y $\omega_{nm} \equiv (E_n - E_m)/\hbar$. Esta es la ecuación que cumplen los coeficientes, donde $|C_n(t)|^2$ es la probabilidad de hallar al sistema en el autoestado $|n\rangle$. Es decir

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \dots \\ \dot{c}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} e^{i\omega_{12}} & \dots \\ V_{21} e^{i\omega_{21}} & V_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_N \end{pmatrix}$$

que puede ser de difícil solución.

10.0.2 Método perturbativo (dependiente del tiempo)

Pensaremos en una serie perturbativa

$$C_n(t) = C_n(t)^{(0)} + C_n(t)^{(1)} + C_n(t)^{(2)} + \dots$$

El evolucionador temporal en la picture de interacción cumple

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_I$$

que viene de

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0)$$

con $U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ la cual resolviendo nos hace llegar a

$$U_I(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt'$$

y esto lleva a la serie de Dyson:

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) = & \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int V_I(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t V_I(t') \int_{t_0}^{t'} V_I(t'') dt'' + \dots \\ & + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt''' \dots \int_{t_0}^{t^{n-1}} dt^n V_I(t') V_I(t'') \dots V_I(t^n) \end{aligned}$$

10.0.3 Transiciones entre autoestados del hamiltoniano H_0

$$|i, t_0 = 0, t\rangle_I = U_I(t, 0) |i\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | U_I(t) | i\rangle$$

y como se viera oportunamente

$$|i, t\rangle_I = \sum_n C_n(t) |n\rangle = \sum_n (\langle n | U_I(t) | i\rangle) |n\rangle$$

La amplitud de transición será

$$C_n(t) = \langle n | U_I(t) | i\rangle$$

con $|i\rangle, |n\rangle$ autoestados de H_0 . Sea $\tilde{C}_n(t) = \langle n | U_s(t) | i\rangle$ y busquemos una expresión

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0, t\rangle_I &= e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_s \\ &= e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_s \\ |\alpha, t_0, t\rangle_I &= e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\alpha, t_0\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_I \\ e^{iH_0 t/\hbar} \hat{U}_S e^{-iH_0 t_0/\hbar} &= \hat{U}_I \end{aligned}$$

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

$$C_n(t) = \langle n | e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar} | i\rangle$$

$$C_n(t) = e^{-i/\hbar[E_n^{(0)}t - E_i^{(0)}t_0]} \langle n | U_S(t, t_0) | i \rangle = e^{-i/\hbar[E_n^{(0)}t - E_i^{(0)}t_0]} \tilde{C}_n(t) \\ \Rightarrow |C_n(t)|^2 = |\tilde{C}_n(t)|^2.$$

Para transiciones entre autoestados de H_0 los coeficientes dan la misma probabilidad (evaluados con el evolucionador de Dirac que con el de Schrödinger). Vamos a las transiciones a los tres

- orden 0

$$C_n^{(0)}(t) = \langle n | 1 | i \rangle = \delta_{ni}$$

- orden 1

$$C_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}} V_{ni}(t') dt' \quad V_{ni} \equiv \langle n | V(t) | i \rangle$$

- orden 2

$$C_n^{(2)}(t) = \sum_m \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{it'/\hbar(E_n - E_m)} V_{nm}(t') e^{it''/\hbar(E_m - E_i)} V_{mi}(t'')$$

y entonces la probabilidad de ir desde $|keti\rangle \rightarrow |i\rangle$, hasta orden dos, sería

$$P_{i \rightarrow n}^{(2)} = |C_n^{(0)}(t) + C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t)|^2$$

10.0.4 Ejemplo: potencial constante encendido abruptamente

Notemos que $V \neq V(t)$. Dependerá de cualquier otra cosa.

$$C_n^0(t) = 0$$

$$C_n^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i/\hbar(E_n - E_i)t'} V_{ni} dt' = \frac{V_{ni}}{(E_n - E_i)} (1 - e^{i\omega_{ni}t})$$

$$|C_n^1(t)|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left(\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right)$$

Es máxima la probabilidad cuando $\Delta E \rightarrow 0$. En ese caso las transiciones son a estados de la misma energía. A tiempo largo la probabilidad es no nula para aquellos estados

$$t \sim \frac{2\pi}{|\omega_{ni}|}$$

Hay probabilidad de transición $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ apreciable con $\Delta E \sim 0$.

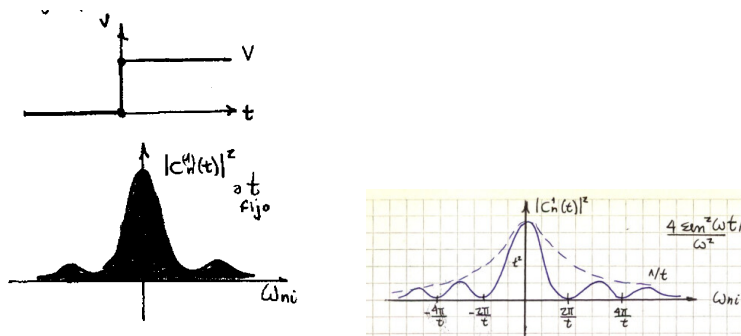
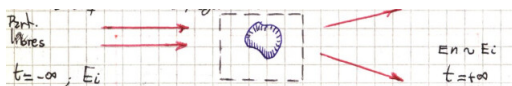


Figura 0.1

10.1 Scattering: orden 1



Este último ejemplo puede aplicarse a colisiones elásticas. Prendemos y apagamos un potencial que es el masacote al cual impactamos. De entrada ha partículas libres y de salida (lejos de V) partículas libres. Entonces $E_n - E_c \sim 0$ y consideraremos lo que sucede a tiempos largos. Interesará la probabilidad total de transicionar a estados de energía similares a E_i . Por ello se considera

$$\sum_{E_n \sim E_i} |C_n^1(t)|^2 \longrightarrow \int dE_n \rho(E_n) |C_n^1(t)|^2$$

donde el integrando es el número de estados dentro de un intervalo de energías $(E, E + dE)$. En tiempos muy largos la expresión [1] tiende a una

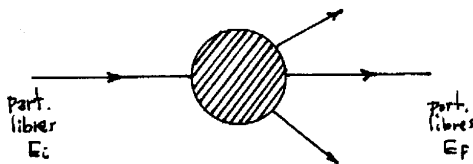


Figura 1.2

delta de Dirac y se integra fácil,

$$\lim \int dE \rho(E_n) |C_n^1(t)|^2 = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |\bar{V}_{ni}|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_n \sim E_i}$$

La probabilidad de transición es proporcional a t . Se suele definir una tasa de transición (probabilidad de transición por unidad de tiempo)

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{E_n \sim E_i}^n |C_n^{(1)}|^2 \right) = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |\bar{V}_{ni}|^2 \rho(E_n) = \omega_{i \rightarrow n}^{(1)}$$

que es la regla de oro de Fermi.

10.2 El método variacional

Se puede usar para aproximar la energía del estado fundamental (el estado de energía mínima)

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n,m} \langle \psi | n \rangle \langle n | H | m \rangle \langle m | \psi \rangle = \sum_{n,m} E_n \langle \psi | n \rangle \langle n | m \rangle \langle m | \psi \rangle$$

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{n,m} E_n C_n^* \langle n | m \rangle C_m = \sum_n E_n |C_n|^2$$

$$\sum_n E_n |C_n|^2 \geq \sum_n E_0 |C_n|^2 = E_0 \sum_n |C_n|^2 = E_0 \langle \psi_n | \psi_n \rangle$$

y usamos

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle n | \psi \rangle |n\rangle \quad \langle \psi | = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n |$$

para arribar a

$$\frac{\langle \psi_n | H | \psi_n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} \geq E_0.$$

10.2.1 Scattering a orden dos y OFPT

Continuando con el orden dos de scattering por un $V \neq V(t)$ se tiene:

$$\omega_{i \rightarrow n}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \overline{V_{ni} + \sum_{m \neq i} \frac{V_{nm} V_{mi}}{(E_i - E_m)}} \right|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_n \sim E_i}$$

Para obtener los siguientes términos dentro del $||^2$ podemos emplear un ardid gráfico conocido como *Old Fashioned Perturbation Theory*

Fíjese que en los estados intermedios estados virtuales $|m\rangle, |j\rangle$ no se conserva la energía. Son propagadores.

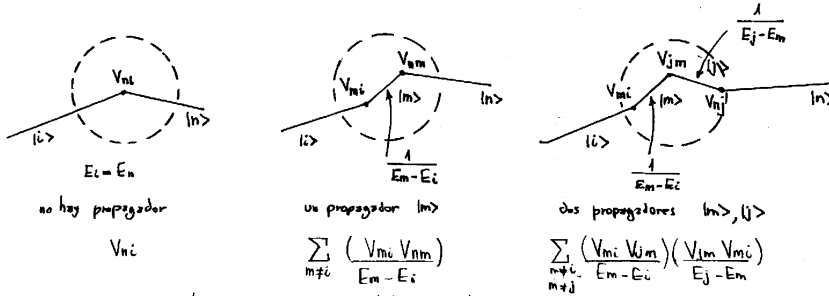


Figura 2.3

10.2.2 Perturbación armónica

Sea un potencial armónico y hermítico

$$V(t) = \mathbb{V} e^{i\omega t} + \mathbb{V}^\dagger e^{-i\omega t}, \quad \mathbb{V} \neq \mathbb{V}(t)$$

quiero ver probabilidad de transición a orden uno,

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t (V_{ni} e^{i\omega t'} + V_{ni}^\dagger e^{-i\omega t'}) e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} \left[V_{ni} \int_0^t e^{i(\omega + \omega_{ni})t'} dt' + V_{ni}^\dagger \int_0^t e^{i(-\omega + \omega_{ni})t'} dt' \right]$$

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} \left[V_{ni} \frac{e^{i(\omega + \omega_{ni})t} - 1}{i(\omega + \omega_{ni})} + V_{ni}^\dagger \frac{e^{i(-\omega + \omega_{ni})t} - 1}{i(-\omega + \omega_{ni})} \right]$$

$$C_n(t)^1 = \frac{V_{ni}}{\hbar} \frac{1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t}}{(\omega + \omega_{ni})} + \frac{V_{ni}^\dagger}{\hbar} \frac{1 - e^{i(-\omega + \omega_{ni})t}}{(-\omega + \omega_{ni})}$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_n(t)^1 = \frac{1}{\hbar} [V_{ni} \delta(\omega_{ni} + \omega) + V_{ni}^\dagger \delta(\omega_{ni} - \omega)]$$

Luego será nulo sólo si

$$\omega_{ni} = -\omega \quad \rightarrow \quad \frac{E_n - E_i}{\hbar} = -\omega \quad E_n = E_i - \hbar\omega$$

$$\omega_{ni} = -\omega \quad \rightarrow \quad \frac{E_n - E_i}{\hbar} = \omega \quad E_n = E_i + \hbar\omega$$

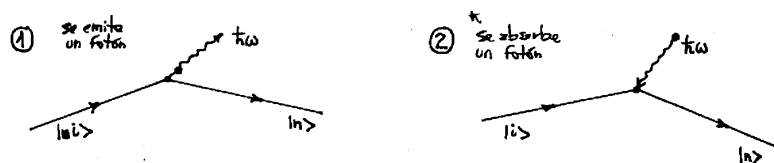
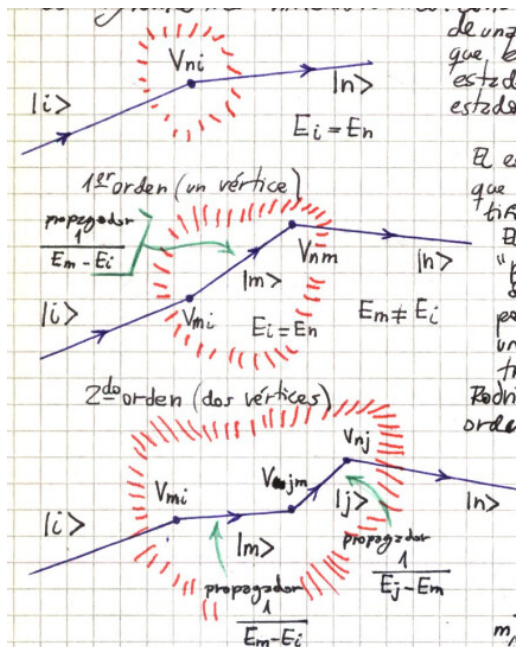


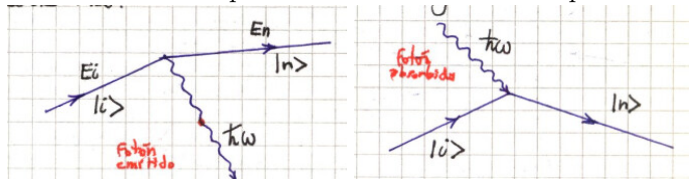
Figura 2.4

Luego,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_n(t)^1$$

representa la probabilidad de emitir o absorber fotones en una interacción. Se puede asociar que V crea fotones y V^\dagger destruye fotones. Para un átomo se tiene

Acá la sucesión de pictures como están en la carpeta:



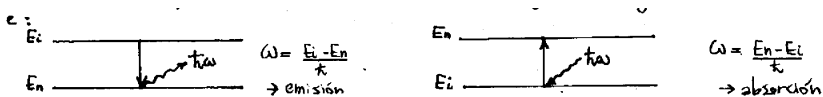
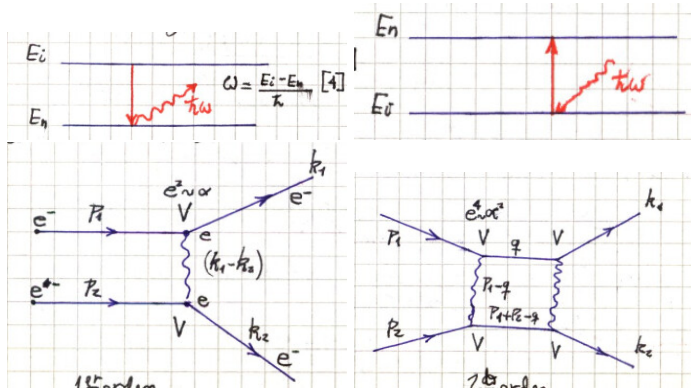


Figura 2.5



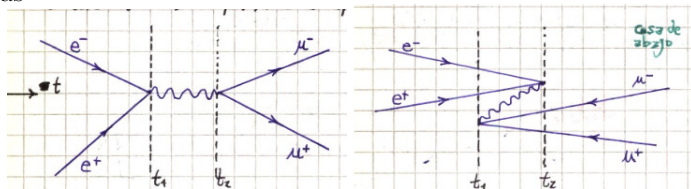
10.3 Desdoblamiento de estados iniciales

Queremos ver con cual v se desdobl原因 los $|i\rangle$. Para ello me construyo un potencial *suave*

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} V(t) = e^{\eta t} V, \quad \forall \text{cte.}$$

donde η es un parámetro regularizador.

Previa a la picture del desdoblamiento de estados iniciales estaban estas



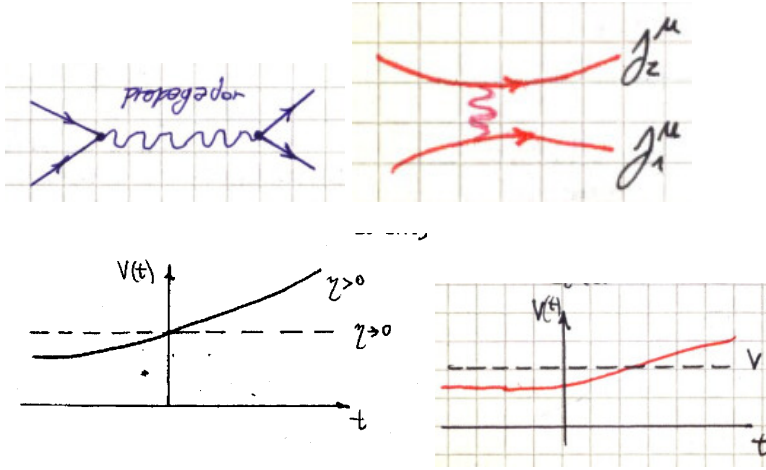


Figura 3.6

$$C_n(t)^1 = \lim_{t \rightarrow \infty} -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{ni} e^{\eta t'} e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

$$C_n(t)^1 = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \frac{e^{\eta t} e^{i\omega_{ni} t}}{\eta + i\omega_{ni}} \quad |C_n(t)^1|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2}$$

$$\frac{d}{dt} |C_n(t)^1|^2 = 2\eta \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2}$$

y tomando el límite $\eta \rightarrow 0$

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{d}{dt} |C_n(t)^1|^2 = 2 \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{\eta}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} = \begin{cases} 0 & \text{si } \omega_{ni}^2 \neq 0 \\ \infty & \text{si } \omega_{ni}^2 = 0 \end{cases}$$

y llegamos a la regla de oro de Fermi,

$$\frac{d}{dt} |C_n(t)^1|^2 = 2 \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{ni}) \pi$$

10.3.1 Scattering sección eficaz

$|k\rangle, |k'\rangle$ son autoestados de momento (partículas libres),

$$|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$$

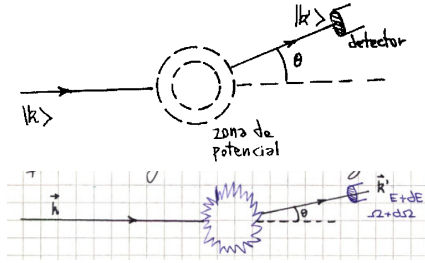


Figura 3.7

se conserva la energía. Consideraremos la aproximación más baja (aproximación de Born).

$$\omega = \int \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E' - E) |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 \rho(E') dE'$$

queremos calcular la densidad de estados de energía entre $(E, E + dE)$. Pensamos en una partícula libre en una caja 1D de longitud L .

$$N e^{ik_x x / \hbar}, \quad \text{con } k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$

pidiendo normalización unitaria $\langle k | k \rangle = 1$ se tiene

$$\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x / \hbar}$$

con $L \rightarrow \pm\infty$ son n_x, k_x continuas.

$$dk_x = \frac{2\pi}{L} dn_x \quad \rightarrow \quad dn_x = \frac{L}{2\pi} dk_x$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n^2 \quad \rightarrow \quad n^2 = \frac{L^2}{(2\pi)^2} k^2$$

$$dE = \frac{\hbar^2}{m} k dk \quad \rightarrow \quad dn = \frac{L}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2 k} dE$$

$$n^2 dn d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{mk}{\hbar^2} dE d\Omega$$

donde $n^2 dn d\Omega$ es la densidad de estados de energía $(E, E + dE)$ en $d\Omega$

$$n^2 dn d\Omega = \rho(E') dE'$$

Con esto sale la integral obteniéndose

$$\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = \frac{L^3}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^3} |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 k' d\Omega$$

Esta es la probabilidad de transición entre los impulsos \mathbf{k} , \mathbf{k}' . Es el número de partículas en la unidad de tiempo por unidad de área

$$\text{seccion eficaz} \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\# \text{ de part en } d\Omega \text{ en la unidad de t}}{\# \text{ de part incidentes en la unidad de t por unidad de área}}$$

Un elemento de matriz $\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle$ será

$$\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = \int d\mathbf{x}' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{k} \rangle = \int d\mathbf{x}' \frac{1}{L^3} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} V(\mathbf{x}'),$$

la transformada de Fourier del potencial es, amén de constantes, la am-

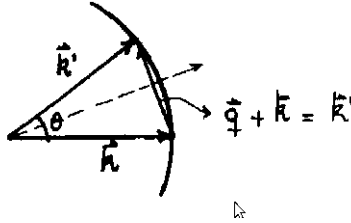


Figura 3.8

plitud a primer orden

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin(\theta/2) \quad \text{con } k = k'$$

Entonces para cualquier potencial esféricamente simétrico se puede hacer la integral

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \left(\frac{2m}{4\pi\hbar} \right)^2 \int d^3x' V(x) e^{i(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \cdot \mathbf{x}'} \right|^2$$

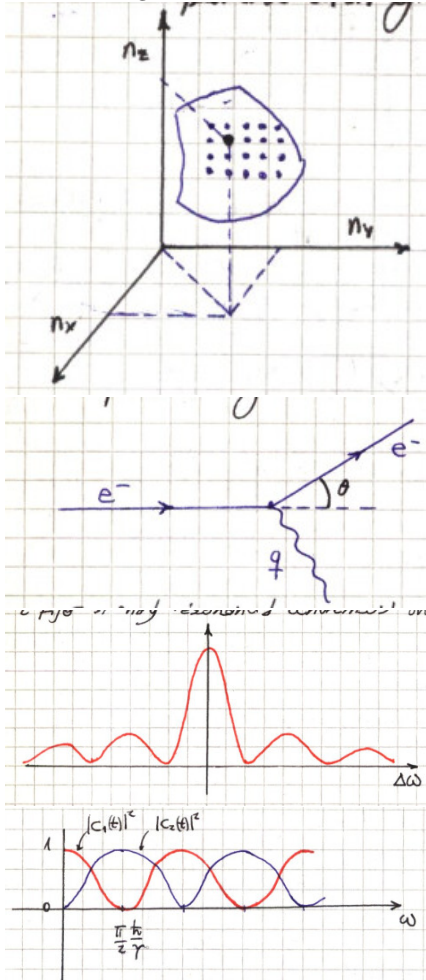
y expresamos todo en función de $q = q(\theta)$

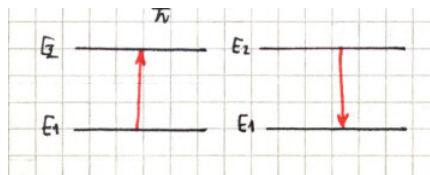
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty r V(r) \sin(q) dr \right|^2$$

Utilizando un potencial de Yukawa primero y tomando el límite para llegar al de Coulomb tenemos la sección eficaz de Rutherford

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2m^2 e^4}{\hbar^4} \frac{1}{16k^4 \sin^4(\theta/2)}$$

hay que tomar el potencial de Yukawa y luego el límite porque el de Coulomb diverge de entrada





Introducción a la mecánica cuántica relativista

Consideremos una partícula libre por el momento

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla$$

en relatividad la primera expresión no sirve pero la segunda y la tercera sí.

$$P_\mu = i\hbar \partial_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}$$
$$p^\mu = (E/c, \mathbf{p}) \quad p_\mu = (E/c, -\mathbf{p}) \quad x^\mu = (ct, \mathbf{x})$$
$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right) \equiv \partial_\mu \quad \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) \equiv \partial^\mu$$

y Schrödinger para la partícula libre es

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (1)$$

y entonces podemos hacer la cuenta

$$\psi^* \times (1) \rightarrow i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi$$

y conjugando la ecuación,

$$\psi \times (1)^* \rightarrow -i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi \nabla^2 \psi^*$$

y restando ambas expresiones se obtiene

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} (\psi \nabla^2 \psi^* - \psi^* \nabla^2 \psi)$$

$$i\hbar \frac{\partial(\psi^* \psi)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0$$

la cual se puede reescribir como

$$\frac{\partial(\psi^* \psi)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] \right) = 0$$

que es una analogía de la conservación de la carga en electrodinámica. Recordemos que la conservación de la carga era $\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$. Tenemos entonces una especie de conservación de la probabilidad. Note que $\psi^* \psi = |\psi|^2 \geq 0$

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$$

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = H \quad \text{con } H\psi = E\psi$$

Pero esto se pone muy complicado debido a la raíz

11.0.1 La ecuación de Klein-Gordon

Conserva el cuadrado para no complicar demasiado los reemplazos. Entonces

$$H^2 = E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$$

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

$$p^\mu p_\mu = m^2 c^2 \quad -\partial_\mu \partial^\mu \psi = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi$$

siendo el operador $\square^2 \equiv \partial_\mu \partial^\mu$ el dalembertiano.

$$\left(\square^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0$$

y procediendo de modo ídem al caso anterior,

$$\psi^* \cdot (2) = -\hbar^2 \psi^* \partial_t^2 \psi = -\hbar^2 c^2 \psi^* \nabla^2 \psi + m^2 c^4 \psi^* \psi$$

$$\psi \cdot (2)^* = -\hbar^2 \psi \partial_t^2 \psi^* = -\hbar^2 c^2 \psi \nabla^2 \psi^* + m^2 c^4 \psi \psi^*$$

y restando ambas ecuaciones tenemos

$$\hbar^2 \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*) = \hbar^2 c^2 \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{i}{c^2} [\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*] \right) + i \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = 0$$

El problema es que no puede asegurarse que esta $\rho \equiv i/c^2 [\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*]$ sea definida positiva, lo cual sería necesario para seguir una coherencia.

$$\psi = N e^{i/h(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)}$$

$$\partial_t \psi = -N \frac{iE}{\hbar} e^{i/h(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)}$$

$$\rho = \frac{i}{c^2} \left(N^* e^{-i/h(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} (-N) \frac{iE}{\hbar} e^{i/h(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} - N e^{i/h(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} N^* \frac{E}{\hbar} e^{i/h(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)} e^{i\pi/2} \right)$$

$$\rho = -\frac{i}{c^2} \left(2|N|^2 \frac{iE}{\hbar} \right) < 0 \quad \text{si} \quad E > 0$$

para una onda plana. Necesito considerar $E < 0$ pues $E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$ y la base debe ser completa.

La densidad ρ es positiva si tuviese $E < 0$ pero esto causa el problema de tener materia inestable, pues nunca se alcanza el fundamental. Acá muere en este atolladero la ecuación de Klein-Gordon.

11.0.2 La ecuación de Dirac

Dirac parte de pedir una ecuación lineal en el impulso \mathbf{p}

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2$$

usando $H\psi = E\psi$ y $H^2 = E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$ y con $\beta, \boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p}$ operadores.

$$H^2 = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2)$$

$$H^2 = c^2 \alpha_i p_i \alpha_\ell p_\ell + c^3 \alpha_i p_i \beta m + \beta mc^3 \alpha_i p_i + \beta^2 m^2 c^4$$

$$H^2 = c^2 \alpha_i \alpha_\ell p_i p_\ell + c^3 m p_i \underbrace{(\alpha_i \beta + \beta \alpha_i)}_{=0} + \beta^2 m^2 c^4$$

$$H^2 = c^2 \underbrace{\left(\frac{\alpha_i \alpha_\ell + \alpha_\ell \alpha_i}{2} \right)}_{\delta_{i\ell}} p_i p_\ell + m^2 c^4 \underbrace{\beta^2}_{=1}$$

$$\alpha_i \alpha_\ell + \alpha_\ell \alpha_i = 2\delta_{i\ell} \quad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad \beta^2 = 1$$

Como se ve, estos no pueden ser simples escalares. Dirac pide

- α, β hermíticos
- $\beta^2 = 1$ $\alpha^2 = 1$ autovalores ± 1
- traza nula

$$\alpha_i \beta = -\beta \alpha_i \quad \rightarrow \quad \beta \alpha_i \beta = -\beta^2 \alpha_i = -\alpha_i$$

$$Tr(\alpha_i) = -Tr(\beta \alpha_i \beta) = -Tr(\beta \beta \alpha_i)$$

- dimensión par

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

donde cada elemento de la matriz es de 2×2 .

Entonces

$$H\vec{\psi} = i\hbar \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t}, \quad H \in 4 \times 4, \vec{\psi} \in 4 \times 1, \quad \vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \sum_k \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + mc^2 \beta \psi \quad (3)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = i\hbar c \sum_k \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x_k} \alpha_k + mc^2 \psi \alpha_k \beta$$

$$\psi^\dagger \cdot (3) - (3)^\dagger \cdot \psi \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) = -i\hbar c \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} (\psi^\dagger \alpha_k \psi)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) + c \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} (\psi^\dagger \alpha_k \psi) = 0$$

Y si $\rho \equiv \psi^\dagger \psi$ ahora tenemos una densidad de probabilidad como requiere la naturaleza.

11.0.3 Ejemplo: partícula libre quieta

Sea una partícula libre en reposo,

$$\mathbf{p} = 0 \quad H = \beta mc^2$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \beta mc^2 \psi$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Tenemos cuatro ecuaciones, dos con energía positiva y dos con energía negativa

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = mc^2 \psi_i \quad i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = -mc^2 \psi_i$$

$$\psi_1 = e^{-imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \psi_3 = e^{imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Como aún tenemos degeneración de orden dos, necesitaremos un operador que conmute con el H

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad [H, \vec{\Sigma}] = 0$$

$$\Sigma_3 = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \psi_1, E = mc^2, \Sigma_3 = 1 & \quad \psi_2, E = mc^2, \Sigma_3 = -1 \\ \psi_3, -E = mc^2, \Sigma_3 = 1 & \quad \psi_4, -E = mc^2, \Sigma_3 = -1 \end{aligned}$$

Podemos identificar

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$$

$$\text{si } p \neq 0 \Rightarrow [H, \vec{\Sigma}] = 2ic\alpha \times \mathbf{p}$$

11.0.4 Energías negativas

Como $E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}$ hay $E < 0$ y además un *gap* de ancho $2mc^2$ entre ellas. Las $E < 0$ harían que la materia jamás alcance un estado fundamental y por ende jamás se estabilice. Dirac piensa que los estados de $E < 0$ están todos llenos. No decaen más electrones allí dentro. Es el mar de Dirac. Iluminando ese vacío se lo puede excitar.

Podemos hacer saltar a la zona positiva una carga ($-e$) dejando un hueco positivo (equivalente a una carga $+e$). Es una creación e pares

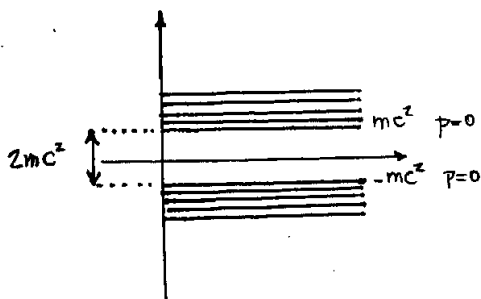


Figura 0.1

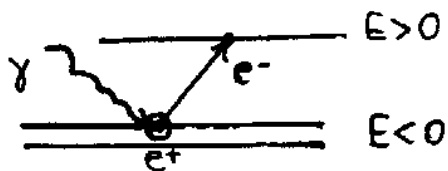
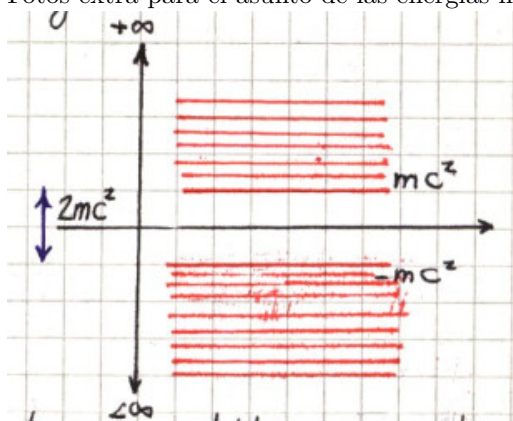
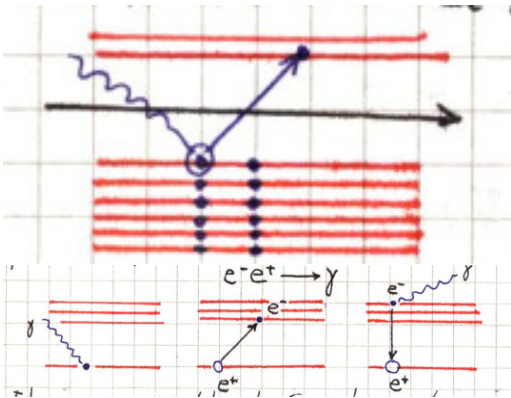


Figura 0.2

$\gamma \rightarrow e^-e^+$, sin embargo el proceso inverso $e^-e^+ \rightarrow \gamma$ de aniquilación de pares ocurre prontamente. Se observó experimentalmente.

Fotos extra para el asunto de las energías negativas a continuación:





Apéndice A

Tensor de Levi-civita

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} \pm 1 & i, j, k \text{ diferentes} \\ 0 & \text{Si algún par es igual} \end{cases}$$

y el signo es de acuerdo a si la permutación es par o impar.

ID I X Siendo \mathbf{A} un vector generico y ϕ un campo escalar,

$$\int dp e^{ipa(x-x')} = \frac{2\pi}{a} \delta(x-x').$$