

# MECANICA CUANTICA II<sup>1</sup>

Prof. Fidel Schaposnik  
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas  
Universidad Nacional de La Plata

May 19, 2021

<sup>1</sup> <https://sites.google.com/site/schaposnik/>

# Clase 1

## Mecánica Cuántica relativista

### La ecuación de Klein-Gordon

A partir de las reglas de cuantificación canónica se puede obtener la ecuación cuántica (no relativista) que describe la dinámica de una partícula libre de masa  $m$ .

En efecto, de la relación de la mecánica clásica no relativista entre energía  $E$  y momento  $\vec{p}$ ,

$$\frac{\vec{p}^2}{2m} + V = E \quad (1.1)$$

y de las reglas de cuantificación canónica<sup>1</sup>

$$\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad (1.2)$$

$$E \rightarrow \hbar i \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.3)$$

se obtiene la ecuación de Schrödinger para la función de onda  $\psi(\vec{x}, t)$  que contiene toda la información posible sobre el estado de una partícula libre de masa  $m$ ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}, t) = \hbar i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) \quad (1.4)$$

Esta ecuación es obviamente no covariante relativista (i.e. frente a transformaciones de Lorentz): el tiempo y las coordenadas espaciales

---

<sup>1</sup>La regla (1.3) puede ser enunciada de varias maneras, la elegida es la más simple para los presentes fines.

no son tratados en un pie de igualdad; incluye una derivada primera en el tiempo y derivadas segundas espaciales.

Conviene aquí precisar lo que entendemos por una ecuación covariante relativista. Dada una función  $f(\vec{x}, t)$  y un operador diferencial  $\mathcal{D}_{\vec{x}, t}$  diremos que la ecuación

$$\mathcal{D}_{\vec{x}, t} f_s(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.5)$$

es covariante relativista si, dada una solución  $f_s(x, t)$  en cierto sistema de coordenadas de espacio-tiempo, cuando por ejemplo hacemos una rotación espacial o un boost (i.e., transformación del grupo de Lorentz propio) para pasar a otro sistema de coordenadas, la función transformada satisface la misma ecuación, expresada en términos de las nuevas coordenadas  $\vec{x}', t'$ .

$$\mathcal{D}_{\vec{x}', t'} f_s(\vec{x}', t') = 0 \quad (1.6)$$

Si a una solución  $\psi_s(\vec{x}, t)$  de la ecuación de Schrödinger (1.4) le asignamos el carácter de escalar (complejo) frente a transformaciones de Lorentz, un cálculo sencillo confirma que  $\psi_s(\vec{x}', t')$  no es solución de la correspondiente ecuación transformada.

El cuarto trabajo de la serie de artículos que Schrödinger publicó en 1926 [1] presenta una versión covariante relativista de la ecuación que rige la dinámica cuántica de una partícula masiva, ecuación que fue obtenida independientemente por Oskar Klein, Vladimir Fock y Walter Gordon en el mismo año, [2]-[4].

En su trabajo Schrödinger consideró el caso de un electrón de masa  $m$  sometido a la acción de un campo eléctrico coulombiano pero su idea puede presentarse de manera muy simple para el caso de una partícula libre.

La propuesta de Schrödinger es muy natural: para llegar a una ecuación relativista que describa la dinámica cuántica de una partícula libre, en lugar de partir de la fórmula de la mecánica clásica newtoniana (1.1), debe hacérselo a partir de la relación de energía-impulso de la mecánica clásica relativista,

$$c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4 = E^2 \quad (1.7)$$

La aplicación de las reglas de cuantificación canónica (1.3) a la ec.(1.7) lleva a una ecuación cuántica relativista, la ecuación de Klein-Gordon [2]-[4] para una partícula libre (i.e. sin potencial) de masa  $m$ ,

$$\hbar^2 \nabla^2 \psi(\vec{x}, t) - m^2 c^2 \psi(\vec{x}, t) = \frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \psi(\vec{x}, t)}{\partial t^2} \quad (1.8)$$

No es inesperado que, habiendo partido de la ecuación relativista (22.4), se llegue a una ecuación en la que el orden de las derivadas espaciales y temporal sea el mismo. Esto se hace más evidente si se introduce la notación

$$x^0 = ct \quad (1.9)$$

y se usa como convención para el tensor métrico la que adoptaremos en lo que sigue:

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

Con esto, dadas las componentes contravariantes de un tetravector, por ejemplo aquel cuyas componentes son las coordenadas espacio-temporales de un “suceso”,  $(x^\mu) = (ct, x, y, z) = (x^0, x, y, z)$ , las componentes covariantes se relacionan con ellas así:

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu \quad (1.11)$$

con lo que producto escalar entre dos tetravectores deviene

$$x^\mu x_\mu = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu = x^{0^2} - x^{1^2} - x^{2^2} - x^{3^2} \quad (1.12)$$

con  $(x^1, x^2, x^3) = \vec{x}$ , el vector posición.

Por construcción, las transformaciones de Lorentz son aquellas que dejan invariante al producto  $a^\mu b_\mu$  que es lo que por ello se conoce como un “escalar Lorentz”.

Al grupo de Lorentz se lo identifica como el grupo  $SO^+(1, 3)$  y puede representarse por matrices de  $4 \times 4$ . La letra “O” indica que se trata de un grupo ortogonal con signatura acorde con (1.12) y la letra “S” que tomamos sus elementos normalizados de manera que su

determinante sea +1. El supraíndice  $+$  indica que consideramos transformaciones ortocronas, es decir que preservan el sentido del tiempo (ver más adelante).

Con nuestras convenciones el operador d’alembertiano<sup>2</sup>  $\square$  se puede escribir de manera compacta así:

$$\square \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^{02}} - \nabla^2 = \partial_\mu \partial^\mu = g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \quad (1.13)$$

y la ecuación(1.8) deviene

$$\square \psi(\vec{x}, t) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.14)$$

Es evidente ahora que si el carácter de  $\psi$  ante transformaciones de Lorentz es el de un escalar, esta ecuación no solo es covariante sino también invariante relativista ya que tanto la función  $\psi$  como el operador  $\square$  lo son.

Es fácil encontrar una solución de la ecuación de Klein Gordon para la partícula libre. Basta hacer un “ansatz”<sup>3</sup> como el que se hace en el caso no-relativista, de la forma

$$\psi(\vec{x}, t) = A \exp \left( \frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{x} - E_p t) \right) \quad (1.15)$$

y ajustar las constantes  $\vec{p}$  y  $E_p$  (asociadas con el impulso y la energía de la partícula respectivamente) de manera que se satisfaga (1.8). En efecto, si se inserta el ansatz (22.10) en la ecuación (1.8), para que se satisfaga la ecuación debe satisfacerse la condición:

$$E_p = \pm c \sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2} \quad (1.16)$$

que coincide con la relación clásica relativista entre el impulso y la energía.

Recordemos que en la mecánica relativista clásica, al escribir (1.16) solo se retiene el signo positivo. Si bien ambos signos son aceptables,

---

<sup>2</sup>Este operador diferencial lleva el nombre de Jean Le Rond D’Alambert quien lo introdujo en 1747 en un trabajo sobre cuerdas vibrantes

<sup>3</sup>*Ansätze*: del alemán, propuesta.

de incluir a ambos se tendría un espectro de energía que no sería continuo: habría un “salto” entre el valor mínimo positivo  $E_{0+} = mc^2$  y el valor máximo negativo  $E_{0-} = -mc^2$ . Como en mecánica clásica no hay ninguna razón para aceptar discontinuidades en la energía, debe elegirse un signo y resulta natural, por tratarse del caso de una partícula libre, el seleccionar la rama positiva (Recordemos que en el caso no-relativista los niveles con energía negativa corresponden a estados ligados y aquí se trata de partículas libres).

Con lo anterior, el desarrollo para valores pequeños (en comparación con  $mc$ ) del impulso conduce, si no se tiene en cuenta la energía en reposo, a la conocida expresión clásica del Hamiltoniano no-relativista de una partícula de masa  $m$ ,

$$E_p \simeq (\vec{p})^2/(2m)$$

En contraste con las argumentación de la física clásica y de la cuántica no relativista para desechar el signo negativo de la energía de una partícula libre, notemos que las discontinuidades en los valores posibles de la energía son precisamente una de las características fundamentales de la mecánica cuántica, por lo que en este caso relativista no hay razón alguna para descartar una de las dos ramas, aún para el caso de una partícula libre.

Pero se plantea en este caso un problema serio: de no descartarse la solución con signo negativo la energía de la partícula libre no estaría acotada por abajo y se podría entonces extraer una cantidad arbitrariamente grande de energía tomando simplemente una partícula en reposo con energía  $+mc^2$  y perturbándola de manera de que saltara el “gap”<sup>4</sup> de  $2mc^2$  y cayera en un estado con más y más energía negativa. Volveremos a este asunto más adelante.

Ahora bien, utilizando la ecuación relativista propuesta por Schrödinger (y que hoy se conoce ecuación de Klein Gordon), se obtienen resultados razonables para las series de Balmer y Lyman del átomo de hidrógeno pero los resultados eran inaceptables para la constante de estructura fina  $\alpha$  determinada ya en esa época con bastante precisión por F. Paschen y E. Back en el estudio de la acción de un campo

---

<sup>4</sup>*gap*:del inglés, hueco, brecha.

magnético intenso sobre los niveles de energía del átomo de hidrógeno ( $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$ ).

Es importante aquí recordar que Schrödinger no ignoraba la existencia del spin del electrón, sugerido por G. Uhlenbeck y S. Goudsmit en 1925 para dar cuenta del desdoblamiento de niveles atómicos en un campo magnético externo (efecto Zeeman). Comprendía correctamente que las discrepancias que encontraba provenían de que su ecuación no tenía en cuenta el spin del electrón. De tenerlo, la función de onda asociada al electrón no debía tomarse como un escalar frente, en particular, a rotaciones, y la ecuación que rija su dinámica cuántica tendría que incluir interacciones que tengan en cuenta a este momento angular intrínseco.

Existía además un problema conceptual más básico que mostraba la invalidez de la ecuación de Klein-Gordon para describir la dinámica del electrón en el contexto de la física cuántica en la que  $|\psi|^2$  se interpreta como una densidad de probabilidad. Fue este problema, que tiene que ver con la imposibilidad de definir una densidad de probabilidad consistente a partir de la ecuación de Klein-Gordon, el que llevó a Paul Dirac a cambiar radicalmente el frente de ataque y proponer la ecuación que lleva su nombre y que sí daba cuenta de todos los resultados experimentales conocidos al momento (1928) sobre el átomo de hidrógeno.

Para comprender la contradicción entre la ecuación de Klein-Gordon y una densidad de probabilidad consistente, recordemos que en el caso no relativista descrito por la ecuación (1.4), a partir de la función de onda  $\psi(\vec{x}, t)$  se puede construir la densidad de probabilidad  $\rho$  y la corriente de probabilidad  $\vec{J}$ . La densidad  $\rho(\vec{x}, t)$  resulta ser una función real, semidefinida positiva y de carácter escalar que satisface, junto a  $\vec{J}(\vec{x}, t)$ , que tiene carácter vectorial, una ecuación de continuidad:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (1.17)$$

$$\rho = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (1.18)$$

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t) \right) \quad (1.19)$$

Esta ecuación confirma la interpretación de  $|\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$  como la probabilidad de encontrar, en el instante  $t$ , a la partícula en el diferencial de volumen  $d^3x$  centrado en el punto  $\vec{x}$ . Como siempre, de tal ecuación de continuidad se prueba fácilmente la conservación de una “carga”, en este caso probabilidad, siempre que el flujo de  $\vec{J}$  se anule adecuadamente en el infinito. Se obtiene:

$$\frac{d}{dt} \int \rho(\vec{x}, t) d^3x = 0 \quad (1.20)$$

o

$$\frac{dQ}{dt} = 0, \quad Q \equiv \int \rho(\vec{x}, t) d^3x \quad (1.21)$$

En el párrafo anterior el entrecomillado de la palabra “carga” se debe a lo siguiente. La definición de  $Q$  dada por (1.21) corresponde a la probabilidad de encontrar al sistema descrito por  $\psi$  en el volumen de integración. Pero vista a la luz del teorema de Noether,  $Q$  puede interpretarse como la carga conservada asociada a la invarianza de la ecuación de Schrödinger frente a un cambio de fase constante  $\alpha$  de la forma

$$\psi(x, t) \rightarrow \exp(i\alpha)\psi(x, t) \quad (1.22)$$

Es decir, existe en la mecánica cuántica una invarianza global  $U(1)$  (el grupo unitario  $U(N)$  representado por matrices es el grupo de las matrices unitarias de  $N \times N$  -i.e.  $U^\dagger U = U U^\dagger = I$ . El caso  $N = 1$  puede identificarse con el de los números complejos de módulo 1. que es el caso de la transformación (1.22). Cuando se trata de una partícula cargada eléctricamente en interacción con el campo electromagnético, esta invarianza pasa a ser una invarianza local (es decir,  $\alpha = \alpha(x, t)$ ) donde un cambio con fase  $\alpha(x)$  en la función de onda va acompañado de un cambio de gauge en el campo electromagnético.

Planteada la ecuación de conservación (1.21), la interpretación de  $\rho$ , definida positiva, como densidad de probabilidad se vuelve natural. A ello se agrega que la probabilidad de encontrar a la partícula en algún lugar de todo el espacio resulta constante en el tiempo -conservada- (e igual a 1 con una adecuada normalización de la función de onda).

Para obtener tal ecuación de continuidad se multiplica la ecuación de Schrödinger por  $\psi^*(\vec{x}, t)$  y se resta el resultado de multiplicar la



ecuación conjugada por  $\psi(\vec{x}, t)$ . Si procedemos de la misma manera con la ecuación de Klein-Gordon (22.8), obtenemos

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_R + \frac{\partial \rho_R}{\partial t} = 0 \quad (1.23)$$

donde  $\vec{J}_R$  (con  $R$  indicamos que se trata del caso relativista) tiene la misma forma que en el caso no relativista mientras que la densidad de carga  $\rho_R$  cambia radicalmente:

$$\rho_R = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} - \psi(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi^*(\vec{x}, t)}{\partial t} \right) \quad (1.24)$$

$$\vec{J}_R = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{x}, t) \right) \quad (1.25)$$

Haber forzado la covarianza implica que  $\rho_R$  tenga una forma funcional análoga a las componentes de  $\vec{J}_R$  con  $t$  jugando un rol idéntico al de las coordenadas.

Es evidente que  $\rho_R$  es una función escalar real pero, a diferencia de  $\rho = |\psi(\vec{x}, t)|^2$ , puede ser negativa y por ello se pierde la posibilidad de asociarla con una densidad de probabilidad. Esto es consecuencia de que siendo la ecuación de Klein-Gordon de segundo orden en el tiempo, es en principio necesario dar dos condiciones iniciales (para  $\psi(\vec{x}, t)$  y para  $\partial\psi(\vec{x}, t)/\partial t$ ) para determinarla y no queda excluida la posibilidad de elegir la función y su derivada de manera que  $\rho_R < 0$ . De hecho, dada una elección de  $\psi(\vec{x}, t)$  y  $\partial\psi(\vec{x}, t)/\partial t$  en el instante inicial que haga a  $\rho_R$  positiva, la elección igualmente aceptable de  $\psi(\vec{x}, t)$  y  $-\partial\psi(\vec{x}, t)/\partial t$  como condición inicial hará que  $\rho_R < 0$ .

Otra manera de ver el problema señalado arriba es la siguiente: si se considera un estado estacionario, puede reemplazarse en (1.24)  $i\hbar\partial\psi(\vec{x}, t)/\partial t$  por  $E\psi(\vec{x}, t)$ , obteniéndose

$$\rho_R = \frac{E}{mc^2} |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (1.26)$$

y las soluciones con energía negativa (rama negativa de la raíz (1.16)) corresponderán, evidentemente a  $\rho_R < 0$ . De esta última fórmula vemos que, en el límite no relativista, cuando  $E \rightarrow mc^2$ ,  $\rho_R$  deviene la densidad de probabilidad no-relativista habitual,

$$\rho_R \rightarrow |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \rho \quad (1.27)$$

## Más sobre transformaciones de Lorentz

Como vimos, las transformaciones de Lorentz son aquellas transformaciones ortogonales de coordenadas que dejan invariante la “longitud”  $s$  del tetravector  $(x^\mu) = (ct, x, y, z)$  definida como

$$s^2 = c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2 = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu = x^\mu x_\mu \quad (1.28)$$

donde para el tensor métrico  $g_{\mu\nu}$  elegimos la signatura minkowskiana siguiente

$$(g_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

Esta elección corresponde a la conocida como la de la “convención de la costa oeste” (California) mientras que la  $(-, +, +, +)$  es la convención llamada “de la costa este” (New York) que, por supuesto, es igualmente válida.

Llamemos  $\Omega$  al conjunto de los elementos del grupo de transformaciones de Lorentz  $a_\mu^\nu \in \Omega$  tal que las coordenadas  $x^\mu$  transforman acordes con:

$$x'_\mu = a_\mu^\nu x_\nu \quad (1.30)$$

Estas transformaciones incluyen:

Inversiones espaciales

$$a_\mu^\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

Inversiones temporales

$$a_\mu^\nu = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.32)$$

Rotaciones, por ejemplo de un ángulo  $\varphi$  alrededor del eje  $z$

$$a_{\mu}^{\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

Transformaciones propias de Lorentz “boosts” temporales, que afectan a una de las coordenadas y al tiempo, por ejemplo para el caso en que la velocidad relativa entre los dos sistemas es  $(0, 0, V_z)$

$$a_{\mu}^{\nu} = \begin{pmatrix} \cos \chi & 0 & 0 & \sin \chi \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sin \chi & 0 & 0 & \cos \chi \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

con  $\chi = iV_z/c$ , donde  $V_z$  es la velocidad relativa de los sistemas y  $c$  la velocidad de la luz)<sup>5</sup>.

Consideremos un sistema invariante relativista que obedece la ecuación covariante de Klein-Gordon. Si pretendemos que el módulo cuadrado de la función de onda, ligado a una cantidad medible, no cambie frente a este grupo de transformaciones, la función de onda deberá permanecer invariante a menos de una posible fase:

$$\psi(\vec{x}, t) \xrightarrow{\Omega} \psi'(\vec{x}', t') = \exp(i\alpha) \psi(\vec{x}, t) \quad (1.35)$$

Supongamos que  $\alpha$  representa una inversión espacial. Entonces, si se consideran dos inversiones espaciales, se tendrá que  $\exp(2i\alpha) = 1$  y por lo tanto  $\alpha = 0, \pi$ . Luego, ante una inversión espacial

$$\psi'(-\vec{x}, t) = \pm \psi(\vec{x}, t) \quad (1.36)$$

Es decir que  $\psi(\vec{x}, t)$  puede ser un escalar (signo  $+$ ) o pseudoescalar (signo  $-$ ). En cuanto a rotaciones, que son continuas, debemos incluir, por continuidad, a la identidad. Al hacer una rotación de  $2\pi$  si  $\alpha$  no se mantuviera constante tendríamos una inconsistencia (lo mismo sucede para boosts, que pueden considerarse como rotaciones hiperbólicas).

---

<sup>5</sup>Notemos que si  $\chi$  es un número imaginario, senos y cosenos devienen senos y cosenos hiperbólicos.

Luego  $\psi(\vec{x}, t)$  es un escalar o pseudoescalar frente a reflexiones espaciales y un escalar frente a transformaciones propias de Lorentz y rotaciones. Tal función de onda sólo puede describir partículas que no tengan otros grados de libertad que los asociados con el espacio-tiempo. Es decir, la ecuación de Klein-Gordon describe partículas de spin 0. Fueron Pauli y Weisskopf [5] quienes justamente propusieron utilizar la ecuación de Klein-Gordon para describir la dinámica cuántica de bosones.

## La ecuación de Dirac

P.A.M. Dirac (1902-1984) logró resolver en 1928 el problema de cómo compatibilizar la necesaria covarianza relativista de una ecuación de ondas, con la necesidad de tener una densidad de probabilidad definida positiva asociada con la función de onda cuántica que describe el estado de un electrón<sup>6</sup>.

Dirac hizo hincapié que el hecho de que la densidad de probabilidad no tuviera signo definido provenía de que la derivada temporal en la ecuación de Klein-Gordon era de segundo orden (y no de primero como en la ecuación no relativista). Cambió entonces radicalmente el punto de partida de Schrödinger para la obtención de una ecuación de ondas relativista que describiera correctamente la dinámica cuántica de partículas de spin 1/2 como el electrón. Publicó un trabajo con su propuesta [6] y desde entonces la ecuación básica de la mecánica cuántica relativista para el electrón ha tomado su nombre.

Quedó claro en el análisis previo que la ecuación de Klein-Gordon conduce a una densidad de probabilidad negativa por tratarse de una ecuación de segundo orden en el tiempo. Esto último, a su turno, es obligado por requerimientos de la covarianza relativista: las derivadas espaciales que resultan de la cuantificación canónica de la energía cinética

---

<sup>6</sup>Según G. Gamow, Dirac entrevió la solución una noche del invierno de 1928, mientras meditaba sentado frente al fuego en el St. John College de Cambridge. Cuenta Dirac que en esa noche jugaba con matrices de  $2 \times 2$  con propiedades muy notables que había inventado y que no son otra cosa que las que llamamos matrices de Pauli. En ese relato comenta que él ignoraba que Pauli había encontrado esas matrices y que suponía que Pauli igualmente ignoraba que él también las había inventado.

son de segundo orden.

Dando un corte drástico a la contradicción, Dirac propuso una ecuación de primer orden tanto en las variables espaciales como en las temporales. En cierto modo, en lugar de aplicar las reglas de cuantificación canónica a la relación entre el cuadrado de la energía y el impulso,

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (1.37)$$

Dirac lo hizo con la idea de que relativísticamente la energía se relaciona con la masa y el impulso a través de una raíz cuadrada,

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (1.38)$$

Pero como no era razonable abandonar la linealidad de la ecuación de ondas escribiendo para la ecuación de ondas una en que  $\psi$  apareciera dentro de raíces cuadradas, lo que violaría el principio de superposición), Dirac no planteó una ecuación con raíces cuadradas sino que propuso una que, “elevada al cuadrado”, reprodujera (1.37) de manera que en el límite  $c \rightarrow \infty$  se recupera el resultado no relativista  $E = p^2/(2m)$  (El sentido de de escribir “elevar al cuadrado” una ecuación diferencial quedará aclarado más adelante).

En este punto recordemos que cuando en la mecánica cuántica no relativista se pretende describir al electrón incluido su spin, debe considerarse una función de onda que no es un escalar sino que tiene 2 componentes (más precisamente se trata de un espinor de dos componentes  $\psi$  que suele llamarse espinor de Pauli),

$$\psi(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{x}, t) \\ \psi_-(\vec{x}, t) \end{pmatrix}$$

Por ejemplo, consideremos el caso de un electrón en presencia de un campo eléctrico

$$\vec{E} = -e \frac{\vec{r} d\phi}{r dr}$$

con  $\phi$  el potencial escalar. Vimos en el primer curso de mecánica cuántica que el hamiltoniano del electrón, tratado como un espinor de 2 componentes toma en este caso la forma

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{p}^2/2m + e\phi(r) & 0 \\ 0 & \hat{p}^2/2m + e\phi(r) \end{pmatrix} + w(r) \vec{\sigma} \cdot \vec{L} \quad (1.39)$$

con

$$w(r) = -\frac{e^2\hbar}{4m^2c^2} \frac{d\phi}{rdr} \quad (1.40)$$

donde  $\vec{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$  son las matrices de Pauli, de  $2 \times 2$ .

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.41)$$

Para mayor generalidad que la de los espinores de Pauli, Dirac consideró a la función de onda como un objeto no de 2 sino de  $N$  componentes, esperando que ciertas propiedades básicas a exigir a la teoría fijaran  $N$  y el carácter espinorial de  $\psi$ . Escribió entonces

$$\psi(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi^1(\vec{x}, t) \\ \psi^2(\vec{x}, t) \\ \vdots \\ \psi^N(\vec{x}, t) \end{pmatrix} = (\psi^\alpha), \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (1.42)$$

La ecuación diferencial lineal de primer orden con coeficientes constantes<sup>7</sup> más general que puede escribirse para el caso de un electrón libre en un espacio-tiempo de  $3 + 1$  dimensiones es entonces:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi^\alpha}{\partial t} + \alpha_{\alpha\beta}^i \frac{\partial \psi^\beta}{\partial x^i} + \frac{imc}{\hbar} \beta_{\alpha\beta} \psi^\beta = 0 \quad (1.43)$$

Se sobreentiende que los índices ( $i = 1, 2, 3$ ;  $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N$ ) cuando aparecen repetidos están sumados. Las constantes  $c$  (velocidad de la luz),  $m$  (masa de la partícula) y  $\hbar$  (constante de Planck) aparecen por conveniencia posterior.

La arbitrariedad de los coeficientes está dada por constantes  $\alpha_{\rho\sigma}^i$  y  $\beta_{\rho\sigma}$  que pueden considerarse 4 matrices de  $N \times N$  a determinar por razones físicas.

La ecuación (1.43) puede reescribirse de manera más compacta en la forma

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi^\alpha}{\partial t} + \vec{\alpha}_{\alpha\beta} \cdot \vec{\nabla} \psi^\beta + \frac{imc}{\hbar} \beta_{\alpha\beta} \psi^\beta = 0 \quad (1.44)$$

---

<sup>7</sup>Es la homogeneidad del espacio-tiempo la que implica que sean constantes.

o, con notación matricial,

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \psi + \frac{imc}{\hbar} \beta \psi = 0 \quad (1.45)$$

Nótese que las componentes  $\alpha^i$  de  $\vec{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$  son cada una una matriz de  $N \times N$ . En este caso poner los índices arriba o abajo es solamente una cuestión de etética pues se trata de índices “espinoriales”.

En camino de obtener una ecuación de continuidad, analicemos el resultado de conjugar la ecuación (1.45) (Utilizaremos la notación  $f^*$  para indicar el conjugado de una función  $f$ ). Para el caso de espinores, conviene introducir la notación

$$\psi^\dagger \equiv \psi^{*T} = (\psi^{1*}, \psi^{2*}, \dots, \psi^{N*}) \quad (1.46)$$

que implica conjugar y trasponer al espinor definido en la ec. (1.42).

La ecuación que resulta de conjugar y trasponer (1.45) puede entonces ser escrita así:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} + (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \cdot \vec{\alpha}^\dagger - \frac{imc}{\hbar} \psi^\dagger \beta^\dagger = 0 \quad (1.47)$$

Aquí  $\alpha^{i\dagger}$  es la traspuesta conjugada de la matriz  $\alpha^i$ .

Multiplicando (1.45) a izquierda por  $\psi^\dagger$ , (1.47) a derecha por  $\psi$  y luego sumando ambos resultados se obtiene

$$\frac{1}{c} \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \left( \psi^\dagger \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \psi + (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \cdot \vec{\alpha}^\dagger \psi \right) + \frac{imc}{\hbar} \psi^\dagger (\beta - \beta^\dagger) \psi = 0 \quad (1.48)$$

donde hemos introducido a la función real  $|\psi|^2$ , semidefinida positiva, de la manera siguiente

$$|\psi|^2 = \psi^\dagger(x, t) \psi(x, t) \quad (1.49)$$

Basta pedir que las matrices  $\alpha^i$  y  $\beta$  sean hermíticas para que la ecuación (1.48) se simplifique considerablemente y tenga las características de una típica ecuación de continuidad. En efecto, si

$$\alpha^i = \alpha^{i\dagger}, \quad \beta = \beta^\dagger \quad (1.50)$$

la ecuación (1.48) toma la forma simple

$$\frac{1}{c} \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) = 0 \quad (1.51)$$

Entonces, si se define

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (1.52)$$

y

$$\vec{J}(\vec{x}, t) = \psi^\dagger(\vec{x}, t) c \vec{\alpha} \psi(\vec{x}, t) \quad (1.53)$$

se puede escribir a (1.51) como una ecuación de continuidad e interpretar a  $\rho$  como una densidad de probabilidad semidefinida positiva,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (1.54)$$

¡El problema de la ecuación de Klein-Gordon no existe entonces para la ecuación de Dirac! Nótese que la definición de  $\rho$  es análoga a la que resulta en el caso no-relativista para espinores de dos componentes. En contraste, la de  $\vec{J}$  es completamente nueva (volveremos a ella más adelante cuando estemos en condiciones de ligarla con la “velocidad” de la partícula cuya función de onda es el espinor  $\psi$ ).

Hay una manera sugestiva de reescribir la ecuación de Dirac (1.45)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( c \vec{\alpha} \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \beta mc^2 \right) \psi \equiv \hat{H} \psi \quad (1.55)$$

que nos permite identificar al operador  $\hat{p}$  con  $(i/\hbar) \vec{\nabla}$ , la misma expresión que la de la cuantificación canónica no-relativística. En cuanto al operador  $\hat{H}$ ,

$$\hat{H} = c \vec{\alpha} \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \beta mc^2 \quad (1.56)$$

podemos identificarlo como el generador de traslaciones temporales infinitesimales, es decir con el Hamiltoniano del sistema que pretendemos describir (el de una partícula libre de masa  $m$ ).

Es importante notar que la hermiticidad de las 4 matrices  $\vec{\alpha}$  y  $\beta$  garantiza que  $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ .



Para verificar que la ecuación de Dirac es consistente con la relación entre energía e impulso que debe satisfacer un sistema relativista, apliquemos el operador

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - \frac{imc}{\hbar} \beta \quad (1.57)$$

a la ecuación (1.45) (Nótese el cambio de signo en los dos últimos términos respecto del operador que aparece en (1.47). La idea está inspirada en la acción de multiplicar por  $(a - b)$  a la cantidad  $(a + b)$  para obtener una diferencia de cuadrados). Obtenemos

$$\begin{aligned} & \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - \frac{imc}{\hbar} \beta \right) \left( \frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \psi + \frac{imc}{\hbar} \beta \psi \right) = \\ & \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \alpha^k \alpha^l \frac{\partial^2}{\partial x^k \partial x^l} \psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \beta^2 \psi - \frac{imc}{\hbar} (\alpha^k \beta + \beta \alpha^k) \frac{\partial \psi}{\partial x^k} = 0 \end{aligned} \quad (1.58)$$

Dada la simetría de las derivadas del segundo término de la segunda línea se puede escribir

$$\alpha^k \alpha^l \frac{\partial^2}{\partial x^k \partial x^l} = \frac{1}{2} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) \frac{\partial^2}{\partial x^k \partial x^l} \quad (1.59)$$

Basta entonces pedir que

$$\frac{1}{2} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) = \delta^{kl} \quad (1.60)$$

para que el término de derivadas espaciales de la segunda línea de (1.58) corresponda al Laplaciano que aparece en la ecuación de Klein-Gordon como parte del d'alambertiano. Si adoptamos esta condición y además imponemos

$$\alpha^k \beta + \beta \alpha^k = 0 \quad (1.61)$$

$$\beta^2 = I \quad (1.62)$$

la segunda línea de (1.58) deviene la ecuación de Klein-Gordon (1.8) y por ello se verifica que toda solución de la ecuación de Dirac satisface también la ecuación de Klein-Gordon,

$$\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \psi(\vec{x}, t)}{\partial t^2} - \hbar^2 \nabla^2 \psi(\vec{x}, t) + m^2 c^2 \psi(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.63)$$

y por lo tanto es consistente con la relación energía impulso relativista que vimos era verificada por esta última.

La derivación anterior aclara el sentido que tenía la frase que en la página 7 se refería a “elevar al cuadrado” una ecuación.

Las condiciones que ya hemos impuesto a las matrices  $\vec{\alpha}$  y  $\beta$  implican varias propiedades. En particular, si reescribimos la ecuación (1.61) en la forma

$$\beta\alpha^k = -\alpha^k\beta, \quad (1.64)$$

calculamos el determinante,

$$\det \beta\alpha^k = \det (-\alpha^k\beta) = (-1)^N \det (\alpha^k\beta) \quad (1.65)$$

y usamos la propiedad cíclica  $\det AB = \det BA$  llegamos a que

$$(-1)^N = 1 \Rightarrow N \equiv \text{par} \quad (1.66)$$

Si se multiplica a derecha (1.64) por  $\beta$  y luego se usa (1.62), se obtiene

$$\beta\alpha^k\beta = -\alpha^k \quad (1.67)$$

Si ahora calculamos la traza de ambos miembros,

$$\text{tr}\beta\alpha^k\beta = -\text{tr}\alpha^k \quad (1.68)$$

$$\text{tr}\beta\alpha^k\beta = \text{tr}\beta^2\alpha^k = \text{tr}\alpha^k = -\text{tr}\alpha^k \quad (1.69)$$

La propiedad cíclica de la traza implica que el lado izquierdo de la igualdad de (1.67) es  $+\alpha^k$  mientras que el lado derecho tiene el signo opuesto por lo que o

$$\text{tr}\alpha^k = 0 \quad (1.70)$$

Analogamente se obtiene que

$$\text{tr}\beta = 0 \quad (1.71)$$

Podemos ahora escribir la ecuación de Dirac (1.45) de una manera explícitamente covariante. Para ello introduzcamos la notación

$$\gamma^0 = \beta \quad (1.72)$$

$$\gamma^i = \beta\alpha^i \quad (1.73)$$

o

$$\gamma^\mu = (\beta, \gamma^i) \quad (1.74)$$

Puede verse fácilmente que

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I_{N \times N} \quad (1.75)$$

con la métrica  $g^{\mu\nu}$  definida a partir de la identidad  $g^{\mu\nu} g_{\nu\alpha} = \delta_\alpha^\mu$  con  $g_{\nu\alpha}$  dada por la fórmula (1.29).

Si multiplicamos la ecuación de Dirac (1.45) por  $i\hbar\beta$  y usamos la nueva notación tendremos

$$i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial\psi(\vec{x}, t)}{\partial x^\mu} - mc\psi(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.76)$$

Esta es la manera compacta de escribir, de manera explícitamente covariante, la ecuación matricial que describe la dinámica relativista de una partícula libre de masa  $m$ .

Resta confirmar la covarianza y determinar explícitamente las cuatro matrices  $\gamma^\mu$  (llamadas matrices de Dirac). En particular, su orden (por ahora  $N \times N$  es arbitrario) o, lo que es lo mismo, cuál es el número  $N$  de componentes de  $\psi(\vec{x}, t)$ . Luego, deberemos analizar las propiedades de  $\psi(\vec{x}, t)$  ante transformaciones de Lorentz, determinar el spin de la partícula que describe y buscar las soluciones.



Fotografía de la placa de pizarra verde colocada en la abadía de Westminster, a pocos metros de la tumba de Isaac Newton, en la que fue grabada la ecuación de la mecánica cuántica relativista de una partícula libre de masa  $m$  para el caso en que las unidades son aquellas en las que resulta  $c=1$ .

# Clase 2

## La ecuación de continuidad

La ecuación de Dirac para una partícula relativista de masa  $m$  se escribe de manera explícitamente covariante (eq.(1.76)) como

$$i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial x^\mu} - mc\psi(\vec{x},t) = 0 \quad (2.1)$$

donde las matrices  $\gamma^\mu$  son cuatro matrices de  $N \times N$  que, de acuerdo a su definición en términos de las matrices  $\vec{\alpha}$  y  $\beta$  (ecs.(1.72)-(1.73)) y de las propiedades de estas últimas que fue necesario imponer satisfacen

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2g_{\mu\nu}I_{N \times N} \quad (2.2)$$

$$\text{tr } \gamma_\mu = 0 \quad (2.3)$$

En términos de estas matrices (llamadas de Dirac), la ecuación de continuidad (1.54) que obtuvimos a partir de la ecuación (2.1) puede escribirse de manera explícitamente covariante frente a transformaciones de Lorentz. En efecto, definiendo

$$J^0(\vec{x},t) = c\rho(\vec{x},t) = c\psi(\vec{x},t)^\dagger\psi(\vec{x},t) = c\psi(\vec{x},t)^\dagger\gamma^0\gamma^0\psi(\vec{x},t) \quad (2.4)$$

$$\vec{J} = c\psi(\vec{x},t)^\dagger\vec{\alpha}\psi(\vec{x},t) = c\psi(\vec{x},t)^\dagger\gamma^0\vec{\gamma}\psi(\vec{x},t) \quad (2.5)$$

podemos escribir

$$J^\mu = c\psi(\vec{x},t)^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\psi(\vec{x},t) \quad (2.6)$$

donde hemos usado la ecuación (2.2) para escribir las igualdades (2.5).

Si en este punto se introduce la importante definición

$$\bar{\psi}(\vec{x},t) \equiv \psi(\vec{x},t)^\dagger\gamma^0 \quad (2.7)$$

la corriente puede ser escrita de manera compacta como

$$J^\mu = c\bar{\psi}(\vec{x}, t)\gamma^\mu\psi(\vec{x}, t) \quad (2.8)$$

y la ecuación de continuidad deviene

$$\frac{\partial J^\mu}{\partial x^\mu} = \partial_\mu J^\mu = 0 \quad (2.9)$$

Veremos que  $\bar{\psi}(\vec{x}, t)$  jugará un papel más importante que  $\psi(\vec{x}, t)^\dagger$  en el análisis de la mecánica cuántica relativista. Más aun, en el marco de la cuantificación de las teorías de campos vía el método de la integral funcional<sup>8</sup> reaparecerá en un pie de igualdad con  $\psi$  como una función independiente de  $\psi$ .

Conviene por lo anterior determinar qué ecuación satisface  $\bar{\psi}(\vec{x}, t)$ . Para ello conjugamos y trasponemos la ecuación (2.1). Luego la multiplicamos por  $\gamma^0$  a derecha y usamos que

$$\gamma^0\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0 = \gamma^\mu \quad (2.10)$$

para obtener

$$i\hbar\partial_\mu\bar{\psi}(\vec{x}, t)\gamma^\mu + mc\bar{\psi}(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.11)$$

Recordemos que la ecuación de Dirac para  $\psi$ , eq. (2.1) tiene la forma

$$i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial\psi(\vec{x}, t)}{\partial x^\mu} - mc\psi(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.1)$$

Notemos que estas ecuaciones difieren solo en el signo relativo. De hecho, tomando a  $\psi$  y  $\bar{\psi}$  como variables independientes, las ecuaciones pueden ser obtenidas a partir de la acción

$$S = \int d^4x L_{Dirac} \quad (2.12)$$

con el Lagrangiano de Dirac dado por

$$L_{Dirac} = \bar{\psi}(\vec{x}, t) (i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc) \psi(\vec{x}, t) \quad (2.13)$$

---

<sup>8</sup>El método de la integración funcional, desarrollado por R. Feynmann a partir de una idea de Dirac provee una manera alternativa a la cuantificación de las teorías de campos

Notese que el diferencial en la integral que define a la acción (2.12) implica la integración sobre el tiempo. Recordando la definición del Lagrangiano en la formulación de la mecánica clásica deberíamos llamar a  $L_{Dirac}$  *densidad* Lagrangiana.

La ecuación para  $\psi$  resulta de las ecuaciones de Euler-Lagrange que resultan de variar respecto a  $\bar{\psi}$

$$\partial_\mu \left( \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu \bar{\psi})} \right) = \frac{\partial L}{\partial \bar{\psi}} \quad (2.14)$$

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \bar{\psi}} = i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial x^\mu} - mc\psi(\vec{x}, t) = L_{Dirac} \quad (2.15)$$

(la derivada respecto de  $\partial_\mu \bar{\psi}$  del lado izquierdo de esta ecuación se anula porque en el Lagrangiano no aparecen derivadas de  $\bar{\psi}$ ).

Para obtener la ecuación que obedece  $\bar{\psi}$  conviene integrar por partes la acción (2.12) y luego se procede de manera análoga al caso de  $\psi$ .

Finalmente, hay otra manera de escribir el Lagrangiano de Dirac, por ejemplo, poniendo un factor 1/2 a la suma de dos términos, uno en el que es  $\psi$  quien aparece derivada, el otro en el que es  $\bar{\psi}$  quien aparece derivada.

## Los valores posibles de N

Dirac introdujo cuatro matrices de  $N \times N$ ,  $\gamma^\mu$ , independientes. Estudiando más en detalle sus propiedades es posible determinar los valores de  $N$  y la forma explícita de cada una de las cuatro matrices.

A partir de la ecuación (2.2),

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2g_{\mu\nu} I_{N \times N}$$

y la convención adoptada para la métrica  $g_{\mu\nu}$  ( $\text{diag } g_{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1)$ ) se tiene que

$$(\gamma^0)^2 = (i\gamma^1)^2 = (i\gamma^2)^2 = (i\gamma^3)^2 = I \quad (2.16)$$

También se puede formar 6 productos tomando de a 2 matrices diferentes

$$\gamma^0 \gamma^1 \quad \gamma^0 \gamma^2 \quad \gamma^0 \gamma^3 \quad i\gamma^1 \gamma^2 \quad i\gamma^1 \gamma^3 \quad i\gamma^2 \gamma^3 \quad (2.17)$$

En cuanto a los 4 productos posibles de tres, se tiene

$$i\gamma^0\gamma^1\gamma^2 \quad i\gamma^0\gamma^1\gamma^3 \quad i\gamma^0\gamma^2\gamma^3 \quad \gamma^1\gamma^2\gamma^3 \quad (2.18)$$

Finalmente, existe un único producto de a cuatro que juega un rol muy importantes en la mecánica cuántica relativista por lo que se le asigna un símbolo específico,  $\gamma_5$

$$i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \equiv \gamma_5 \quad (2.19)$$

asociado a una simetría muy importante que discutiremos más en detalle luego y que se denomina “quiralidad” (del griego  $\chi\epsilon\iota\rho$ , (kheir), mano).

No hay más productos distintos a los ya listados: si se tratara de armar un producto de 5 matrices habría que repetir alguna en ese producto. usando la anticonmutación de las matrices de Dirac distintas entre sí se puede ubicar de manera contiguas a las dos que son iguales usando esta propiedad. Y siendo que el producto de dos iguales es proporcional a la identidad el producto de 5 se reduce a uno de 3 ya incluido en la lista de las ecs. (2.16)-(2.19).

Las 11 matrices (2.17)-(2.19) junto con las 4 matrices  $\gamma^\mu$  y la identidad  $I$  forman un conjunto de 16 matrices que llamaremos  $\Gamma^l$ , con  $l = 1, 2, \dots, 16$ . A las 4 primeras las escribiremos temporariamente como

$$\Gamma_1 = \gamma^0, \quad \Gamma_2 = i\gamma^1, \quad \Gamma_3 = i\gamma^2, \quad \Gamma_4 = i\gamma^3 \quad (2.20)$$

de manera que su cuadrado sea igual a la identidad. Las 12 siguientes son las que hemos listado en las ecuaciones (2.17)-(2.19) y también cumplen con esta propiedad.

Se puede verificar fácilmente que las matrices  $\Gamma_l$  así definidas satisfacen

1.  $\Gamma_l \Gamma_n = a_{ln} \Gamma_m, \quad a_{ln} = \pm 1, \pm i$
2.  $\Gamma_l \Gamma_n = 1 \iff l = n$
3.  $\Gamma_l \Gamma_n = \pm \Gamma_n \Gamma_l$
4. Si  $\Gamma_n \neq I$  siempre existe  $\Gamma_l$  tal que  $\Gamma_l \Gamma_n \Gamma_l = -\Gamma_n$

$$5. \operatorname{tr} \Gamma_l = 0, \quad \Gamma_l \neq I$$

$$6. \sum_{k=1}^{16} a_k \Gamma_k = 0 \iff a_k = 0 \forall k$$

Como ejemplo, probaremos las dos últimas propiedades:

$$5. \operatorname{tr} \Gamma_l = 0, \quad \Gamma_l \neq I$$

Por la propiedad 4

$$\text{Si } \Gamma_n \neq I \text{ [siempre existe } \Gamma_l \text{ tal que } \Gamma_l \Gamma_n \Gamma_l = -\Gamma_n$$

se tiene, tomando traza,

$$\operatorname{tr} \Gamma_l = -\operatorname{tr} \Gamma_k \Gamma_l \Gamma_k$$

o, usando la propiedad cíclica de la traza

$$\operatorname{tr} \Gamma_l = -\operatorname{tr} \Gamma_k \Gamma_k \Gamma_l$$

Pero por la propiedad 2,  $\Gamma_k \Gamma_k = 1$ , se tiene que

$$\operatorname{tr} \Gamma_l = -\operatorname{tr} \Gamma_l \implies \operatorname{tr} \Gamma_l = 0$$

La propiedad 6 establece que

$$\sum_{k=1}^{16} a_k \Gamma_k = 0 \iff a_k = 0 \forall k$$

Separemos uno cualquiera de los términos de la suma del resto:

$$a_m \Gamma_m + \sum_{k \neq m} a_k \Gamma_k = 0$$

Multipliquemos a derecha por  $\Gamma_m$  y usemos el hecho de que el cuadrado de las  $\Gamma$ 's es la identidad,

$$a_m I + \sum_{k \neq m} a_m \Gamma_k \Gamma_m = 0$$



Ahora escribamos, usando la propiedad 1,

$$\Gamma_l \Gamma_n = a_{ln} \Gamma_m, \quad a_{ln} = \pm 1, \pm i$$

se tiene

$$a_m I + \sum_{k \neq m} a_m a_{km} \Gamma_p = 0$$

para algún  $p$  (nótese que  $\Gamma_p \neq I$  para  $m \neq k$ .)

Ahora tomamos la traza de esta igualdad

$$\text{Tr}(a_m I + \sum_{k \neq m} a_m a_{km} \Gamma_p) = 0$$

y usamos la propiedad 5,  $\text{tr} \Gamma_l = 0$ ,  $\Gamma_l \neq I$  con lo que mostramos

$$a_m N = 0 \implies a_m = 0 \forall m$$

Este último resultado es muy importante. Por construcción, las 16 matrices  $\Gamma_l$  son independientes y por ello propiedad 6 muestra que de son linealmente independientes. El número mínimo de filas y de columnas que deben tener 16 matrices cuadradas para ser linealmente independientes es 4. Luego, se puede tomar a las matrices  $\Gamma_l$  y, a fortiori, a las matrices  $\gamma^\mu$  como matrices de  $4 \times 4$ . Esta es una representación irreducible. Por supuesto, se podría tomar un orden mayor. En tal caso, puede demostrarse que esta última es una representación reducible a una matriz diagonal por bloques de la forma

$$\Gamma^\mu = \begin{pmatrix} \gamma^\mu & & & 0 \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ 0 & & & \gamma^\mu \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

donde las  $\gamma^\mu$  son las matrices en la representación mínima de  $4 \times 4$ .

Debe señalarse que el hecho de que las dimensiones del espacio-tiempo son 4 determina que las matrices de Dirac sean 4 pero esto no está ligado unívocamente con que sean elegidas como matrices de  $4 \times 4$ . En un espacio-tiempo de 3 dimensiones, por ejemplo, la dimensión mínima posible para las 3 matrices  $\gamma^\mu$  existentes es 2 pero también es posible representarlas como 3 matrices de  $4 \times 4$  con 2 bloques de  $2 \times 2$  en la diagonal.

## Teorema fundamental de Pauli

Dados dos conjuntos de matrices de Dirac ,  $\{\gamma^\mu\}$  y  $\{\bar{\gamma}^\mu\}$ , existe siempre una matriz no-singular  $S$  que los conecta por una relación de similitud:

$$\bar{\gamma}^\mu = S^{-1}\gamma^\mu S \quad (2.22)$$

No daremos la prueba, que es simple pero trabajosa. Está basada en escribir a  $S$  en términos de las 16  $\Gamma_i$  y  $\bar{\Gamma}_i$  a su vez construidas a partir de las  $\gamma^\mu$  y  $\bar{\gamma}^\mu$ ,

$$S = \sum \bar{\Gamma}_i F \Gamma_i \quad (2.23)$$

y determinar  $F$  que lleva a que valga (2.22):  $\bar{\gamma}^\mu = S^{-1}\gamma^\mu S$ .

Este teorema implica que no existe un único conjunto de 4 matrices de Dirac que satisfagan las condiciones necesarias que hemos ido determinando sino que, una vez encontrado explícitamente un conjunto podremos obtener vía una transformación de similitud  $S$  adecuada, conjuntos equivalentes que podrán ser más o menos convenientes según el problema a tratar.

### Una forma explícita útil de las matrices de Dirac

Muchas veces es útil que  $\gamma^0$ , ligada a la coordenada temporal y que aparece en el término de masa del hamiltoniano (1.55) (recordemos que  $\beta = \gamma^0$ )

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( c\vec{\alpha} \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \beta mc^2 \right) \psi \equiv \hat{H} \psi \quad (2.24)$$

sea diagonal. Como además se debe tener  $(\gamma^0)^2 = I$  y  $\text{tr}\gamma^0 = 0$ , es natural proponer la forma más simple:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -I_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

En cuanto a las  $\gamma^i$ , es facil ver que una elección consistente con (2.25) y con todos los requerimientos de las matrices de Dirac es

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

donde  $\sigma^i$  son las matrices de  $2 \times 2$  de Pauli

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

A la representación de las  $\gamma^\mu$  dada por (2.25)-(2.26) se la conoce como representación de Dirac de las matrices  $\gamma^\mu$  pues es la que Dirac utilizó originalmente.<sup>9</sup>

Otra representación útil es la llamada quiral. En esta representación se tiene:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -I_{2 \times 2} \\ -I_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

mientras que las  $\gamma^i$  coinciden con (2.26),

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

En esta representación es la matriz  $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$  la que es diagonal y toma la forma

$$\gamma^5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -I_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

Veremos más adelante que en la teoría de Dirac hay una simetría muy importante que se conoce como simetría quiral y para estudiarla esta representación es la más adecuada.

Puede comprobarse fácilmente que la matriz  $S$  que pasa de una representación a la otra es

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & -I \\ I & I \end{pmatrix}, \quad \gamma_{Dirac}^\mu = S^{-1} \gamma_{quiral}^\mu S \quad (2.31)$$

---

<sup>9</sup>Recordemos que según G. Gamow, Dirac entrevió la solución una noche del invierno de 1928, mientras meditaba sentado frente al fuego en el St. John College de Cambridge. Cuenta Dirac que en esa noche jugaba con matrices de  $2 \times 2$  con propiedades muy notables que había inventado y que no son otra cosa que las que llamamos matrices de Pauli. En ese relato comenta que él ignoraba que Pauli había encontrado esas matrices y que suponía que Pauli igualmente ignoraba que él también las había inventado.

Daremos finalmente una representación que permite escribir a la ecuación de Dirac como una ecuación real, llamada representación de Majorana en referencia al físico italiano Ettore Majorana<sup>10</sup> que las utilizó en su trabajo relacionado con los neutrinos,

$$\begin{aligned}\gamma^0 &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix}, & \gamma^1 &= \begin{pmatrix} i\sigma^3 & 0 \\ 0 & i\sigma^3 \end{pmatrix}, & \gamma^2 &= \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix}, \\ \gamma^3 &= \begin{pmatrix} -i\sigma^1 & 0 \\ 0 & i\sigma^1 \end{pmatrix}, & \gamma_5 &= \gamma^5 = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & -\sigma^2 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (2.32)$$

En esta representación las soluciones de la ecuación de Dirac son combinaciones lineales de soluciones reales.

$$S = S^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & \sigma^2 \\ \sigma^2 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma_{Majorana}^\mu = S \gamma_{Dirac}^\mu S^\dagger \quad (2.33)$$

Esta representación es la mas adecuada para estudiar ecuaciones relativistas para los neutrinos, que son fermiones de carga eléctrica nula y que no solo tienen un rol muy importante en la física de partícula sino muy recientemente en problemas de la materia condensada como los de los “aisladores y superconductores topológicos”.

## Invarianza relativista

Consideremos ahora la transformación de Lorentz homogénea más general. Se trata de una transformación entre dos sistemas inerciales que se mueven uno respecto del otro con velocidad  $\vec{V}$  (constante) dejando invariante al producto  $x_\mu x^\mu$ , que es entonces un “escalar de Lorentz” (i.e., invariante ante transformaciones de Lorentz).

La transformación de las coordenadas toma la forma

$$x'^\mu = a^\mu{}_\nu x^\nu \quad a^\mu{}_\nu \in R \quad (2.34)$$

con  $a^\mu{}_\nu = a^\mu{}_\nu(\vec{V}, c)$ . El dejar el producto  $x_\mu x^\mu$  invariante impone la siguiente condición

$$a^\mu{}_\nu a^\nu{}_\lambda = a^{\mu\nu} a_{\mu\lambda} = a^{\nu\mu} a_{\lambda\mu} = \delta^\nu{}_\lambda \quad (2.35)$$

---

<sup>10</sup>Ettore Majorana (1906-1938(?)), “Teoria simmetrica dellelettrone e del positrone”, Il Nuovo Cimento, 14 (1937) 171.

Usando las dos ecuaciones anteriores

$$x'^{\mu} = a^{\mu}_{\nu} x^{\nu} \quad a^{\mu}_{\nu} \in R$$

$$a^{\nu}_{\mu} a^{\mu}_{\lambda} = a^{\mu\nu} a_{\mu\lambda} = a^{\nu\mu} a_{\lambda\mu} = \delta^{\nu}_{\lambda}$$

es fácil ver que las derivadas cambian según

$$\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} = a^{\nu}_{\mu} \frac{\partial}{\partial x'^{\nu}} \quad (2.36)$$

o, de manera más compacta,

$$\partial_{\mu} = a^{\nu}_{\mu} \partial'_{\nu} \quad (2.37)$$

Si tomamos la ecuación de Dirac (2.1)

$$i\hbar\gamma^{\mu} \frac{\partial\psi}{\partial x^{\mu}} - mc\psi = 0 \quad (2.38)$$

y utilizamos (2.36), podemos escribir

$$\frac{\hbar}{i}\gamma^{\mu} a^{\nu}_{\mu} \frac{\partial\psi}{\partial x'^{\nu}} + mc\psi = 0 \quad (2.39)$$

Buscamos que la ecuación de Dirac sea covariante, es decir, que tome la misma forma en las variables primadas  $x'_{\mu}$  que en las originales  $x_{\mu}$ . Para ello definiremos un nuevo conjunto de matrices

$$\tilde{\gamma}^{\mu} = a^{\mu}_{\nu} \gamma^{\nu} \quad (2.40)$$

Es fácil ver que, dadas las condiciones que cumple  $a^{\nu}_{\mu}$ , las  $\tilde{\gamma}^{\mu}$  satisfacen todas las condiciones de las matrices de Dirac, de manera que podemos tomarlas como un nuevo conjunto de matrices de Dirac y escribir

$$\frac{\hbar}{i}\tilde{\gamma}^{\mu} \frac{\partial\psi}{\partial x'^{\mu}} + mc\psi = 0 \quad (2.41)$$

Ahora bien, por el teorema fundamental de Pauli sabemos que si  $\{\gamma^{\mu}\}$  y  $\{\tilde{\gamma}^{\mu}\}$  son dos conjuntos aceptables de matrices de Dirac, debe existir  $S$  tal que

$$\tilde{\gamma}^{\mu} = S^{-1}\gamma^{\mu}S \quad (2.42)$$

Notemos que de las ecs. (1.21) y (2.42) resulta

$$S^{-1}\gamma^\mu S = a^\mu_\nu \gamma^\nu \quad (2.43)$$

Podemos reescribir (2.41) en la forma

$$\frac{\hbar}{i} S^{-1} \gamma^\mu S \frac{\partial \psi}{\partial x'^\mu} + mc \psi = 0 \quad (2.44)$$

o

$$\frac{\hbar}{i} \gamma^\mu \frac{\partial S \psi}{\partial x'^\mu} + mc S \psi = 0 \quad (2.45)$$

Basta que identifiquemos  $S\psi$  con la función de onda transformada  $\psi'$  para que podamos escribir

$$\frac{\hbar}{i} \gamma^\mu \frac{\partial \psi'}{\partial x'^\mu} + mc \psi' = 0 \quad (2.46)$$

O sea que hemos mostrado que la ecuación de Dirac es covariante (y de hecho invariante) frente a las transformaciones de Lorentz (4.86) si la función de onda cambia según

$$\psi'(x') = S\psi(x) \quad (2.47)$$

Es importante notar que las  $\gamma^\mu$  que aparecen en la ecuación de Dirac son las mismas en ambos sistemas inerciales.

De hecho, por más que el índice  $\mu$  puede inducir a pensar que  $\gamma^\mu$  es un tetravector cuyas componentes son matrices de  $4 \times 4$ , hacerlo sería incorrecto. En efecto, si lo fuera, debería transformarse como tal al pasar de un sistema de referencia al otro, pero este no es el caso. Veremos luego, al considerar cómo transforma la corriente  $j_\mu$  frente a transformaciones de Lorentz cuál es la ley de transformación general de tetravectores.

En resumen, en la ec. (2.46) solo aparecen transformadas de Lorentz las coordenadas del espacio-tiempo y la función de ondas. Las matrices de Dirac son un conjunto de matrices que permanecen inalteradas.

Tenemos ahora que comprobar que esta interpretación, según la cual la función de onda en el sistema primado está dada por (2.47), es consistente. En particular, tenemos que comprobar que  $|\psi'|^2$  tiene una interpretación de densidad de probabilidad, en el sistema primado,

análoga a la de  $\rho = |\psi|^2$  en el sistema sin primar. Para ello, vamos a derivar nuevas propiedades de  $S$ .

Recordemos que escribimos (ec.(2.44))

$$\tilde{\gamma}^\mu = S^{-1}\gamma^\mu S \quad (2.48)$$

Como las matrices de Dirac se relacionan con sus adjuntas según

$$\gamma^\mu = \gamma^0 \gamma^{\mu\dagger} \gamma^0 \quad (2.49)$$

se tiene

$$\tilde{\gamma}^\lambda = a^\lambda_\mu \gamma^\mu = a^\lambda_\mu \gamma^0 \gamma^{\mu\dagger} \gamma^0 = \gamma^0 \left( a^\lambda_\mu \gamma^\mu \right)^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 \left( S^{-1} \gamma^\lambda S \right)^\dagger \gamma^0 \quad (2.50)$$

De aquí, reemplazando  $\gamma^{\lambda\dagger}$  a partir de la relación (2.49)

$$a^\lambda_\mu \gamma^\mu = \gamma^0 S^\dagger \gamma^{\lambda\dagger} \left( S^{-1} \right)^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \gamma^\lambda \gamma^0 \left( S^{-1} \right)^\dagger \gamma^0 \quad (2.51)$$

Pero el lado izquierdo es de hecho  $S^{-1}\gamma^\mu S$  mientras que el derecho puede ordenarse de manera que la ecuación (2.51) se escriba:

$$S^{-1}\gamma^\lambda S = \left( \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \right) \gamma^\lambda \left( \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \right)^{-1} \quad (2.52)$$

Multiplicando ambos miembros a izquierda por  $S$

$$\gamma^\lambda S = S \left( \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \right) \gamma^\lambda \left( \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \right)^{-1} \quad (2.53)$$

y a derecha por  $\left( \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \right)$  se tiene

$$\gamma^\lambda \left( S \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \right) = \left( S \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \right) \gamma^\lambda \quad (2.54)$$

Pero para que el producto entre paréntesis conmute con todas las matrices  $\gamma^\lambda$ , debe ser un múltiplo de la identidad

$$S \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = bI \quad (2.55)$$

o

$$S \gamma^0 S^\dagger = b \gamma^0 \quad (2.56)$$

Tomando el adjunto en esta ecuación,

$$S\gamma^0 S^\dagger = b^* \gamma^0 \quad (2.57)$$

de donde resulta que  $b = b^*$ . Calculamos ahora el determinante en la igualdad (2.56) ,

$$\det S^2 = b^4 \quad (2.58)$$

de manera que si elegimos que  $\det S = 1$ , se tendra  $b^4 = 1$  por lo que  $b = \pm 1$ .

Ahora, escribamos la serie de igualdades

$$S^\dagger S = S^\dagger \gamma^0 \gamma^0 S = b\gamma^0 S^{-1} \gamma^0 S = b\gamma^0 a^0_\nu \gamma^\nu = ba^0_0 I - \sum_{k=1}^3 ba^0_k \gamma^0 \gamma^k \quad (2.59)$$

Si tomamos traza en ambos miembros de esta igualdad y usamos que  $\text{tr} \gamma^0 \gamma^k = 0$  llegamos a que

$$\text{tr} S^\dagger S = 4ba^0_0 \quad (2.60)$$

Como el lado izquierdo es definido positivo, tenemos finalmente

$$4ba^0_0 > 0 \quad (2.61)$$

Luego  $b = +1$  corresponde a  $a^0_0 > 0$ , una transformación de Lorentz ortocrona<sup>11</sup> mientras que  $b = -1$  corresponde a  $a^0_0 < 0$ , una inversión temporal.

En cuanto a las propiedades de transformación de  $\psi'$ , tenemos

$$\psi' = S\psi \implies (\psi')^\dagger = \psi^\dagger S^\dagger \quad (2.62)$$

Multiplicando a derecha por  $\gamma^0$  y recordando la definición  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$  se tiene

$$\psi'^\dagger = \psi^\dagger S^\dagger \gamma^0 = \psi \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = b\bar{\psi} S^{-1} \quad (2.63)$$

Dado el teravector corriente

$$\frac{1}{c} J^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \quad (2.64)$$

---

<sup>11</sup>ortocrona: que preserva el sentido del tiempo.



su transformado de Lorentz se escribirá

$$\frac{1}{c}J'^{\mu} = \bar{\psi}'\gamma^{\mu}\psi' = b\bar{\psi}S^{-1}\gamma^{\mu}S\psi = b\bar{\psi}a^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu}\psi = \frac{b}{c}a^{\mu}_{\nu}J^{\nu} \quad (2.65)$$

Luego, basta elegir  $b = +1$  para que  $J^{\mu}$  transforme como un tetravector ante transformaciones de Lorentz, lo que da la transformación adecuada para  $\rho = |\psi|^2$  que puede entonces ser interpretada como densidad de probabilidad.

# Clase 3

## El carácter de $\psi$

Hemos escrito a la ecuación de Dirac para una partícula libre de masa  $m$  de manera explícitamente covariante en la forma

$$i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial x^\mu} - mc\psi(\vec{x},t) = 0 \quad (3.1)$$

donde las matrices  $\gamma^\mu$  son cuatro matrices de  $4 \times 4$  que satisfacen lo que los matemáticos llaman un álgebra de Clifford<sup>12</sup>

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2g_{\mu\nu}I_{N \times N} \quad (3.2)$$

Vimos que la representación más pequeña posible para que la ecuación de Dirac para una partícula libre de masa  $m$  cumpla la relación relativista entre energía e impulso es la que corresponde a matrices  $\gamma^\mu$  de  $4 \times 4$ . Si la adoptamos,  $\psi$  será necesariamente un objeto de cuatro componentes, un espinor de 4 componentes<sup>13</sup>

$$\psi(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \\ \psi^3 \\ \psi^4 \end{pmatrix} = (\psi^\alpha(x)) \quad (3.3)$$

---

<sup>12</sup>El matemático y filósofo inglés William K. Clifford fue quien introdujo este álgebra cuadrática multilineal en la década de 1870.

<sup>13</sup>Formalmente, un espinor es un elemento d'un espacio de representación para el "grupo espinorial". En el contexto de la mecánica cuántica relativista, los espinores son elementos de un espacio vectorial complejo asociado al espacio de Minkowski. Los espinores fueron introducidos en la matemática por Elie Cartan en 1913 y originalmente utilizados en la física por Pauli, en 1920.

Dada una transformación de Lorentz para las coordenadas del espacio-tiempo que anotamos como

$$x'^{\mu} = a^{\mu}_{\nu} x^{\nu} \quad (3.4)$$

mostramos en la clase anterior que la ley de transformación de la función de onda  $\psi$  (el espinor  $\psi$ ) debía estar dada por

$$\psi'^{\alpha}(x') = S^{\alpha\beta} \psi^{\beta}(x) \quad (3.5)$$

o, de manera compacta

$$\psi'(x') = S\psi(x) \quad (3.6)$$

Aquí  $S^{\alpha\beta}$  representa una matriz de  $4 \times 4$  que queda determinada a través de la relación que resulta de combinar las ecs. (1.21) y (2.42),

$$a^{\lambda}_{\mu} (\gamma^{\mu})_{\alpha\beta} = (S^{-1})_{\alpha\rho} (\gamma^{\lambda})_{\rho\sigma} (S)_{\sigma\beta} \quad (3.7)$$

o, nuevamente en forma compacta

$$a^{\lambda}_{\mu} \gamma^{\mu} = S^{-1} \gamma^{\lambda} S \quad (3.8)$$

Pretendemos ahora responder a la pregunta: ¿Cuál es el carácter de  $\psi$ ? O, en otras palabras, cómo se define de manera precisa al objeto que llamamos espinor?

La ley transformación frente al grupo de Lorentz,  $\psi'(x') = S\psi(x)$ , nos muestra que no es un escalar puesto que de serlo no se transformaría frente a transformaciones de Lorentz. Tampoco es un tetravector como  $x^{\mu}$  o la corriente de probabilidad  $J^{\mu}$  que se transforman según la relación  $V'^{\mu} = a^{\mu}_{\nu} V^{\nu}$ <sup>14</sup>. En lo que sigue determinaremos  $S$  explícitamente para poder responder a la pregunta del párrafo anterior.

Consideremos una transformación de Lorentz infinitesimal tal que  $a^0_0 > 0$  de manera que se preserve el sentido del tiempo

$$x'^{\mu} = x^{\mu} + \epsilon \lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} = (\delta^{\mu}_{\nu} + \epsilon \lambda^{\mu}_{\nu}) x^{\nu} \quad (3.9)$$

---

<sup>14</sup>Como ya indicamos, el índice  $\alpha$ , con  $\alpha = 1, \dots, 4$ , de  $(\psi^{\alpha})$  nada tiene que ver con los índices de Lorentz de espacio-tiempo).

donde  $\epsilon$  es un parámetro infinitesimal asociado a la transformación. En cuanto a  $\lambda_{\mu\nu}$ , quedará determinada según el tipo de transformación que represente  $a_\nu^\mu$  (inversiones, rotaciones, boosts).

Para comenzar, las condiciones que debe satisfacer  $a_\mu^\nu$ , (2.35),

$$a_\mu^\nu a_\alpha^\mu = a^{\mu\nu} a_{\mu\alpha} = a^{\nu\mu} a_{\alpha\mu} = \delta_\alpha^\nu \quad (3.10)$$

imponen la siguiente relación a orden  $\epsilon$ , cuando se escribe  $a_\nu^\mu = \delta_\nu^\mu + \epsilon \lambda_\nu^\mu$

$$a_\nu^\mu = \delta_\nu^\mu + \epsilon \lambda_\nu^\mu \Rightarrow \lambda^{\mu\nu} = -\lambda^{\nu\mu} \quad (3.11)$$

Para la matriz  $S$  que transforma a  $\psi$  cuando  $x^\mu$  se transforma como en (3.9) escribimos también a orden  $\epsilon$ ,

$$S = I + \epsilon T \quad (3.12)$$

Se trata ahora de determinar  $T$  para luego escribir, como hacemos siempre en el caso finito,  $S = \exp(\epsilon T)$ .

Utilizando la relación (3.8),

$$a_\mu^\lambda \gamma^\mu = S^{-1} \gamma^\lambda S$$

se tiene

$$(\delta_\nu^\mu + \epsilon \lambda_\nu^\mu) \gamma^\nu = (I - \epsilon T) \gamma^\mu (I + \epsilon T)$$

Al orden  $\epsilon$  en que trabajamos resulta entonces

$$\lambda_\nu^\mu \gamma^\nu = \gamma^\mu T - T \gamma^\mu \quad (3.13)$$

Esta relación determina  $T$  a menos de un múltiplo de la identidad (pues  $I$  es la única matriz que conmuta con todas las  $\gamma^\mu$ ). Podemos entonces imponer que  $\text{tr } T = 0$  pues, si su traza diera otro valor, bastaría restar un múltiplo adecuado de la identidad para anularla.

Puede verse entonces que, trabajando a orden  $\epsilon$ , esto es equivalente a que  $\det S = 1$ , (recordar el desarrollo de un determinante en terminos de la identidad, la traza, etc<sup>15</sup>)

$$\det S = \det(1 + \epsilon T) = 1 + \epsilon \text{tr } T + O(\epsilon^2) = 1 + O(\epsilon^2) \quad (3.14)$$

---

<sup>15</sup> $\det(1 + \epsilon A) = 1 + \epsilon \text{tr}(A) + \epsilon^2 \frac{1}{2}(\text{tr}^2 A - \text{tr}(A^2)) + \dots$

Usando reiteradamente las propiedades de las  $\gamma^\mu$  puede verse que la solución de (3.13) es

$$T = \frac{1}{8} \lambda^{\mu\nu} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu) = -\frac{i}{2} \lambda^{\mu\nu} \Sigma_{\mu\nu} \quad (3.15)$$

con

$$\Sigma_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{4} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \quad (3.16)$$

Quedan así identificados los  $\Sigma_{\mu\nu}$  como los generadores de las transformaciones de Lorentz mientras que los  $\lambda_{\mu\nu}$  son los parámetros de las diferentes transformaciones (el equivalente a los ángulos de Euler  $\theta_i$  para las rotaciones: la fórmula análoga a (3.15) para el caso de espinores de 2 componentes es  $i\theta_i \sigma_i$ ).

La convención que adoptamos para representar a las transformaciones de Lorentz como matrices de  $4 \times 4$  con elementos  $a_\mu^\nu$  con  $\mu = 0, 1, 2, 3$  es tal que en la primera fila aparezcan los elementos  $a_0^\nu$  ( $\nu = 0, 1, 2, 3$ ), en la segunda fila los  $a_1^\nu$  y así siguiendo para el resto de filas.

Como ejemplo simple, consideremos una rotación  $R_{12}$  alrededor del eje  $z$ . Obviamente tal rotación no afecta ni a  $x^0$  ni a  $x^3 = z$  y de ahí la forma de las filas y columnas 0, 3 que resultan. En cuanto a los otros elementos, simplemente se utiliza la bien conocida fórmula para una rotación de ángulo  $\epsilon$  en el plano 1, 2. El resultado es

$$a_\mu^\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \epsilon & \sin \epsilon & 0 \\ 0 & -\sin \epsilon & \cos \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \approx I + \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Luego, los únicos  $\lambda_{\mu\nu}$  no nulos serán en este caso  $\lambda^{12} = -\lambda^{21} = 1$ , como era de esperar para una rotación en el plano  $(x^1, x^2)$ . Se tiene entonces para  $T$ , usando la expresión (3.15)-(3.16) ( $T = -\frac{i}{2} \lambda^{\mu\nu} \frac{i}{4} [\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ )

$$T(R_{12}) = \frac{1}{2} \gamma^1 \gamma^2 \quad (3.18)$$

o, usando la representación de Dirac para las matrices  $\gamma^\mu$ ,

$$T(R_{12}) = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix} = \frac{i}{2} \Sigma^3 \quad (3.19)$$

Vemos que  $T(R_{12})$  es el generador infinitesimal en el caso de rotaciones alrededor del eje z

$$S(R_{12}) \approx 1 + \frac{i\epsilon}{2} \Sigma^3 \quad (3.20)$$

Es importante notar que se trata de una matriz diagonal por bloques de  $2 \times 2$  y que cada uno de esos bloques coincide con el generador infinitesimal de rotaciones de los espinores de Pauli 2 componentes alrededor del eje z que estudiamos en el caso de la mecánica cuántica no relativista.

Si la transformación no es la de un ángulo infinitesimalmente pequeño  $\epsilon$  sino uno finito  $\theta$  sabemos que se tendrá entonces

$$S(R_{12}) = \exp \left( \frac{i}{2} \theta \Sigma^3 \right) \quad (3.21)$$

De tratarse de una rotación general con parámetros  $\theta^i$  asociados con los tres ejes de coordenadas espaciales podemos escribir

$$S(R) = \exp \left( \frac{i}{2} \theta^i \Sigma^i \right) \quad (3.22)$$

con  $\Sigma^i$  dada por

$$\Sigma^i = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

Si se tratara de una transformación de Lorentz  $L_{01}$  (boost) a lo largo del eje  $x_1$  espacial, tendríamos  $\lambda^{01} = -\lambda^{10} = 1$  y los demás  $\lambda$  nulos. En este caso se tiene

$$T(L_{01}) = \frac{1}{2} \gamma^0 \gamma^1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \alpha^1 \quad (3.24)$$

que podría haberse obtenido mas simplemente a partir de la definición  $\gamma^i = \gamma^0 \alpha^i$  y que  $(\gamma^0)^2 = 1$ . Con esto

$$S(L_{01}) \approx 1 + \frac{\epsilon}{2} \alpha^1 \quad (3.25)$$

Para un boost finito con parámetro  $\omega = V/c$  se tendrá, desarrollando en serie de potencias el exponencial resultante y usando que  $(\alpha^1)^2 = I$

$$S(L_{01}) = \exp\left(\frac{\omega}{2}\alpha^1\right) = \cosh\left(\frac{\omega}{2}\right) + \alpha^1 \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \quad (3.26)$$

y análogamente en las otras direcciones. Notemos que estas transformaciones están representadas de manera no-unitaria ya que, siendo las matrices  $\alpha_i$  hermíticas, se tiene que  $S(L_{01}) = S^\dagger(L_{01}) \neq S^{-1}(L_{01})$ .

Es importante notar que los boosts del grupo de Lorentz en una dimension espacial y la temporal están parametrizados por  $\omega = V/c$  y por lo tanto la transformación es homeomorfa a un espacio topológico en un intervalo abierto de  $\mathbf{R}$  que es non-compact en la topología generada por la métrica (contrastar con las rotaciones en el plano como ejemplo de un grupo compacto: están parametrizadas por un ángulo  $0 \leq \theta \leq 2\pi$  en el que el 0 es identificado con  $2\pi$ )

Notemos que la matriz  $\Sigma^i$ , que genera rotaciones espaciales de  $\psi$ , tiene en sus dos bloques no triviales a la matriz  $\sigma^i$  asociada con las rotaciones para los espinores de Pauli de dos componentes con que describíamos a una partícula de spin 1/2. Recalquemos entonces que las dos componentes de arriba (las llamaremos  $\psi^+$ ) y las de abajo ( $\psi^-$ ), transforman independientemente una de la otra bajo rotaciones en el espacio de tres dimensiones. Lo mismo sucede para las transformaciones de Lorentz (boosts). Es decir que  $\psi^+$  y  $\psi^-$  transforman bajo rotaciones y boosts como los espinores de dos componentes que introdujimos en la mecánica cuántica no-relativista del electrón.

En cuanto a  $\psi$  completo, representa un *espinor de cuatro componentes* que transforma de acuerdo con la representación espinorial del grupo de Lorentz en el espacio-tiempo (pseudo-Euclídeo) de 4 dimensiones. Este espinor se descompone, con respecto al grupo de rotaciones en el espacio de 3 dimensiones en dos partes irreducibles que son espinores en el espacio tridimensional. Es decir que en lo que respecta a rotaciones y boosts, la representación sería reducible. Es solo cuando se incluyen reflexiones espaciales (cambio de paridad) que deviene irreducible.

Algunos autores solo llaman *espinor* a los objetos de 2 componentes que transforman como vimos y reservan el de *biespinor* para el espinor

del grupo de Lorentz de 4 componentes. Nosotros adoptamos la terminología del libro de Cartan [7], en la que se habla siempre de espinor y se aclara el número de componentes.

Las representaciones irreducibles del grupo de Lorentz se analizan de manera análoga a las del grupo de rotaciones, como se hizo al estudiar el momento angular en mecánica cuántica no relativista.

La idea es construir matrices  $D^{(jj')}(\lambda)$  caracterizadas por dos enteros o semienteros positivos  $j$  y  $j'$  que representan las transformaciones de Lorentz en cada representación. Hay un número infinito numerable de representaciones de dimensión finita, que no son equivalentes y que pueden ser no-unitarias. Cada representación queda entonces caracterizada por los dos enteros o semienteros positivos  $j$  y  $j'$ ,

$$\begin{aligned} j &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ j' &= 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \end{aligned} \quad (3.27)$$

Lo anterior puede entenderse en términos de álgebras notando que el álgebra de Lorentz es equivalente a dos copias del álgebra de  $SO(3) \approx SU(2)$ . Más precisamente, el grupo de Lorentz homogéneo (i.e., ortocrono y sin incluir a las traslaciones), coincide con el grupo  $SL(2, C)$  de matrices complejas  $M$  de  $2 \times 2$  tal que  $\det M = 1$ . Este grupo es la versión complexificada de  $SU(2) \times SU(2)$ .

La dimensión de la representación  $R$ , caracterizada por  $j$  y  $j'$  es:

$$\dim R^{(jj')} = (2j + 1)(2j' + 1) \quad (3.28)$$

Una cantidad que transforma según  $D^{(00)}$  se llama escalar de Lorentz. Una que transforma según  $D^{(\frac{1}{2}0)}$  corresponde a un espinor de dos componentes (que se conoce como espinor de Weyl) y uno que transforma según  $D^{(0\frac{1}{2})}$  corresponde a un espinor conjugado de dos componentes (espinor de Weyl conjugado). Estos espinores de dos componentes son los que usamos en la teoría de Pauli de dos componentes para representar a la función de onda en el caso no relativista cuando se incluyó el spin.

La representación  $(1/2, 1/2)$  es una representación vectorial. Un objeto que transforma según ella es entonces lo que conocemos como tetravector.



Los objetos de 4 componentes que aparecen en la ecuación de Dirac son, por construcción, objetos que corresponden a la suma directa  $(1/2, 0) \oplus (0, 1/2)$ . El espinor resultante es un espinor de 4 componentes o espinor de Dirac.

**Entonces, necesitamos 4 componentes y no solamente dos porque los espinores de dos componentes y su transformado por inversiones espaciales no se transforman de la misma manera bajo transformaciones de Lorentz.**

El requerir que una teoría sea invariante bajo reflexiones espaciales implica la necesidad de usar espinores de 4 componentes. En efecto, una inversión lleva un espinor de dos componentes que pertenece a la representación  $(1/2, 0)$  a uno que pertenece a la representación  $(0, 1/2)$ . Esto puede verse fácilmente recordando que para el caso de una inversión espacial se tiene que  $(a_\lambda^\mu)$  es una matriz diagonal,

$$a_\mu^\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Luego, usando la relación (3.8)

$$a_\mu^\lambda \gamma^\mu = S^{-1} \gamma^\lambda S \quad (3.29)$$

para el caso  $\lambda = 1$  se tiene

$$a_\mu^1 \gamma^\mu = a_1^1 \gamma^1 = -\gamma^1 = S^{-1} \gamma^1 S \quad (3.30)$$

Luego se tiene que  $S\gamma^1 + \gamma^1 S = 0$ . Lo mismo sucede para  $\lambda = 2, 3$  mientras que para el caso de  $\lambda = 0$  resulta que debe conmutar. Esto implica que se puede tomar a  $S$  proporcional a  $\gamma^0$ . En la representación quirral (que es la que permite caracterizar a las dos primeras componentes frente a las 2 últimas)  $\gamma^0$  es una matriz con dos bloques en la antidiagonal (cada uno proporcional a la identidad, ver eq.(2.28),

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -I_{2 \times 2} \\ -I_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix}$$

y por eso se cambian las componentes de arriba respecto de las de abajo e inversamente (más adelante esto quedara más claro).

Para el resto de las transformaciones del grupo de Lorentz,  $\psi^+$  y  $\psi^-$  transforman separadamente.

De lo anterior pueden deducirse las propiedades de transformación de cantidades bilineales construidas a partir de  $\psi$  y  $\bar{\psi}$ . Por ejemplo, ya vimos que la corriente  $J^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$  transforma como un tetravector. Para demostrarlo, usamos que

$$\psi \rightarrow \psi' = S\psi \quad (3.31)$$

$$\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi}S^{-1} \quad (3.32)$$

(Para escribir (3.32) utilizamos en (2.63) el valor  $b = 1$  de manera de tener transformaciones ortocronas). A partir de (3.31)-(3.32) es fácil ver que  $\bar{\psi}\psi$  transforma como un escalar invariante,

$$\bar{\psi}\psi \rightarrow \bar{\psi}'\psi' = \bar{\psi}\psi \quad (3.33)$$

## La solución de partícula libre

Buscaremos ahora las soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre de masa  $m$ ,

$$\hbar i\gamma^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} - mc\psi = 0 \quad (3.34)$$

Es fácil comprobar que esta ecuación tiene soluciones del tipo onda plana, que describen una partícula cuántica relativista de masa  $m$  en ausencia de interacción. Estas soluciones, como es esperable, tienen la forma

$$\psi(\vec{x}, t) = u \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_\mu x^\mu\right) \quad (3.35)$$

donde  $u$  es un espinor con las 4 componentes constantes y  $p_\mu$  un tetravector constante, asociado al operador  $\hat{p}_\mu$ .

$$\hat{p}_\mu = \hbar i\partial_\mu, \quad (3.36)$$

El autovalor  $p_\mu$  debe ajustarse para que (3.35) sea solución de (3.34), o sea que satisfaga la relación relativista  $E^2 = \vec{p}^2c^2 + m^2c^4$ . Insertando la

solución (3.35) propuesta en la ecuación de Dirac se obtiene la ecuación matricial algebraica

$$(\gamma^\mu p_\mu - mcI) u = 0 \quad (3.37)$$

De ahora en más obviaremos en notación la matriz identidad de  $4 \times 4$   $I$ .

La fórmula (3.37) representa a 4 ecuaciones homogéneas (una para cada componente de  $u$ ) que tendrán solución no-trivial si se cumple

$$\det(\gamma^\mu p_\mu - mc) = 0 \quad (3.38)$$

Que se cumpla esta condición implica que la inversa “formal”

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)^{-1} \quad (3.39)$$

no puede existir. Para encontrar los puntos singulares reescribamos esta inversa en la forma

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)^{-1} = \frac{1}{(\gamma^\mu p_\mu - mc)} \frac{(\gamma^\nu p_\nu + mc)}{(\gamma^\nu p_\nu + mc)} \quad (3.40)$$

El producto de denominadores puede reacomodarse de una manera simple:

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)(\gamma^\nu p_\nu + mc) = \gamma^\mu \gamma^\nu p_\mu p_\nu - m^2 c^2 = p^\mu p_\mu - m^2 c^2 \quad (3.41)$$

Luego, la inversa puede escribirse como

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)^{-1} = \frac{(\gamma^\nu p_\nu + mc)}{p^\mu p_\mu - m^2 c^2} \quad (3.42)$$

Establecimos que esta inversa no debe existir o, lo que es equivalente, el determinante (3.38) debe anularse y la ecuación (3.37) tendrá soluciones no triviales si el denominador de (3.42) se anula,

$$p^\mu p_\mu - m^2 c^2 = 0 \quad (3.43)$$

Si escribimos  $(p^\mu) = (E/c, \vec{p})$ , de manera que

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 \quad (3.44)$$

Con esta notación es claro que podemos identificar a las componentes del cuadvivector  $p_\mu$  con con la energía  $E$  y las 3 componentes del impulso  $\vec{p}$  de manera que la condición (3.44) deviene la relación entre energía  $E$  e impulso  $\vec{p}$  de una partícula libre de masa  $m$ , según la forma clásica de la relatividad restringida,

$$E^2 = c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4 \quad (3.45)$$

Entonces, dado  $\vec{p}$ , la energía  $E$  de la partícula puede tomar los valores

$$E_\pm = \pm \sqrt{c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4} \quad (3.46)$$

Vemos que la ecuación de Dirac libre tiene soluciones de partícula libre con energía positiva y ¡negativa!. Volvamos a mencionar que en la ecuación de Dirac la masa puede tener cualquier signo puesto que en la fórmula (3.46) aparece al cuadrado.

Resta determinar las soluciones  $u$  del sistema homogéneo (3.37). Escribiendo al espinor como

$$u = \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \\ u^3 \\ u^4 \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

y utilizando nuevamente la representación de Dirac de las matrices  $\gamma^\mu$ , es fácil encontrar las 4 soluciones independientes del sistema homogéneo de 4 ecuaciones (3.37),

$$(\gamma^\mu p_\mu - mcI) u = 0 \quad (3.48)$$

en términos de  $E$  y  $\vec{p}$ . Para el caso de  $E = E_+$  se obtienen dos soluciones

$$u^{(I)} = \mathcal{N}_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{E_+ + mc^2} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{E_+ + mc^2} \end{pmatrix}, \quad u^{(II)} = \mathcal{N}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x - ip_y)}{E_+ + mc^2} \\ -\frac{cp_z}{E_+ + mc^2} \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

donde  $\mathcal{N}_+$  es una normalización adecuada.

Análogamente, se encuentra para el caso  $E = E_-$ ,

$$u^{(III)} = \mathcal{N}_- \begin{pmatrix} -\frac{cp_z}{-E_- + mc^2} \\ -\frac{c(p_x + ip_y)}{-E_- + mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(IV)} = \mathcal{N}_- \begin{pmatrix} -\frac{c(p_x - ip_y)}{-E_- + mc^2} \\ \frac{cp_z}{-E_- + mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

En los cuatro casos, la normalización se ajusta de manera que

$$\sum_{\alpha=1}^4 |u^\alpha|^2 = 1 \quad (3.51)$$

Resulta

$$\mathcal{N}_\pm^2 = \left( 1 + \frac{c^2 \vec{p}^2}{(E_\pm + mc^2)^2} \right)^{-1} \quad (3.52)$$

El límite no relativista ( $v/c \rightarrow 0$ ) corresponde a  $|E_\pm| \rightarrow mc^2$ . En este caso las soluciones toman la forma

$$u^{(I)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ O(v/c) \\ O(v/c) \end{pmatrix}, \quad u^{(II)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ O(v/c) \\ O(v/c) \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

$$u^{(III)} = \begin{pmatrix} O(v/c) \\ O(v/c) \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(IV)} = \begin{pmatrix} O(v/c) \\ O(v/c) \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

Se distingue así a las “grandes componentes”, que son las que sobreviven al límite  $v/c \rightarrow 0$ , de las “pequeñas componentes” que se anulan en este límite. Se observa entonces que en el límite no relativista, la parte no trivial de los espinores de 4 componentes se reduce a espinores de 2 componentes (espinores de Pauli), que corresponden, para el caso de energía positiva, a la solución de la ecuación no relativista de Schrödinger para una partícula libre con spin 1/2:

$$u^{(I)} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u^{(II)} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

# Clase 4

## El spin en Mecánica Cuántica Relativista

Recordemos que a partir de la ecuación de Dirac,

$$i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial x^\mu} - mc\psi(\vec{x},t) = 0, \quad \gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3) \quad (4.1)$$

pudimos identificar el hamiltoniano relativista de una partícula libre de masa  $m$ . En efecto, escribiendo la ec. (4.1) en términos de las matrices  $\alpha^i, \beta$  en lugar de las matrices  $\gamma^\mu$  según las relaciones

$$\gamma^0 = \beta \quad (4.2)$$

$$\gamma^i = \beta\alpha^i \quad (4.3)$$

se tiene

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(c\vec{\alpha}\cdot\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \beta mc^2\right)\psi \equiv \hat{H}\psi \quad (4.4)$$

Escrita de esta manera señalamos anteriormente una evidente analogía de esta ecuación con la ecuación de Schrödinger no-relativista si identificamos al hamiltoniano en la forma  $\hat{H}$ ,

$$\hat{H} = c\vec{\alpha}\cdot\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} + \beta mc^2 \quad (4.5)$$

Esta identificación es consistente con el hecho de que el lado izquierdo de la ec.(4.4) puede ser asociado a una traslación temporal infinitesimal de la función de onda con lo que el operador  $\hat{H}$  del lado derecho cumple el rol de generador de dicha traslación.

Es fácil ver que  $\hat{H}$  según la definición (4.5).

$$\hat{H} = c\vec{\alpha} \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \beta mc^2 \quad (4.6)$$

no conmuta con el operador  $\hat{\vec{L}} = \vec{r} \wedge \hat{\vec{p}}$ , asociado al momento angular orbital según las reglas de cuantificación canónica que aceptamos en la mecánica cuántica no-relativista y que hasta aquí consideramos que son consistentes en el caso relativista. En efecto, si reescribimos (4.6) usando que  $(\hbar/i)\vec{\nabla} = \hat{\vec{p}}$  se tiene

$$\hat{H} = c\vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \beta mc^2 \quad (4.7)$$

y se encuentra fácilmente, por ejemplo para  $L_x = i\hbar(y\partial_z - z\partial_y)$

$$[\hat{L}_x, \hat{H}] = i\hbar c(\alpha_y \hat{p}_z - \alpha_z \hat{p}_y) \quad (4.8)$$

y, en general,

$$\frac{d\hat{\vec{L}}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\vec{L}}, \hat{H}] = c\vec{\alpha} \wedge \hat{\vec{p}} \quad (4.9)$$

Es decir que  $\hat{\vec{L}}$  no se conserva, no está asociado a una constante de movimiento: ¡De aquí se podría inferir la ausencia de invarianza bajo rotaciones, y esto aún en el caso de la partícula libre!<sup>16</sup>

Por otro lado, en el caso de la partícula libre encontramos 4 soluciones linealmente independientes, dos de energía positiva y dos de energía negativa y que, en lo que respecta a rotaciones, ambos estaban relacionados con los espinores de Pauli que representan a las funciones de onda para partículas de spin 1/2, con las dos componentes distinguiendo a las soluciones con igual energía según el signo de la proyección a lo largo del eje  $z$ .

Lo anterior sugiere que debe existir algún otro operador, ligado al spin, tal que sus autovalores distingan a estas soluciones con la misma energía. Ese operador sumado al del momento orbital  $\hat{\vec{L}}$  debería conmutar con el hamiltoniano. Es decir que con la experiencia adquirida con

---

<sup>16</sup>Nótese que la cantidad  $c\vec{\alpha}$  jugaba el rol de “velocidad” en la interpretación clásica de la corriente de probabilidad de Dirac. Si la fórmula (4.9) fuera clásica, como los vectores velocidad e impulso son paralelos resultaría que  $d\hat{\vec{L}}/dt = 0$ .

la teoría de Pauli para el electrón no relativista es natural adelantar tal operador debe estar asociado con un operador momento angular total  $\hat{\vec{J}}$ , al que deben contribuir el momento angular orbital y el spin. En analogía con el caso no relativista, en que se tiene  $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \frac{\hbar}{2}\sigma$ , es natural definir en el caso relativista

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\Sigma}} \quad (4.10)$$

dado que  $\vec{\Sigma}$ , como fue definida en la ec.(3.23) tiene la forma

$$\hat{\vec{\Sigma}} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

y es el operador asociado al subgrupo de rotaciones del grupo de Lorentz que, para el caso de angulos finitos  $\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ , vimos que actúa sobre los espinores de 4 componentes en la forma

$$\psi \rightarrow \psi^{R(\theta^i)} = \exp\left(i\frac{\theta^i}{2}\Sigma^i\right)\psi \quad (4.12)$$

Hemos propuesto entonces a  $\hat{\vec{\Sigma}}$ , que implementa las rotaciones espaciales sobre los espinores, como el operador asociado al spin de la partícula de masa  $m$ . No es casual que cada bloque de  $\vec{\Sigma}$  corresponda al operador de spin de la teoría de Pauli.

Calculemos el siguiente conmutador en la representación de Dirac en la que la matriz  $\beta$  es diagonal,

$$\frac{\hbar}{2}[\Sigma_x, \hat{H}] = \frac{\hbar}{2}[\Sigma_x, (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2)] = \frac{\hbar}{2}[\Sigma_x, c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}] \quad (4.13)$$

o

$$\frac{\hbar}{2}[\Sigma_x, \hat{H}] = c\frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \end{pmatrix}\right] \quad (4.14)$$

Luego de un poco de álgebra, se obtiene

$$\frac{\hbar}{2}[\Sigma_x, \hat{H}] = -i\hbar c(\alpha_y p_z - \alpha_z p_y) \quad (4.15)$$



que cancela exactamente la contribución del lado derecho de (4.8)

$$[\hat{L}_x, \hat{H}] = i\hbar c(\alpha_y \hat{p}_z - \alpha_z \hat{p}_y)$$

de manera que resulta

$$[\hat{\vec{J}}, \hat{H}] = \left[ \hat{\vec{L}} + \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\Sigma}}, \hat{H} \right] = 0 \quad (4.16)$$

(por supuesto este resultado vale para cualquier representación de las matrices de Dirac).

Vemos entonces del resultado de la ec. (4.16), para el caso del hamiltoniano de una partícula libre, que  $\hat{\vec{J}}$  está asociado con una constante de movimiento del sistema y es por ello natural relacionarlo con un operador de momento angular total. Contiene al momento angular orbital  $\hat{\vec{L}}$  y, en cuanto a  $\hat{\vec{\Sigma}}$ , basta asociarlo al spin de la partícula libre de masa  $m$  que aparece en la ecuación de Dirac para que todo sea consistente.

Los autovalores de  $\hat{\vec{\Sigma}}$  son  $\pm 1/2$  (como lo son los de  $\vec{\sigma}$  por lo que podemos interpretar a las soluciones de la ecuación de Dirac como soluciones con spin  $1/2$ . Nótese que el hecho de que la ecuación de Dirac describa partículas de spin  $1/2$  es una *consecuencia* de la estructura de la ecuación relativista y no una imposición como la que hizo Pauli en el caso de la teoría no-relativista.

Vimos que en el límite no relativista las soluciones con energía positiva coincidían con las de la teoría de Pauli para proyección del spin  $\pm 1/2$ . Lo mismo sucede con las de energía negativa. En el caso límite de una partícula en reposo en que las cuatro autofunciones lo son también de  $\Sigma_z$ , podemos afirmar que estas cuatro soluciones linealmente independientes corresponden a energía positiva y spin  $\pm 1/2$  y energía negativa y spin  $\pm 1/2$ . (ver más adelante la discusión sobre helicidad).

## Paridad

Un cambio  $\mathcal{P}$  de paridad se define a partir de la transformación de coordenadas

$$\begin{array}{ccc} \vec{x} & \xrightarrow{\mathcal{P}} & -\vec{x} \\ t & \xrightarrow{\mathcal{P}} & t \end{array} \quad (4.17)$$

Es decir,  $\mathcal{P}$  corresponde a una reflexión espacial. Vimos que esta transformación de las coordenadas espacio-temporales puede representarse como uno de los elementos del grupo de Lorentz cuando actúa sobre el cuadrivector posición

$$a_\mu{}^\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad x'^\mu = a_\mu{}^\nu x^\nu \quad (4.18)$$

No se trata de una transformación de las catalogadas como “propias” del grupo de Lorentz pues  $\det(a_\mu{}^\nu) = -1$ .

Dada  $(a_\mu{}^\nu)$  según (4.18), trataremos de asociarla con la matriz  $S$  según la cual transforman los espinores utilizando la fórmula (3.8)

$$a^\mu{}_\nu \gamma^\nu = S_P^{-1} \gamma^\mu S_P \quad (4.19)$$

de manera que para  $\mathcal{P}$  se tiene, reemplazando en el lado izquierdo el valor explícito de  $a^\mu{}_\nu$  dado por la ec.(4.18),

$$a_\mu{}^\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= S_P^{-1} \gamma^0 S_P \\ \gamma^i &= -S_P^{-1} \gamma^i S_P \end{aligned} \quad (4.20)$$

o

$$\begin{aligned} S_P \gamma^0 &= \gamma^0 S_P \\ S_P \gamma^i &= -\gamma^i S_P \end{aligned} \quad (4.21)$$

Es decir que la matriz que representa una transformación de paridad para los espinores debe conmutar con  $\gamma^0$  y anticonmutar con las  $\gamma^i$ . Basta entonces una relación de proporcionalidad entre  $S_P$  y  $\gamma^0$  para que esto se cumpla, según vimos al estudiar las propiedades de las matrices de Dirac

$$S_P = \eta_P \gamma^0 \quad (4.22)$$

con  $\eta_P$  por ahora una constante arbitraria.

Con esto, resulta que bajo paridad los espinores transforman según

$$\psi'(x') = S_P \psi(x) = \eta_P \gamma^0 \psi(x) \quad (4.23)$$

Dos transformaciones de paridad deben dejar invariante a la función de onda a menos de un número complejo de módulo 1,

$$\psi''(x'') = S_P \psi'(x') = S_P^2 \psi(x) = \eta_P^2 (\gamma^0)^2 \psi(x) = \eta_P^2 \psi(x) \quad (4.24)$$

Por lo que se puede elegir

$$\eta_P = \pm 1, \pm i \quad (4.25)$$

En caso de elegirse  $\pm i$  ello correspondería a una fase  $\exp(-i\pi)$  indetectable cuando se trata de transformaciones de cantidades medibles, por lo que que el valor de  $\eta_P$  sea imaginario o real no tiene interés físico. Lo que importa es que las componentes  $\psi^+$  y  $\psi^-$  cambian con signo opuesto (en general,  $\gamma^0$ , matriz de  $4 \times 4$  con traza nula, tiene dos autovalores positivos y dos negativos). Por ejemplo, en la representación de Dirac,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

La discusión anterior implica que en el caso de partícula libre las componentes de energía positiva y negativa cambian con signos opuestos y por lo tanto tienen paridad opuesta. Esto tendrá una interpretación clara más adelante.

## Helicidad

Vimos que el spin de las partículas relativistas no se conserva separadamente del momento angular orbital, en particular  $\Sigma_z$  no lo hace aún

en el caso más simple de una partícula libre. Por ello, la proyección del spin sobre un eje dado (al que llamaremos  $z$  por analogía con la dirección que suele elegirse en la mecánica cuántica no-relativista) no servirá para caracterizar un estado dado. Sin embargo la proyección del spin en la dirección del movimiento sí se conserva, como veremos ahora. Indicaremos a tal dirección a la dirección del movimiento como el vector unitario  $\hat{n}$ ,

$$\hat{n} = \frac{\hat{\vec{p}}}{|\vec{p}|} \quad (4.27)$$

donde  $\vec{p}$  es el operador vectorial momento y el denominador indica que cuando se aplique a una función de onda, el resultado  $(\vec{p}\psi)$  debe normalizarse con el autovalor de manera de que  $\hat{n}$  sea un versor. Partiendo de la proyección de  $\hat{\vec{\Sigma}}$  en la dirección de  $\hat{n}$  se tiene

$$\frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\Sigma}} \cdot \hat{n} = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\Sigma}} \cdot \frac{\hat{\vec{p}}}{|\vec{p}|} = \left( \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\Sigma}} + \vec{r} \wedge \hat{\vec{p}} \right) \cdot \frac{\hat{\vec{p}}}{|\vec{p}|} = \hat{\vec{J}} \cdot \hat{n} \quad (4.28)$$

Luego, la cantidad

$$\hat{\Lambda} = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\Sigma}} \cdot \hat{n} \quad (4.29)$$

llamada *helicidad* es un operador que, a diferencia de  $\Sigma_z$ , sí conmuta con el hamiltoniano ya que cada componente de  $\hat{\vec{J}}$  lo hace y, por lo tanto, se conserva.

Los estados de una partícula con valores de helicidad determinados se llaman *estados de helicidad*. Físicamente, la helicidad corresponde al spin de la partícula proyectado sobre la dirección del movimiento.

Ahora bien, es fácil probar que  $\left( \hat{\vec{\Sigma}} \cdot \hat{n} \right)^2 = 1$ . En efecto, este producto escalar puede escribirse como  $\hat{\Sigma}_i \hat{\Sigma}_j n_i n_j$ . Siendo que  $n_i n_j$  es simétrico, al producto solo contribuirá la parte simétrica de  $\hat{\Sigma}_i \hat{\Sigma}_j$ . Recordando que para las matrices de Pauli vale que

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} I + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (4.30)$$

y que eso es lo que resulta en los bloques del producto  $\hat{\Sigma}_i \hat{\Sigma}_j$  el resultado es una matriz cuya diagonal coincide con la de la identidad,

$\text{diag}(\hat{\vec{\Sigma}}_i \hat{\vec{\Sigma}}_j) = \delta_{ij}$ . Luego los autovalores de  $\left(\hat{\vec{\Sigma}} \cdot \vec{n}\right)^2 = (\delta_{ij} n_i n_j)^2 = 1$  y por lo tanto los autovalores de  $\hat{\vec{\Sigma}} \cdot \vec{n}$  son  $\pm 1$  y los de  $\hat{\Lambda}$  son  $\pm \hbar/2$ .

Como la helicidad conmuta con el hamiltoniano, pueden buscarse autofunciones comunes a ambos operadores. Las soluciones de partícula libre, por ejemplo, pueden ser clasificadas según su energía (positiva o negativa) y su helicidad (positiva o negativa). Solo en el caso en que la partícula está en reposo se puede clasificar a los estados utilizando los autovalores de la energía y de  $\Sigma_z$ .

Los autoestados  $\psi_\lambda$  del operador de helicidad  $\Lambda$  para el caso de una onda plana pueden ser calculados a partir de la ecuación

$$\hat{\Lambda} \psi_\lambda = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\Sigma}} \cdot \vec{n} \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda \quad (4.31)$$

Tratemos separadamente a las componentes de energía positiva y negativa del espinor constante  $u$  de la onda plana (para el caso en que la partícula está en reposo y obviando el exponencial oscilatorio temporal),

$$\psi_\lambda^+ = \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_\lambda^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ v^1 \\ v^2 \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

La componente  $u^1$  corresponde a spin hacia arriba, la  $u^2$  hacia abajo y análogamente para las componentes  $v^i$ . Una vez aplicado el operador  $\hat{\Lambda}$  a la función de onda de la partícula libre, tenemos que  $\hat{\vec{n}} \rightarrow \vec{n} = \vec{p}/|\vec{p}|$  con  $\vec{p}$  las componentes espaciales del autovalor del operador  $\hat{p}^\mu$ .

Podemos ahora reescribir la ec.(4.31) tratando a los espinores de dos componentes por separado

$$\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \end{pmatrix} \quad (4.33)$$

$$\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n} \begin{pmatrix} v^1 \\ v^2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} v^1 \\ v^2 \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

Conviene expresar al versor  $\vec{n}$  en término de variables angulares  $(\varphi, \theta)$ ,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,

$$\vec{n} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta) \quad (4.35)$$

con lo que la ec.(4.33) toma la forma

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \exp(-i\varphi) \sin \theta \\ \exp(i\varphi) \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

Los autovalores de la ecuación  $\Lambda\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$  se obtienen fácilmente:

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \cos \theta - \lambda & \frac{\hbar}{2} \exp(-i\varphi) \sin \theta \\ \frac{\hbar}{2} \exp(i\varphi) \sin \theta & -\frac{\hbar}{2} \cos \theta - \lambda \end{pmatrix} = 0 \quad (4.37)$$

o,

$$\lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) = 0 \quad (4.38)$$

por lo que se tiene

$$\lambda = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (4.39)$$

En cuanto a los autovectores asociados, se encuentra

$$u \left[ \lambda = \frac{\hbar}{2} \right] = \begin{pmatrix} \exp(-i\frac{\varphi}{2}) \cos \frac{\theta}{2} \\ \exp(i\frac{\varphi}{2}) \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

$$u \left[ \lambda = -\frac{\hbar}{2} \right] = \begin{pmatrix} -\exp(-i\frac{\varphi}{2}) \sin \frac{\theta}{2} \\ \exp(i\frac{\varphi}{2}) \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

## Partículas de masa cero. Quiralidad

Originariamente la ecuación de Dirac para una partícula de masa  $m$  y spin  $1/2$  se aplicó al estudio de la dinámica cuántica del electrón. Pero también puede aplicarse al estudio de partículas de masa cero y spin  $1/2$ . Hasta fines de la década de 1990 se pensaba que el neutrino, propuesto por Fermi para mantener la conservación de energía-impulso en la desintegración beta, era una partícula de masa cero y spin  $1/2$ . De hecho, en el modelo estándar de las 3 interacciones fundamentales (fuerte, electromagnéticas y débiles) se lo introducía via un lagrangiano de Dirac con masa cero.

Hoy sabemos que el neutrino tiene una masa muy pequeña, pero no nula, del orden de los  $< 0.120 \text{ eV}/c^2 = 2.1410^{-37} \text{ kg}$  (Como comparación, la masa del electrón es  $511 \text{ keV}/c^2 = 9,1093829110^{-31} \text{ kg}$ ).

En realidad el valor consignado para la masa de los neutrinos corresponde a un promedio: los estados de los neutrinos están caracterizados por un número cuántico adicional, llamado de “sabor” (flavor). Resulta entonces que hay 3 estados de neutrinos, el asociado al electrón, al muón y al  $\tau$ . Al propagarse, los neutrinos oscilan cambiando entre estados de diferentes sabores. Lo que se puede medir son diferencias de cuadrados de sus respectivas masas.

Estudiemos ahora la ecuación de Dirac para partículas de masa cero que, hasta 1990, era utilizada para estudiar al neutrino

$$i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial x^\mu}=0 \quad (4.42)$$

Recordemos que la matriz  $\gamma_5$ ,

$$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3, \quad (4.43)$$

una de las 16 matrices independientes del conjunto de  $\Gamma$ 's, anticonmuta con las 4 matrices de Dirac por lo que, si  $\psi$  es una solución de (2.9), entonces  $\psi' = \gamma_5\psi$  también lo es,

$$\gamma_5 i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial x^\mu} = -i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial\gamma_5\psi(\vec{x},t)}{\partial x^\mu} = 0 \quad (4.44)$$

Esto no sucede si  $m \neq 0$  pues el término de masa que aparece en la ecuación de Dirac multiplicado por la matriz  $I$  que conmuta con  $\gamma_5$ .

A partir de las soluciones  $\psi$  y  $\gamma_5\psi$ , pueden construirse soluciones que son autofunciones de  $\gamma_5$  con autovalores  $\pm 1$ . En efecto, sean

$$\psi_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5)\psi, \quad (4.45)$$

que también son soluciones de la ecuación de Dirac. Dado que  $\gamma_5^2 = I$ , es fácil ver que

$$\gamma_5\psi_\pm = \pm\psi_\pm \quad (4.46)$$

Si utilizamos la representación quirál para las matrices de Dirac, resulta que  $\gamma_5$  es diagonal

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

de donde

$$\frac{1}{2}(1 + \gamma_5) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2}(1 - \gamma_5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

de manera que se tiene para cada una de las soluciones

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \chi_+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_- \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

con  $\chi_{\pm}$  espinores de dos componentes. Es decir que para el caso de la ecuación de Dirac con masa cero, podemos trabajar con espinores de dos componentes.

En la representación quirral, en la que se tiene

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -I_{2 \times 2} \\ -I_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (4.50)$$

la ecuaciones devienen

$$\left( -\hbar i \frac{\partial}{\partial x^0} - \hbar i \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \chi_+ = 0, \quad \text{quiralidad} + \quad (4.51)$$

$$\left( \hbar i \frac{\partial}{\partial x^0} - \hbar i \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \chi_- = 0, \quad \text{quiralidad} - \quad (4.52)$$

En lugar de estudiar estas dos ecuaciones, busquemos directamente una solución de onda plana para el espinor de 4 componentes,

$$\psi = \exp(ip_{\mu}x^{\mu})u \quad (4.53)$$

Encontramos

$$\gamma^{\mu}p_{\mu}u = 0 \quad (4.54)$$

o, multiplicando a izquierda por  $\gamma^{\nu}p_{\nu}$  y usando  $\gamma^{\mu}p_{\mu}\gamma^{\nu}p_{\nu} = p_{\mu}p^{\mu}$  se tendrá

$$p^{\mu}p_{\mu}u = \left( \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 \right) u = 0 \quad (4.55)$$

Luego, para que  $u$  sea no trivial se requiere

$$E = \pm c|\vec{p}| \quad (4.56)$$



Si se multiplica la ecuación de Dirac para energía positiva por  $\gamma_5\gamma^0$  se tiene

$$\gamma_5\gamma^0(\gamma^0 p_0 - \vec{\gamma}\cdot\vec{p})\psi_{E_+} = 0 \quad (4.57)$$

o

$$E_+\gamma_5\psi_{E_+} = c\gamma_5\gamma^0\vec{\gamma}\cdot\vec{p}\psi_{E_+} \quad (4.58)$$

Ahora bien, puede comprobarse que

$$\gamma_5\gamma^0\vec{\gamma} = \vec{\Sigma} \quad (4.59)$$

por lo que

$$\gamma_5\psi_{E_\pm} = c\vec{\Sigma}\cdot\frac{\vec{p}}{E_\pm}\psi_{E_\pm} = \pm\vec{\Sigma}\cdot\frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}\psi_{E_\pm} = \pm\Lambda\psi_{E_\pm} \quad (4.60)$$

(En (4.60) hemos incluido también el resultado para el caso de energías negativas). O sea que para partículas de masa nula, helicidad y quiralidad es una misma cosa (a menos de un signo para el caso de energía negativa).

Volvamos a la ecuación de Dirac para espinores de 4 componentes,

$$i\gamma^\mu\partial_\mu\psi = 0 \quad (4.61)$$

o, en forma Hamiltoniana

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = ic\gamma^0\vec{\gamma}\cdot\vec{\nabla}\psi \quad (4.62)$$

Usando la fórmula (4.59)

$$\gamma_5\gamma^0\vec{\gamma} = \vec{\Sigma}$$

y que  $\gamma_5^2 = 1$  podemos escribir

$$\gamma_0\vec{\gamma} = \gamma_5\vec{\Sigma} \quad (4.63)$$

con lo que (4.62) deviene

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = ic\gamma_5\vec{\Sigma}\cdot\vec{p}\psi = \hat{H}\psi \quad (4.64)$$

de manera que el hamiltoniano  $\hat{H}$  tiene la forma

$$\hat{H} = ic\gamma_5 \vec{\Sigma} \cdot \vec{p} = ic\gamma_5 |\vec{p}| \Lambda \quad (4.65)$$

Si ahora planteamos el problema estacionario

$$\hat{H}u = p_0 u \quad (4.66)$$

conviene elegir el eje  $z$  en la dirección de  $\vec{p}$  de manera que solo nos queda  $\Sigma_z$  en  $\hat{H}$ . Se encuentran fácilmente las cuatro soluciones:

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{Energía+ Helicidad + 1} \quad (4.67)$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \text{Energía+ Helicidad - 1} \quad (4.68)$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{Energía- Helicidad + 1} \quad (4.69)$$

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{Energía- Helicidad - 1} \quad (4.70)$$

Experimentalmente, considerando que la masa de los neutrinos es tan pequeña, se ha observado que solo existen neutrinos con quiralidad negativa (o lo que es lo mismo, helicidad negativa, ya que los neutrinos observados tienen energía positiva). Originariamente Weyl propuso estudiarlos usando espinores de dos componentes (llamados desde entonces espinores de Weyl). Pero esta idea era incompatible con la conservación de la paridad (reflexiones espaciales) ya que un cambio de paridad cambia el signo de la helicidad y los espinores de dos componentes correspondían a una única helicidad. Pero en los años 50 se comprobó que los neutrinos intervenían en las interacciones débiles que violan la paridad por lo que esto dejó de ser un problema.

## Masa de Dirac y masa de Majorana

Como vimos, la ecuación de Dirac puede ser derivada de un Lagrangiano escrito en términos de  $\psi$  y  $\bar{\psi}$ , tomadas estas funciones de onda como independientes

$$\mathcal{L}_D = \bar{\psi} \left( \hbar i \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \psi \quad (4.71)$$

ya que las ecuaciones de Euler Lagrange para  $\bar{\psi}$  no dependen de  $\partial_\mu \bar{\psi}$ ,

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \left( \frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial x^\mu \psi} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial \bar{\psi}} \Rightarrow 0 = \left( \hbar i \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} - mc \right) \psi \quad (4.72)$$

El término de masa que hemos incluido en el Lagrangiano (2.13) tiene la forma

$$\mathcal{L}_m = -m_D c \bar{\psi} \psi \quad (4.73)$$

A este término se lo suele llamar “masa de Dirac” y de ahí que hayamos adoptado la notación  $m_D$ .

En la base quiral (o de Weyl), a los espinores de Dirac podemos escribirlos así:

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi_a \\ \chi^{\dot{a}} \end{pmatrix} \quad (4.74)$$

Por convención a estos dos espinores de Weyl de dos componentes se los anota como  $\xi_a$  y  $\chi^{\dot{a}}$ , ( $a, \dot{a} = 1, 2$ ), y se los conoce como espinores “no-punteado” y “punteado” respectivamente. (Algunos autores utilizan el punto sobre el espinor y no sobre el índice del espinor).

$$\psi^\dagger = (\xi_a^*, \chi^{*\dot{a}}), \quad \bar{\psi} = \psi^\dagger \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix} = (-\chi^{*\dot{a}}, -\xi_a^*) \quad (4.75)$$

Puede verse que bajo transformaciones de Lorentz los espinores de dos componentes  $\xi$  y  $\chi$  transforman según

$$\begin{aligned} \xi_a &\rightarrow \xi'_a = M_a^{\ b} \xi_b \\ \chi_{\dot{a}} &\rightarrow \chi'_{\dot{a}} = M_{\dot{a}}^{*b} \chi_b \end{aligned} \quad (4.76)$$

Las matrices de  $2 \times 2$   $M$  y  $M^*$ , con  $\det M = \det M^* = 1$  dan representaciones inequivalentes del grupo  $SL(2, C)$  (ver la discusión luego de la fórmula (3.28)). De las fórmulas (4.76) se puede inferir que  $\xi_{\dot{a}} \sim \xi_{\dot{a}}^*$ .

Las proyecciones quirales del fermión de Dirac se obtienen según vimos

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5)\psi \quad (4.77)$$

de manera que los espinores  $\psi_{\mp}$  pueden escribirse en términos de  $\xi$  y  $\chi$  como

$$\begin{aligned} \psi_+ &= \frac{1}{2}(1 + \gamma_5)\psi = \begin{pmatrix} \xi_a \\ 0 \end{pmatrix} ; & \bar{\psi}_+ &= \bar{\psi} \frac{1}{2}(1 + \gamma_5) = (0 \quad -\xi_a^*) \\ \psi_- &= \frac{1}{2}(1 - \gamma_5)\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi^{\dot{a}} \end{pmatrix} ; & \bar{\psi}_- &= \bar{\psi} \frac{1}{2}(1 - \gamma_5) = (-\chi^{*\dot{a}} \quad 0) . \end{aligned} \quad (4.78)$$

El término de masa de Dirac toma entonces la forma

$$\mathcal{L}_{\text{Dirac}} = m_D c (\bar{\psi}_+ \psi_- + \bar{\psi}_- \psi_+) = -m_D c (\xi_a^* \chi^{\dot{a}} + \chi^{*\dot{a}} \xi_a) . \quad (4.79)$$

Ahora bien, la ecuación (4.76) indica que los espinores punteados están ligados a los complejos conjugados de los sin puntear, pudiendo elegirse la fase que los relaciona los conecta de manera que valga que

$$\xi_a^* = -\xi_{\dot{a}} ; \quad \chi_{\dot{a}}^* = -\chi_a , \quad (4.80)$$

Puede entonces escribirse al término de masa de Dirac en la forma

$$\mathcal{L}_{\text{Dirac}} = -m_D c (\xi_{\dot{a}} \chi^{\dot{a}} + \chi^a \xi_a) . \quad (4.81)$$

Hay una opción más simple que la de esta ecuación para escribir un término de masa: consiste en no utilizar dos espinores de dos componentes sino un único de espinor de 4-componentes, llamado **espinor de Majorana** en términos de solo un espinor de Weyl, digamos  $\xi$ , y su complejo conjugado  $\dot{\xi}$ :

$$\psi_M = \begin{pmatrix} \xi_a \\ \xi^{\dot{a}} \end{pmatrix} . \quad (4.82)$$

Veremos más adelante, cuando definamos la operación de conjugación de carga eléctrica, que los espinores de Majorana son espinores que coinciden con su conjugado de carga. El término de masa resultante, que se suele llamar “de Majorana” toma la forma

$$\mathcal{L}_{\text{Majorana}} = -\frac{1}{2}m_M \overline{c\psi_M} \psi_M \quad (4.83)$$

Este término resulta contener el producto de  $\xi$  con sí mismo y de  $\bar{\xi}$  con sí mismo, como puede verse recordando que  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_0$  y que en la representación quirral se tiene

$$\gamma^0 = -\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad (4.84)$$

Con esto  $\mathcal{L}_{\text{Majorana}}$  toma la forma anunciada

$$\mathcal{L}_{\text{Majorana}} = \frac{1}{2}m_M(\dot{\xi}_a \dot{\xi}^a + \xi^a \xi_a) . \quad (4.85)$$

Terminaremos esta discusión distinguiendo los tres contextos en que se utiliza el nombre de Majorana, el genial físico italiano que desapareciera misteriosamente a los 32 años (y que quizás fuera visto en Buenos Aires en la década de 1945...).

- representación de Majorana en el espacio de espinores
- término de masa de Majorana vs término de masa de Dirac
- partículas de Majorana vs partículas de Dirac (la de Majorana es su propia antipartícula, ver más adelante)

Al día de hoy no se tiene certeza de que alguna partícula elemental sea un fermión de Majorana lo que haría que fuera su propia antipartícula. Sin embargo, en el caso del neutrino, el asunto no está definitivamente cerrado: puede que sea un fermión de Dirac, puede que sea uno de Majorana. La explicación más aceptable de la pequeña masa de los neutrinos es a través de un mecanismo llamado de “balancín” (seesaw) basado en oscilaciones entre estados de neutrinos livianos y pesados. Para este modelo es necesario que estos hipotéticos neutrinos sean fermiones de Majorana.

## Una interpretación física de las matrices de Dirac

Vimos que las componentes espaciales de la corriente de probabilidad que resulta de la ecuación de Dirac tienen la forma

$$\frac{1}{c}\vec{J} = \bar{\psi}\vec{\gamma}\psi = \psi^\dagger\gamma^0\vec{\gamma}\psi = \psi^\dagger\vec{\alpha}\psi \quad (4.86)$$

o sea que

$$\vec{J}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t)^\dagger c \vec{\alpha} \psi(\vec{x}, t) \quad (4.87)$$

y recordando que  $\psi(\vec{x}, t)^\dagger \psi(\vec{x}, t)$  era la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en el punto  $\vec{x}$  en el instante  $t$

En cuanto a la corriente, la ecuación (4.87) sugeriría que  $c\vec{\alpha}$  juega el papel de la velocidad clásica con que se mueve la partícula. Esta interpretación se ve reforzada por el siguiente argumento: en el esquema de Heisenberg, la evolución temporal de un operador  $\hat{A}$  está regida por la ecuación

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}] \quad (4.88)$$

con  $\hat{H}$  el hamiltoniano del sistema. Vimos que el hamiltoniano asociado con la ecuación de Dirac está dado por:

$$\hat{H} = c \frac{\hbar}{i} \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \gamma^0 mc^2 \quad (4.89)$$

con lo que si tomamos  $\hat{A} = \vec{x}$  tendremos

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = c[\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla}, \vec{x}] = c\vec{\alpha} \quad (4.90)$$

Por supuesto, esto debe interpretarse en el sentido de valores medios,

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}, t) \vec{x} \psi(\vec{x}, t) = c \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}, t) \vec{\alpha} \psi(\vec{x}, t) \quad (4.91)$$

y confirma la relación entre las matrices  $\vec{\alpha}$  y la velocidad de la partícula.

Ahora bien, como  $(\alpha^i)^2 = 1$ , los autovalores de  $\alpha^i$  son  $\pm 1$  y los autovalores de cada componente de la “velocidad”, según la fórmula (4.90)

serían  $\pm c$ , en clara contradicción con el hecho de que en la mecánica relativista una partícula masiva no puede viajar a la velocidad de la luz. Además, dado que  $[\alpha^i, \alpha^j] \neq 0$ , de hacerse una interpretación ingenua de la ecuación (4.90), se tendría que no es posible medir las tres componentes de la velocidad simultáneamente.

Volvamos a utilizar la ecuación de Heisenberg (4.88) pero ahora tomando  $\hat{A} = \alpha_1 = \alpha_x$ . Se tiene

$$\frac{d\alpha_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \alpha_x] = \frac{2}{i\hbar}(cp_x - \alpha_x \hat{H}) = \frac{2i}{\hbar}(\hat{H}\alpha_x - cp_x) \quad (4.92)$$

Para escribir esta fórmula hemos utilizado que

$$\begin{aligned} \hat{H}\alpha_x &= c\vec{p} \cdot \vec{\alpha}\alpha_x + \beta\alpha_x mc^2 \\ &= cp_x + cp_y\alpha_y\alpha_x + cp_z\alpha_z\alpha_x + \beta\alpha_x mc^2 \\ &= 2cp_x - c\alpha_x(p_x\alpha_x + p_y\alpha_y + p_z\alpha_z - \beta mc^2) \end{aligned} \quad (4.93)$$

de donde

$$\hat{H}\alpha_x = 2cp_x - \alpha_x \hat{H} \quad (4.94)$$

y

$$[\hat{H}, \alpha_x] = 2(cp_x - \alpha_x \hat{H}) \quad (4.95)$$

Tanto  $\hat{H}$  como  $p_x$  son independientes del tiempo por lo que, derivando otra vez se tiene

$$\frac{d^2\alpha_x}{dt^2} = \frac{2}{i\hbar} \frac{d\alpha_x}{dt} \hat{H} = -\frac{2}{i\hbar} \hat{H} \frac{d\alpha_x}{dt} \quad (4.96)$$

Aquí hemos usado la fórmula (4.94) y que  $d\langle p_x \rangle/dt = 0$ . Imponiendo una condición inicial,

$$\left. \frac{d\alpha_x}{dt} \right|_{t=0} = \alpha_x^0 \quad (4.97)$$

se puede integrar (4.96) y se obtiene

$$\frac{d\alpha_x}{dt} = \alpha_x^0 \exp\left(-\frac{2i\hat{H}t}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{2i\hat{H}t}{\hbar}\right) \alpha_x^0 \quad (4.98)$$

Luego, usando (4.92),

$$\alpha_x \hat{H} = \frac{i\hbar}{2} \alpha_x^0 \exp\left(-\frac{2i\hat{H}t}{\hbar}\right) + cp_x \quad (4.99)$$

Si multiplicamos por  $c\hat{H}^{-1} = \hat{H}/E^2$  a derecha se tiene

$$\frac{dx}{dt} = \frac{i\hbar c}{2}\alpha_x^0 \exp\left(-\frac{2i\hat{H}t}{\hbar}\right) \frac{\hat{H}}{E^2} + c^2 p_x \frac{\hat{H}}{E^2} \quad (4.100)$$

Vemos que la velocidad corresponde a un movimiento oscilatorio con frecuencia  $\omega = 2E/\hbar$ , que como mínimo corresponde a  $\omega = 2mc^2/\hbar$ . Este movimiento, bautizado por Schrödinger [8] como *Zitterbewegung* (del alemán, *zitter*, tembloroso, trémulo y *bewegung*, movimiento), no puede ser observado en la práctica. Hay una manera alternativa de tratar al operador posición que evita este problema [9].





## Clase 5

### La ecuación de Dirac en presencia de un campo electromagnético

Hasta aquí hemos considerado la ecuación de Dirac para una partícula de spin 1/2 libre, que cuando se incluye un término de masa describe adecuadamente la dinámica de un electrón libre. Nos interesa por supuesto estudiar el caso en que electrón cuántico interactúa con un campo electromagnético clásico  $(\vec{E}, \vec{B})$ .

Sabemos que los campos electromagnéticos [ueden ligarse a los llamados “campos de gauge”  $\phi, \vec{A}$  según las relaciones

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A} \quad (5.1)$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (5.2)$$

Ya en el caso de la mecánica cuántica no relativista las reglas de cuantificación canónica se expresaban en términos de los “campos de gauge” que incluyen al potencial vector  $\vec{A}$  y al escalar  $\phi$ .

A estos cuatro campos se lo puede escribir en términos de un cuadrivector  $A_\mu = (\phi, A_i)$ ,  $\mu = 0, 1, 2, 3$ ,  $i = 1, 2, 3$ , de manera que los campos eléctrico  $E_i$  y magnético  $B_i$  pueden expresarse de forma compacta en términos del “tensor de campo”  $F_{\mu\nu}$ ,

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (5.3)$$

tal que

$$B^i = \frac{1}{2} \varepsilon^{ijk} F_{jk} \quad (5.4)$$

$$E^i = F^{0i} \quad (5.5)$$

Las reglas de cuantificación canónica que para una partícula libre no relativista tomaban la forma

$$\begin{aligned} \vec{p} &\rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \\ E &\rightarrow E - e\phi \end{aligned} \quad (5.6)$$

con  $e$  la carga eléctrica.

Las reglas de cuantificación (5.6) en presencia de campos electromagnéticos, devienen, en términos del cuadrivector  $A_\mu$  más compactas:

$$\hat{p}^\mu = \hbar i \frac{\partial}{\partial x_\mu} \rightarrow \hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \quad (5.7)$$

Notemos que al definir el tetravector contravariante  $p^\mu$ , sus componentes espaciales aparecen con el factor  $\hbar i$  y no con el habitual  $\hbar/i$  con el que se escribe en el caso no relativista la regla de cuantificación canónica. El cambio de signo implícito se debe a que hemos adoptado una métrica negativa para las componentes espacio-espacio de  $g_{\mu\nu}$  por lo que hay un cambio de signo entre componentes contravariantes y covariantes del (tri)vector impulso.

Partiendo entonces de la ecuación de Dirac para el caso de un electrón de masa  $m$ , libre,

$$\hbar i \gamma^\mu \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} - mc \psi = (\gamma_\mu \hat{p}^\mu - mc) \psi = 0 \quad (5.8)$$

y aplicando las reglas (5.7) la ecuación de Dirac en presencia de un campo electromagnético toma la forma

$$\left( \gamma_\mu \left( \hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) - mc \right) \psi = 0 \quad (5.9)$$

Para ver cómo se relaciona esta ecuación con la de Klein-Gordon para una partícula cargada de masa  $m$  aplicamos a la ecuación anterior el operador diferencial  $\gamma_\nu \left( \hat{p}^\nu - \frac{e}{c} A^\nu \right) + mc$  y obtenemos

$$\left( \gamma_\nu \gamma_\mu \left( \hat{p}^\nu - \frac{e}{c} A^\nu \right) \left( \hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) - m^2 c^2 \right) \psi = 0 \quad (5.10)$$

$$\left(\gamma_\nu \gamma_\mu \left(\hat{p}^\nu - \frac{e}{c} A^\nu\right) \left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu\right) - m^2 c^2\right) \psi = 0$$

Podemos descomponer al producto  $\gamma^\nu \gamma^\mu$  en sus partes simétrica y antisimétrica,

$$\gamma_\nu \gamma_\mu = g_{\nu\mu} - i\sigma_{\nu\mu} \quad (5.11)$$

donde hemos usado

$$g_{\nu\mu} = \frac{1}{2}(\gamma_\nu \gamma_\mu + \gamma_\mu \gamma_\nu) \quad (5.12)$$

y definido

$$\sigma_{\nu\mu} = \frac{i}{2}(\gamma_\nu \gamma_\mu - \gamma_\mu \gamma_\nu) \equiv 2\Sigma^{\mu\nu} \quad (5.13)$$

con  $\Sigma^{\mu\nu}$  los generadores de las transformaciones de Lorentz (rotaciones + boosts). Con esto, y usando que

$$\hat{p}_\mu A_\nu f(x) = \frac{\hbar}{i} \partial_\mu A_\nu f(x) + A_\nu \hat{p}_\mu f(x) \quad (5.14)$$

se obtiene fácilmente

$$\left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu\right) \left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu\right) \psi - \frac{e\hbar}{2c} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \psi - m^2 c^2 \psi = 0 \quad (5.15)$$

El primero y tercer término de esta ecuación coinciden con la ecuación de Klein-Gordon para una partícula de masa  $m$  y carga  $e$ , solo que, en lugar de corresponder a una partícula escalar (compleja, como resulta natural para el caso de campos escalares cargados<sup>17</sup>), el operador de Klein-Gordon actúa en este caso sobre un espinor de 4 componentes. El segundo término, que es un efecto puramente cuántico (pues se anula cuando  $\hbar \rightarrow 0$ ) es propio de la formulación de Dirac y veremos que da cuenta de la interacción de los campos electromagnéticos con, en particular, el spin. Su aparición se relaciona con el hecho de que la función de onda de Dirac es un espinor de 4 componentes.

---

<sup>17</sup>Solo si el campo escalar es complejo puede extenderse la invarianza de gauge del electromagnetismo,  $A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \Lambda$  de manera de incluir a los escalares, definiendo su ley de transformación como  $\phi \rightarrow \exp[(ie)/(\hbar c)\Lambda]\phi$ . Queda claro que la carga del campo escalar es  $e$ , la constante que aparece en los términos de interacción  $A_\mu \phi$  y  $A_\mu A^\mu \phi$  entre los campos  $A_\mu$  y  $\phi$ .

Para estudiar los estados estacionarios de la ecuación (5.15), proponemos factorizar la dependencia temporal como habitualmente hacemos,

$$\psi(\vec{x}, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \begin{pmatrix} \psi^1(\vec{x}) \\ \psi^2(\vec{x}) \\ \psi^3(\vec{x}) \\ \psi^4(\vec{x}) \end{pmatrix} \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \psi(\vec{x}) . \quad (5.16)$$

Reemplazado este ansatz en (5.15),

$$\left(\hat{p}^\mu - \frac{e}{c}A^\mu\right) \left(\hat{p}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right) \psi - \frac{e\hbar}{2c} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \psi - m^2 c^2 \psi = 0$$

se tiene

$$\left((E - e\phi)^2 - (c\vec{p} - e\vec{A})^2 + e\hbar c(\vec{\Sigma} \cdot \vec{B} - i\vec{\alpha} \cdot \vec{E})\right) \psi(\vec{x}) = m^2 c^4 \psi(\vec{x}) \quad (5.17)$$

con  $\hat{\vec{\Sigma}}$  la matriz de spin introducida en la clase anterior (ec.(4.11))

$$\hat{\vec{\Sigma}} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

## El límite no-relativista

Para estudiar el límite no-relativista de la ecuación de Dirac en un campo electromagnético nos quedaremos con el primer orden en  $v^2/c^2$  en la ecuación (5.17). Separaremos ahora la energía en reposo  $mc^2$  de la energía total  $E$  escribiendo

$$E = E' + mc^2 \quad (5.19)$$

con  $E' \ll mc^2$ . También supondremos un campo  $\phi$  débil,  $e\phi \ll mc^2$ . Con esto, el primer término en (5.14), desarrollando el cuadrado y despreciando el término  $E'^2$ , toma la forma

$$(E - e\phi)^2 \approx 2mc^2(E' - e\phi) + m^2 c^4 \quad (5.20)$$

con lo que la ecuación (5.14) puede escribirse en este límite,

$$\left( \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\Sigma} \cdot \vec{B} + i \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\alpha} \cdot \vec{E} \right) \psi = E' \psi \quad (5.21)$$

Al orden en que trabajamos, se puede despreciar el término proporcional al campo eléctrico  $\vec{E}$ . En efecto, vimos que  $|\vec{\alpha}|c \approx |\vec{v}|$  o sea que  $\alpha \approx v/c$ . Pero además tenemos

$$e\phi \approx |e\vec{E}|a \approx e|\vec{E}|\frac{\hbar}{p} \quad (5.22)$$

donde hemos llamado  $a$  a una distancia cuántica típica, ligada a  $p$  por la relación de incerteza,  $a \sim \hbar/p$ . O sea que se tiene,

$$\frac{e\hbar}{2mc} \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{E}}{e\phi} \approx \frac{\hbar}{2mc} \frac{v}{c} \frac{E}{E} \frac{p}{\hbar} = \frac{v^2}{2c^2} \quad (5.23)$$

Entonces, en la aproximación no relativista tendremos

$$\left( \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\Sigma} \cdot \vec{B} \right) \psi = E' \psi \quad (5.24)$$

que no es otra cosa que la ecuación de Pauli para el electrón no-relativista<sup>18</sup> sólo que el término que había tenido que ajustarse de manera *ad hoc* en el caso no relativista, por provenir de un análisis semiclásico, aquí aparece automáticamente. Si  $\vec{\mu}_s$  es el momento magnético del electrón y  $\beta = e\hbar/(2mc)$  el magnetón de Bohr, se tiene la relación

$$\vec{\mu}_s = \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} = \beta \vec{\sigma} \quad (5.25)$$

Si aceptamos por el momento que, como en el caso de la ecuación para la partícula libre las componentes se separan en grandes y pequeñas, tendremos para las grandes exactamente la ecuación de Pauli, con una relación entre momento magnético y spin dada por

$$\frac{\mu_s}{s} = \frac{e}{mc} = 2 \frac{\beta}{\hbar} \quad (5.26)$$

---

<sup>18</sup>Recordemos que en las soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre las componentes de energía negativa eran del orden ( $O(v^2/c^2)$ )

que es el doble que la que resulta en el análisis clásico de la relación entre momento angular orbital y momento magnético,

$$\frac{\mu_l}{l} = \frac{e}{2mc} = \frac{\beta}{\hbar} \quad (5.27)$$

Pero justamente el factor 2 en (5.26) había debido incluirse *manu militari* en la formulación de Pauli del electrón no relativista para reproducir los resultados experimentales de la época. En otras palabras, debía postularse un factor llamado giromagnético, que se denota como  $g$ , que multiplica la fórmula clásica (5.27),

$$\frac{\mu_s}{s} = g \frac{\beta}{\hbar} \quad (5.28)$$

Se establecía entonces, para lograr acuerdo con la experiencia, que  $g = 2$ . La formulación de Dirac, en cambio, no necesita postular  $g = 2$  sino que tal valor resulta una predicción. Esto fue considerado un triunfo importante de la formulación de Dirac.

Sin embargo, si buscamos hoy en una tabla de valores experimentales, obtenidos con mucha mejor precisión que en los años 30, veremos que se consigna para el factor giromagnético del electrón:

$$g_{ex} = 2 \times (1.001\,159\,652\,193 \pm .000\,000\,000\,004)$$

¿Quiere decir esto que la teoría de Dirac del electrón es incorrecta? La respuesta es que en realidad, la teoría de Dirac es incompleta, en el sentido de que describe la dinámica cuántica del electrón en el campo electromagnético *clásico* del núcleo (en el caso de la descripción de un átomo).

Es recién cuando se hace un tratamiento completamente cuántico, tanto para el electrón como para el campo electromagnético asociado al campo de gauge  $A_\mu$  en el que se mueve, que el valor predicho por la ecuación de Dirac recibe correcciones (llamadas radiativas). En lo que se considera uno de los grandes triunfos de la electrodinámica cuántica (la teoría cuántica de los campos electromagnéticos asociados al núcleo y el electrón) el valor teórico que se calcula en teoría de perturbaciones resulta

$$g_{teor} = 2 \times (1.001\,159\,652\,459 \pm .000\,000\,000\,123)$$

Quienes pretendan saber cómo se llega a este valor teórico tienen cita con algún curso de teoría cuántica de campos.

Dejemos ahora a la ecuación de Klein-Gordon que es obedecida por las soluciones de la ecuación de Dirac y analicemos directamente a esta última *ab initio*

$$\left( \gamma_\mu \left( \hat{p}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) - mc \right) \psi = 0 . \quad (5.29)$$

Para estudiar la manera en que las componentes “grandes” ( $\psi_A$ ) y “pequeñas” ( $\psi_B$ ) se separan, vamos a considerar una representación explícita para las matrices  $\gamma^\mu$ . Conviene elegir la representación de Dirac que lleva a la ecuación (multiplicando por  $\gamma^0 = \beta$  y recordando que  $\vec{\gamma} = \beta \vec{\alpha}$ )

$$\left[ \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \vec{\sigma}(c\vec{p} - e\vec{A}) + \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} mc^2 \right] \begin{pmatrix} \psi^A \\ \psi^B \end{pmatrix} = (E - e\phi) \begin{pmatrix} \psi^A \\ \psi^B \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

Este sistema es equivalente al sistema acoplado para los espinores de dos componentes  $\psi^A$  y  $\psi^B$

$$\begin{aligned} \vec{\sigma}(c\vec{p} - e\vec{A})\psi^B + mc^2\psi^A &= (E - e\phi)\psi^A \\ \vec{\sigma}(c\vec{p} - e\vec{A})\psi^A - mc^2\psi^B &= (E - e\phi)\psi^B \end{aligned} \quad (5.31)$$

Despejamos de la segunda ecuación  $\psi^B$ ,

$$\psi^B = (E - e\phi + mc^2)^{-1} \vec{\sigma}(c\vec{p} - e\vec{A})\psi^A \quad (5.32)$$

o, escribiendo nuevamente  $E = E' + mc^2$ ,

$$\psi^B = (E' - e\phi + 2mc^2)^{-1} \vec{\sigma}(c\vec{p} - e\vec{A})\psi^A \quad (5.33)$$

Dado que el límite no relativista corresponde a que

$$E' \ll mc^2 \quad e\phi \ll mc^2 \quad \vec{p} \approx m\vec{v} \quad (5.34)$$

se tiene que

$$\psi^B \sim \mathcal{O}\left(\frac{v}{c}\right) \psi^A \quad (5.35)$$

Es decir que la solución de 4 componentes tiene dos grandes componentes  $\psi^A$  y dos pequeñas componentes  $\psi^B$  como sucedía para la



partícula libre. Además, si reemplazamos la expresión exacta para  $\psi^B$  dada por (5.33) en la primera de las ecuaciones (5.31), tendremos, luego de un poco de arreglo (para simplificar los cálculos nos restringiremos al caso puramente eléctrico,  $\vec{A} = 0$ , y denotaremos  $e\phi = V$ )

$$\left( \frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{2m} \left( 1 + \frac{E' - V}{2mc^2} \right)^{-1} \vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}} + V \right) \psi^A = E' \psi^A \quad (5.36)$$

Si guardamos sólo el primer término en la expansión en potencias de  $(E' - V)/2mc^2$  tendremos

$$\left( 1 + \frac{E' - V}{2mc^2} \right)^{-1} \approx 1 - \frac{E' - V}{2mc^2} \quad (5.37)$$

Notemos además que

$$\vec{p}V = -i\hbar \vec{\nabla}V + V\vec{p} \quad (5.38)$$

y que, dados dos vectores  $\vec{a}$  y  $\vec{b}$ , las matrices de Pauli satisfacen

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\vec{\sigma} \cdot \vec{a} \wedge \vec{b}, \quad (5.39)$$

al aplicar lo anterior al primer término del lado derecho de (5.38) tendremos

$$\hat{\vec{p}}V = -i\hbar \vec{\nabla}V + V\hat{\vec{p}} = -i\hbar (\vec{\nabla}V \cdot \hat{\vec{p}}) + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla}V \times \hat{\vec{p}}) \quad (5.40)$$

Para el caso de un potencial central, es decir que tiene simetría esférica,  $V = V(r)$  y la ecuación (5.40) deviene

$$-\hbar^2 \frac{dV}{dr} \frac{d}{dr} + \hbar \vec{\sigma} \cdot \frac{dV}{dr} \frac{\vec{r}}{r} \times \hat{\vec{p}} = -\hbar^2 \frac{dV}{dr} \frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \frac{dV}{dr} \hat{\vec{s}} \cdot (\vec{r} \times \hat{\vec{p}}) \quad (5.41)$$

o

$$-\hbar^2 \frac{dV}{dr} \frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \frac{dV}{dr} \hat{\vec{s}} \cdot \hat{\vec{L}} \quad (5.42)$$

En tal caso, usando (5.38)-(5.39) la ecuación (5.36) toma la forma

$$\left( \left( 1 - \frac{E' - V}{2mc^2} \right) \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{\vec{s}} \cdot \hat{\vec{L}} \right) \psi^A - \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial \psi^A}{\partial r} = E' \psi^A \quad (5.43)$$

donde  $\vec{s} = (\hbar/2)\vec{\sigma}$ .

Finalmente, recordando que  $E'$  es lo que queda de la energía al sustraer la energía en reposo  $mc^2$  podemos escribir,

$$E' = E - mc^2 = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} - mc^2 \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{(p^2)^2}{8m^3 c^2} \quad (5.44)$$

y finalmente se tiene

$$\left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V - \frac{(\hat{p}^2)^2}{8m^3 c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{s} \cdot \vec{L} \right) \psi^A = E' \psi^A \quad (5.45)$$

Notemos que los dos primeros términos del lado izquierdo son los términos usuales de la ecuación de Schrödinger no relativista. El tercero corresponde al segundo orden de la expansión de la energía  $E'$  en potencias de  $p^2$ ,

El cuarto término no tiene análogo clásico mientras que el quinto término corresponde al acoplamiento spin-órbita con el adecuado factor  $1/2$  (factor de Thomas) que debía ser incluido heurísticamente cuando se partía de una analogía clásica para justificarlo en el caso no relativista.

Si bien no trataremos de resolver esta ecuación, conviene señalar la manera perturbativa de hacerlo: se resuelve la ecuación no relativista en presencia del potencial, sin incluir al término en  $p^4$  ni a los términos que contienen derivadas de  $V$ . Obtenidas las dos componentes de  $\psi^A$  para este problema, se forman combinaciones lineales que sean autofunción de  $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{s}^2$  y luego se considera a los tres términos no incluidos como perturbaciones.



# Clase 6

## Invarianza de gauge

La ecuación de Dirac (5.8) para un electrón en un campo electromagnético asociado a un campo de gauge  $A_\mu = (\phi, \vec{A})$ ,

$$\left( \gamma^\mu \left( \hbar i \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) - mc \right) \psi = 0 \quad (6.1)$$

tiene una invarianza muy importante, llamada de gauge, asociada con las transformaciones de gauge que dejan invariante al tensor de campo electromagnético. En efecto, recordemos que  $F_{\mu\nu}$ ,

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (6.2)$$

permanece invariante ante el cambio del campo de gauge  $A_\mu$

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu = A_\mu(x) + \partial_\mu \Lambda(x) \quad (6.3)$$

con  $\Lambda(x)$  una función real arbitraria. Que  $F_{\mu\nu}$  permanezca invariante frente a las transformaciones de gauge (6.3) quiere decir que ni la medida experimental del campo eléctrico ni la del magnético, que son las cantidades físicas justamente medibles detectan si trabajamos con  $A_\mu$  o con  $A'_\mu$ : Recordemos que

$$\begin{aligned} B^i[\vec{A}] &= \frac{1}{2} \epsilon^{ijk} F_{jk}[\vec{A}] \\ E^i[\phi, \vec{A}] &= F^{0i}[\phi, \vec{A}] \end{aligned}$$

La invariancia de estos campos frente a transformaciones de gauge como la (6.3) significa entonces que

$$B[\vec{A}'] = B[\vec{A}] , \quad E[\phi'; \vec{A}'] = E[\phi; \vec{A}] \quad (6.4)$$

donde

$$\begin{aligned}\vec{B} &= \vec{\nabla} \wedge \vec{A} \\ \vec{E} &= -\vec{\nabla}\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}\end{aligned}$$

Esta invariancia implica que los campos  $A_\mu$  y sus transformados de gauge son todos admisibles para describir a los campos eléctrico y magnético. Por ello, según el problema que enfrentemos podemos trabajar usando "un dado gauge" u otro. Por ejemplo podemos elegir una función  $\Lambda$  tal que anule la componente  $A_0$  simplemente utilizando un  $\Lambda$  tal que  $\partial_0 \Lambda$  cancele ese  $A_0$ . Ese gauge se conoce como "gauge de Coulomb". En otras circunstancias puede convenir elegir  $\Lambda$  tal que  $\partial^\mu A'_\mu = 0$  (gauge de Lorenz<sup>19</sup>).

Ahora bien, podría suceder que al interactuar estos campos con un electrón descrito por una función de onda que obedece la ecuación de Dirac, la función de onda detectara de una manera medible el cambio. Veremos que en general este no es el caso<sup>20</sup>.

Para analizar lo anterior, comencemos por notar que al cambiar  $A_\mu$  por  $A'_\mu$  en la ecuación de Dirac, se agrega un término (el gradiente de  $\Lambda$ ) que en principio cambia a la ecuación. Sin embargo, es fácil ver que si la transformación (6.3) va acompañada de un cambio adecuado en la fase de la función de onda  $\psi$ , la ecuación retoma su forma inicial.

Consideremos entonces el conjunto de transformaciones de gauge

$$\begin{aligned}A_\mu(x) &\rightarrow A'_\mu = A_\mu(x) + \partial_\mu \Lambda(x) \\ \psi(x) &\rightarrow \psi'(x) = \exp\left(-i \frac{e}{\hbar c} \Lambda(x)\right) \psi(x) \\ \bar{\psi}(x) &\rightarrow \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x) \exp\left(i \frac{e}{\hbar c} \Lambda(x)\right)\end{aligned}\tag{6.5}$$

Es fácil ver que ante este cambio, la ecuación (6.1) tiene la misma forma cuando es escrita en términos de los campos transformados según (6.5)

---

<sup>19</sup>Este Lorenz no es el Lorentz de las transformaciones relativistas sino Ludvig Lorenz, un físico y matemático danés

<sup>20</sup>Ver sin embargo el experimento de Aharanov-Bohm para una descripción más precisa de este asunto, por ejemplo en los apuntes de mi curso de Mecánica Cuántica I.

que cuando lo es en términos de los campos sin transformar. Es decir, la ecuación de Dirac es invariante frente a las transformaciones de gauge completas (6.5) que incluyen al campo de gauge y a la función de onda  $\psi$  que describe a la materia.

$$\left(\gamma^\mu \left(\hbar i \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu\right) + mc\right) \psi = 0 \rightarrow \left(\gamma^\mu \left(\hbar i \partial_\mu - \frac{e}{c} A'_\mu\right) + mc\right) \psi' = 0 \quad (6.6)$$

Notemos que en la ec.(6.5) hemos incluido la ley de transformación de  $\bar{\psi}$  que por un lado no aparece en la ecuación de Dirac y, por el otro, podría “deducirse” a partir de la fórmula que relaciona  $\bar{\psi}$  con  $\psi$ ,  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ . Sucede que cuando se trata a  $\psi$  como un campo cuántico en un pie de igualdad con  $A_\mu$  (es decir, se entra en el dominio de una de las llamadas “teorías de campos cuánticos”, en este caso la electrodinámica cuántica) resulta que  $\bar{\psi}$  debe tomarse como un campo “independiente” de  $\psi$ . De hecho, esto puede verse ya a nivel de mecánica cuántica, si pretendemos escribir una acción de la cual derive la ecuación de Dirac como ecuación de Euler Lagrange. De manera parecida a lo que sucede con el mismo problema para la ecuación de Schrödinger, es natural tomar como Lagrangiano

$$S = \int d^4x L = \int d^4x \bar{\psi}(x) \left(\gamma^\mu \left(\hbar i \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu(x)\right) + mc\right) \psi(x) \quad (6.7)$$

Tomando a  $\bar{\psi}$  y  $\psi$  como variables independientes, se tiene como ecuación de Euler-Lagrange para  $\psi$ :

$$\partial_\mu \left( \frac{\delta L}{\delta \partial_\mu \bar{\psi}} \right) - \frac{\delta L}{\delta \bar{\psi}} \Rightarrow \left(\gamma^\mu \left(\hbar i \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu(x)\right) + mc\right) \psi(x) = 0 \quad (6.8)$$

Puede verse que no solo la acción (6.7) sino el lagrangiano, su integrando, es invariante frente a las transformaciones de gauge (6.5). Es válido entonces recurrir al teorema de Noether que establece que, como pasa con toda invariancia de un Lagrangiano, existe una carga conservada asociada a esa invariancia. Para encontrarla, en el caso de la invariancia de gauge comenzamos por construir la corriente conservada (en el sentido de que su cuatridivergencia es nula) asociada a esta invarianza. Para ello, según el método de Noether, consideramos un

cambio infinitesimal del campo de materia  $\psi$

$$\delta\psi = \frac{ie}{\hbar c}\psi\epsilon(x) \quad (6.9)$$

Aquí  $\epsilon(x)$  es un parámetro infinitesimal. La corriente de materia asociada a la invarianza viene dada, de acuerdo al teorema de Noether<sup>21</sup>, por

$$j_\mu(x)\epsilon(x) = \frac{\delta L}{\delta\partial_\mu\psi}\delta\psi = -\frac{e}{c}\bar{\psi}\gamma^\mu\psi\epsilon(x) \quad (6.10)$$

¡Es decir que la corriente conservada de Noether asociada con la invarianza de gauge coincide, a menos de un factor constante, con la corriente de probabilidad cuya componente temporal da la densidad de probabilidad! Para ello basta reescribir a la corriente  $j_\mu$  como

$$j_\mu(x) = -\frac{e}{c}J_\mu(x) \quad (6.11)$$

con

$$J_\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x), \quad \partial_\mu J^\mu(x) = 0 \quad (6.12)$$

Luego, la carga conservada, la integral de  $J_0$  sobre todo el espacio,  $Q = \int d^3x\psi^*\psi$ , no es otra cosa que la expresión de que la probabilidad de encontrar a la partícula descrita por la ecuación de Schrödinger es 1.

Volviendo a la transformación de gauge (6.3) con parámetro real arbitraio  $\Lambda(x)$

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu = A_\mu(x) + \partial_\mu\Lambda(x) \quad (6.13)$$

podríamos escribirla en una forma en apariencia más complicada,

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu = A_\mu(x) + \frac{1}{i}g^{-1}(x)\partial_\mu g(x) \quad (6.14)$$

con

$$g(x) = \exp(i\Lambda(x)) \quad (6.15)$$

En esta forma,  $g(x)$  puede ser identificado como uno de los elementos del grupo unitario  $U(1)$  formado por los complejos de módulo 1. Esto

---

<sup>21</sup>La prueba de este teorema y el análisis de diversos tipos de simetrías puede encontrarse en el mismo sitio web "Actividades docentes" del presente texto.

podría pensarse que es un detalle irrelevante para las transformaciones de gauge del electromagnetismo. Pero no es así: La teoría de las interacciones electrodébiles, que unifican a los fenómenos electromagnéticos con los débiles está basado en la extensión de las invarianzas de la teoría agregando otro grupo unitario con determinante 1, el identificado como  $SU(2)$  cuya representación fundamental es el de matrices de  $2 \times 2$  (por ejemplo, dada por las 3 matrices de Pauli). Y para describir las interacciones fuertes, también se utiliza un grupo unitario, el grupo  $SU(3)$  cuya representación fundamental es de 8 matrices de  $3 \times 3$  conocidas como matrices de Gell-Mann.

Para el caso general del grupo de Lie  $SU(N)$ , la transformación de los campos de gauge (6.16) se complica:

$$A'_\mu = g^{-1}A_\mu(x)g + \frac{1}{i}g^{-1}(x)\partial_\mu g(x) \quad (6.16)$$

Hay que notar que en el primer término a la derecha solo se puede simplificar el  $g^{-1}$  con el  $g$  para el caso  $U(1)$ , un grupo abeliano en el que el que  $\Lambda$  es una función real de  $x$  y lo mismo sucede con las componentes de  $A_\mu$ . En el caso en que  $N \neq 1$  el grupo es no conmutativo en el sentido de que  $\Lambda$  y  $A_\mu$  toma valores en el álgebra de Lie del grupo, que se suele anotar como  $su(N)$  y es un álgebra no conmutativa.

El Lagrangiano del Modelo Estándar es el de una teoría de gauge con grupo  $g \in SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ .

## La ecuación de Dirac para átomos hidrogenoides

Uno de los problemas en los que se puede poner a prueba a la ecuación de Dirac es en el de la estructura fina de los espectros atómicos. En este asunto, la mecánica cuántica no-relativista había tenido sus primeros y más resonantes éxitos. Ya en ese caso había sido notable el haber podido encontrar una solución exacta de la ecuación de ondas para el electrón en un campo coulombiano. Veremos que lo mismo sucede en el caso de la ecuación relativista de Dirac para el electrón en un potencial de Coulomb. Y que los resultados dan una descripción excelente, superior



al de la mecánica cuántica no relativista, de los datos experimentales para átomos hidrogenoides.

Comencemos por hacer, a vuelo de pájaro, una enumeración de los resultados de la mecánica cuántica no relativista para átomos hidrogenoides. Para ello recordemos que la ecuación de Schrödinger para los estados estacionarios de un electrón de masa  $m_e$  y carga  $e$  en el campo eléctrico Coulombiano producido por un núcleo de número atómico  $Z$  toma la forma

$$\left( \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{Ze^2}{4\pi r} + \epsilon_n \right) \psi_{n,l,m} = 0 \quad (6.17)$$

con el Laplaciano escrito como

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{L}^2 \quad (6.18)$$

$$\hat{L}^2 \psi_{n,l,m} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{n,l,m} \quad (6.19)$$

En (6.17)  $m$  es la masa reducida,

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_N} \approx \frac{1}{m_e} \quad (6.20)$$

con  $m_N$  la masa del núcleo. La constante fundamental que aparece en la teoría es la constante de estructura fina  $\alpha$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\hbar c} = \frac{1}{137.037} \quad (6.21)$$

en la que debe notarse que en la ecuación de Schrödinger en un potencial coulombiano las dos constantes fundamentales  $\hbar$  y  $c$  solo aparecen combinadas en  $\alpha$

Los niveles de energía corresponden a la fórmula de Balmer

$$\epsilon_n = -\frac{m(Z\alpha)^2}{2n^2} \quad (6.22)$$

con

$$\frac{m\alpha^2}{2} = 13.6 \text{ eV} \quad (6.23)$$

y

$$n \geq 1, \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1, \quad -l \leq m \leq l \quad (6.24)$$

La degeneración  $d(n)$  del estado  $n$  es

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (6.25)$$

Veremos que, con el tratamiento relativista, esta degeneración decrece y aparece una estructura fina en el espectro, no prevista por el tratamiento no-relativista.

Pasemos ahora al estudio detallado del mismo problema pero utilizando la ecuación relativista de Dirac. Como se trata del potencial Coulombiano en átomos hidrogenoides (con un número de protones  $Z$ ) tendremos

$$A_0 = -\frac{Ze}{4\pi r} \quad (6.26)$$

y, como no hay campo magnético, pondremos nuevamente  $\vec{A} = 0$ . En lo que sigue conviene utilizar la representación de Weyl (quiral) de las matrices de Dirac,

$$\gamma^0 = -\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.27)$$

En lugar de estudiar directamente la ecuación de Dirac, escribiremos la que resulta de aplicar a esa ecuación el operador de Dirac (con el signo relativo entre derivada y masa opuesto al de la ecuación original) a la misma. Vimos que de esta manera se obtiene una ecuación de segundo orden que en el caso libre coincidía con la de Klein-Gordon actuando sobre una función espinorial de 4 componentes.

Las soluciones de la ecuación resultante con derivadas de segundo orden son por supuesto soluciones de la de Dirac de primer orden. La idea del camino que estamos siguiendo es que, trabajando con una ecuación de segundo orden, nos será más fácil utilizar como guía lo aprendido al estudiar al átomo de Hidrógeno con la ecuación de Schrödinger.

Consideraremos la aproximación en que la masa reducida del sistema se toma igual a la del electrón. Por simplicidad trabajaremos con unidades tales que  $\hbar = c = 1$  y al final de los cálculos recuperaremos estas constantes usando el hecho de que la constante de estructura fina cuando  $\hbar$  y  $c$  aparecen en su valor del sistema métrico con su verdadero valor que es  $\alpha = e^2/(4\pi\hbar c)$ , eq.(6.21).

La ecuación de segundo orden que resulta de lo descripto más arriba es:

$$\left( (i\gamma^\mu \partial_\mu - e\gamma^0 A_0)^2 - m^2 \right) \psi = \left( (i\partial_\mu - eA_0 \delta_{\mu 0})^2 - e\sigma^{0i} F_{0i} - m^2 \right) \psi = 0 \quad (6.28)$$

con

$$\sigma^{0i} = i \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & -\sigma^i \end{pmatrix} \quad (6.29)$$

Con esto, el término ligado al spin que aparece en la ecuación (6.28) puede escribirse según sea el signo con que aparecen las matrices de Pauli de  $2 \times 2$   $\sigma^i$  en la matriz  $\sigma^{0i}$  de  $4 \times 4$ ,

$$-\frac{e}{2} \sigma^{0i} F_{0i} = \pm i Z \alpha \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}}{r^3} \quad (6.30)$$

(tener en cuenta que para escribir el vector contravariante  $\vec{r}$  a partir de la derivada covariante  $\partial_i$  hay que incluir un signo “−” debido a la signatura elegida para la métrica.)

En la ec. (6.30) debe tomarse el signo + cuando se trate de la componente  $\psi^+$  y el signo − cuando se trate de la componente  $\psi^-$  en que descomponemos al espinor de 4 componentes. Las componentes  $\psi^\pm$  son cada una un espinor de Weyl de 2 componentes,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi^+ \\ \psi^- \end{pmatrix}, \quad (\psi^+) = \begin{pmatrix} \chi^1 \\ \chi^2 \end{pmatrix}, \quad (\psi^-) = \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix} \quad (6.31)$$

Tenemos entonces un par de ecuaciones que son el análogo de la ecuación de Schrödinger para el átomo de Hidrógeno, para estados estacionarios, pero para el caso relativista,

### **Ecuación de segundo orden que deriva de la de Dirac:**

(para estados estacionarios)

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{r^2} - \frac{Z^2 \alpha^2}{r^2} \pm i \frac{Z \alpha}{r^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{r} - \frac{2Z \alpha \epsilon}{r} - (E^2 - m^2) \right) \psi^\pm = 0 \quad (6.32)$$

donde  $E = mc^2 - \epsilon$  (aquí  $\epsilon$  corresponde a la energía del electrón en los estados ligados).

Los tres primeros términos del lado izquierdo corresponden al Laplaciano en coordenadas esféricas. En cuanto al potencial coulombiano, cuya traza podemos seguir a través de  $Z$ , aparece en los tres términos siguientes, en particular aquel multiplicado por la energía  $\epsilon$ . Finalmente, hay un término con el cuadrado de la energía y el  $m^2$  que corresponde a la energía en reposo (recordar que transitoriamente hemos puesto  $c = 1$ ).

Si no fuera por el término que contiene al operador de spin (i.e., a las matrices de Pauli), esta ecuación es exactamente la que resultaría de plantear la ecuación de Klein-Gordon para una partícula cargada en un campo Coulombiano:

**Ecuación de Klein-Gordon (sin spin)**

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{r^2} - \frac{Z^2\alpha^2}{r^2} - \frac{2Z\alpha\epsilon}{r} - (\epsilon^2 - m^2)\right)\phi = 0 \quad (6.33)$$

que puede compararse con la que resulta en el caso no-relativista (ecuación de Schrödinger (6.17))

**Ecuación de Schrödinger**

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{r^2} - \frac{2mZ\alpha}{r} - 2m\epsilon\right)\psi = 0 \quad (6.34)$$

Ahora bien, si comparamos las ecuaciones de Klein-Gordon y la de Schrödinger, vemos que formalmente son idénticas si se hacen las siguientes sustituciones en la de Schrödinger:

- en el término que contiene  $L^2$

$$L^2 \rightarrow L'^2 = L^2 - Z^2\alpha^2; \quad (6.35)$$

- en el que contiene a  $\alpha$

$$\alpha \rightarrow \alpha' = \alpha \frac{\epsilon}{m}; \quad (6.36)$$

- en el que contiene a la energía  $\epsilon$

$$\epsilon \rightarrow \epsilon' = \frac{\epsilon^2 - m^2}{2m} \quad (6.37)$$

Si “traducimos” las relaciones anteriores al caso de los autovalores del momento angular orbital tendremos

$$\begin{aligned} l(l+1) &\rightarrow l(l+1) - Z^2\alpha^2 \equiv l'(l'+1) \\ \alpha &\rightarrow \alpha \frac{\epsilon}{m} = \alpha' \\ \epsilon &\rightarrow \frac{\epsilon^2 - m^2}{2m} = \epsilon' \end{aligned} \quad (6.38)$$

Con esto vemos que al pasar de la ecuación de Schrödinger a la de Klein-Gordon, los autovalores del momento angular orbital se corren en una cantidad que llamaremos  $\delta_l$  y que se puede calcular a partir de las soluciones de la ecuación cuadrática asociada a la primera línea de la ecuación (6.38) que era

$$\begin{aligned} l(l+1) &\rightarrow l(l+1) - Z^2\alpha^2 \equiv l'(l'+1) \\ l &\rightarrow l' = l - \delta_l \\ \delta_l &= l + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2\alpha^2} \end{aligned} \quad (6.39)$$

Por los mismos motivos, el número cuántico principal  $n$  se corre en la misma cantidad. En efecto, recordemos que en el caso de la ecuación de Schrödinger, para que la función de onda tuviera el comportamiento adecuado en el infinito su parte radial debía ser un polinomio (y no una serie de infinitos términos). De aquí resulta que cierto parámetro  $n'$  ligado a  $l$  debía ser un entero,  $n' = n - (l + 1)$ . Luego, al cambiar  $l \rightarrow l'$  tiene que cambiarse  $n \rightarrow n'$

Usando las relaciones (6.39) vemos entonces que podemos leer la fórmula para los niveles de energía de Klein-Gordon para una partícula de masa  $m$  y carga  $e$  en un campo coulombiano, a partir de la fórmula de Balmer en término de los parámetros primados:

$$\frac{E_{nl}^2 - m^2}{2m} = -\frac{m(Z\alpha')^2}{2n'^2} \quad (6.40)$$

o

$$\frac{E_{nl}^2 - m^2}{2m} = -\frac{mZ^2\alpha^2}{2} \frac{E_{nl}^2}{m^2} \frac{1}{(n - \delta_l)^2} \quad (6.41)$$

de donde, finalmente, se tiene

$$E_{nl} = \frac{m}{\sqrt{1 + (Z^2\alpha^2/(n - \delta_l)^2)}} \quad (6.42)$$

Esta expresión se puede desarrollar en potencias de  $\alpha^2$ , obteniéndose (recuperando las constantes  $\hbar$  y  $c$ )

$$E_{nl} = mc^2 - \frac{mZ^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{mZ^4\alpha^4}{n^3(2l+1)} + \frac{3}{8} \frac{mZ^4\alpha^4}{n^4} + O(\alpha^6) \quad (6.43)$$

El primer término corresponde a la energía en reposo, el segundo término corresponde a la energía de ligadura no relativista; el tercero, al depender de  $l$ , rompe la degeneración  $O(4)$  presente en el caso no-relativista.

No discutiremos las patologías que esconde la fórmula para la energía que resulta de la ecuación de Klein-Gordon. Por ejemplo, la catástrofe que ocurre para  $Z > 137/2$ , cuando  $\delta_l$ , y por ello la energía, se vuelven complejas. O la singularidad en el origen que genera en la función de onda el potencial atractivo  $-(Z^2\alpha^2/r^2)$ . Tampoco nos extenderemos sobre el pobre acuerdo con los resultados experimentales que tiene la fórmula (6.43). Simplemente concluiremos que los efectos del spin, que no son tenidos en cuenta por la ecuación de Klein-Gordon, tienen que ser importantes por lo que los cálculos en base a la ecuación de Dirac no deberían presentar estos problemas.

En la clase siguiente veremos como hacer contacto entre estos resultados de la ecuación de Klein-Gordon para espinores de 4 componentes con los de la ecuación de Dirac.



## Clase 7

Pudimos conectar los niveles de energía de átomos hidrogenoides según resultan de la ecuación de Schrödinger con los que se obtienen para la ecuación de Klein-Gordon en el mismo potencial coulombiano. Podemos hacer lo mismo en el caso de la ecuación de Dirac. Para comenzar, notemos que el momento angular total  $\vec{J}$ ,

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{L} + \frac{1}{2}\vec{\Sigma} \quad (7.1)$$

conmuta con el hamiltoniano,

$$[\hat{H}, \vec{J}] = 0 \quad (7.2)$$

Conviene entonces trabajar en el subespacio de estados  $|jm_j l\rangle$ ,

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |jm_j l\rangle &= j(j+1) |jm_j l\rangle, \quad j = 1/2, 3/2, \dots \\ \hat{L}^2 |jm_j l\rangle &= l(l+1) |jm_j l\rangle, \quad l = j \pm 1/2 = l_{\pm} \\ \hat{S}^2 |jm_j l\rangle &= \frac{3}{4} |jm_j l\rangle \\ \hat{J}_z |jm_j l\rangle &= m_j |jm_j l\rangle, \quad -j \leq m_j \leq j \end{aligned} \quad (7.3)$$

(Hemos tomado nuevamente  $\hbar = 1$ ) Ahora bien, dado que estos autoestados tienen una paridad definida, ligada a  $l$  (ver nota al pie<sup>22</sup>), tendremos que los elementos de matriz del operador hermítico  $\vec{\sigma} \cdot \vec{r}$  (de paridad impar) se anulan entre estados con el mismo  $l$ ,

$$\langle jm_j l_{\pm} | \vec{\sigma} \cdot \vec{r} | jm_j l_{\pm} \rangle = 0 \quad (7.4)$$

---

<sup>22</sup>La parte angular de los kets, proyectados en la representación de coordenadas son armónicos esféricos que, ante un cambio de paridad  $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$ , que corresponde en coordenadas esféricas a  $(r, \theta, \varphi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$ , satisfacen que  $Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi)$ .



Además, se tiene que  $(\vec{\sigma} \cdot \vec{r})^2 = 1$ . Usaremos la clausura de la base de estados elegidos

$$\sum_{\pm} |jm_j l_{\pm}\rangle \langle jm_j l_{\pm}| = 1 \quad (7.5)$$

para insertarla en

$$1 = (\vec{\sigma} \cdot \vec{r})^2 = \sum_{\pm} \vec{\sigma} \cdot \vec{r} |jm_j l_{\pm}\rangle \langle jm_j l_{\pm}| \vec{\sigma} \cdot \vec{r} \quad (7.6)$$

Ahora bien, partiendo de la normalización  $1 = \langle l_- | l_- \rangle$  y usando lo anterior se tiene

$$1 = \langle l_- | l_- \rangle = \langle l_- | (\vec{\sigma} \cdot \vec{r})^2 | l_- \rangle = \langle l_- | \vec{\sigma} \cdot \vec{r} | l_+ \rangle \langle l_+ | \vec{\sigma} \cdot \vec{r} | l_- \rangle = \langle l_+ | \vec{\sigma} \cdot \vec{r} | l_- \rangle^2 \quad (7.7)$$

donde hemos usado la eq.(7.4),

$$\langle jm_j l_{\pm} | \vec{\sigma} \cdot \vec{r} | jm_j l_{\pm} \rangle = 0$$

para cancelar los brackets entre estados  $++$  y  $--$  y, además, que las matrices de Pauli son, por supuesto, hermíticas.

De la ecuación (7.7) se tiene finalmente

$$\langle l_+ | \vec{\sigma} \cdot \vec{r} | l_- \rangle = 1 \quad (7.8)$$

Dada la ecuación (6.32), para los estados estacionarios de la ecuación de segundo orden que deriva de la de Dirac usando el “truco”  $(a+b)(a-b)$

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{r^2} - \frac{Z^2 \alpha^2}{r^2} \pm i \frac{Z \alpha}{r^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{r} - \frac{2Z \alpha \epsilon}{r} - (E^2 - m^2) \right) \psi^{\pm} = 0 \quad (7.9)$$

los brackets del tercero, cuarto y quinto término puede escribirse así :

$$\begin{aligned} \langle l_{\pm} | (L^2 - Z^2 \alpha^2 \mp i Z \alpha \vec{\sigma} \cdot \vec{r}) | l_{\pm} \rangle = \\ \begin{pmatrix} (j + \frac{1}{2})(j + \frac{3}{2}) - Z^2 \alpha^2 & \mp i Z \alpha \\ \mp i Z \alpha & (j - \frac{1}{2})(j + \frac{1}{2}) - Z^2 \alpha^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.10)$$

Es fácil calcular los autovalores  $\Lambda$  de esta matriz. Si escribimos a  $\Lambda$  en la forma habitual de los autovalores de momento angular,  $\Lambda = \lambda(\lambda + 1)$ , se obtiene

$$\lambda = (j \pm \frac{1}{2}) - \delta_j \quad (7.11)$$

con  $\delta_j$  dado por

$$\delta_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - Z^2 \alpha^2} \approx \frac{Z^2 \alpha^2}{2j + 1} + O(Z^4 \alpha^4) \quad (7.12)$$

Como en el caso de Klein-Gordon, el rol de  $l$  en el caso no relativista es aquí jugado por  $\lambda$ , que está corrido en  $\delta_j$ . Para que el parámetro  $n'$  que hacía, al tomar valores enteros, que se cortara la serie infinita de la parte radial de la función de onda en el caso no-relativista siga siendo un entero, ( $n' = n + (l + 1)$ ), como  $l$  está corrido en  $\delta_j$ , así deberá estarlo  $n$  :

$$n' = (n - \delta_j) - \lambda - 1 \quad (7.13)$$

Como  $n' \geq 0$ , se tendrá que

$$\begin{aligned} j &\leq n - \frac{3}{2} & \text{si} & \quad \lambda = j + \frac{1}{2} - \delta_j \\ j &\leq n - \frac{1}{2} & \text{si} & \quad \lambda = j - \frac{1}{2} - \delta_j \end{aligned} \quad (7.14)$$

Podemos ahora seguir exactamente el camino que en el caso de Klein-Gordon, nos llevó a la fórmula para la energía de los niveles de los átomos hidrogenoides. Es decir, el mismo corrimiento (6.38) que nos permitía pasar de la ecuación de Schrödinger a la de Klein-Gordon sirve ahora para pasar a la de Dirac siempre que utilicemos la fórmula (7.12) para  $\delta_j$ , pues en ella está tenido en cuenta el término de spin adicional en Dirac. Entonces, tomando la fórmula de Balmer y haciendo los reemplazos

$$\begin{aligned} n &\rightarrow n - \delta_j \\ \alpha &\rightarrow \alpha \frac{\epsilon}{m} \\ \epsilon &\rightarrow \frac{\epsilon^2 - m^2}{2m} \end{aligned} \quad (7.15)$$

que permitieron escribir la fórmula para los niveles de energía a partir de la modificación de la fórmula de Balmer, tendremos ahora

$$E_{n,j} = \frac{m}{\sqrt{1 + (Z^2\alpha^2/(n - \delta_j)^2)}} \quad (7.16)$$

que formalmente coincide con la fórmula (6.42) para el caso de Klein-Gordon, pero con  $\delta_j$  dado en este caso por (7.12)

$$\delta_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}$$

Vemos que la energía no depende de  $l$  de manera que en principio habrá una degeneración de los niveles. Para cada valor de  $j$  hay dos valores posibles de  $l$ ,  $l = j \pm 1/2$  excepto en el caso en que  $j = n - 1/2$  en que  $l = n - 1$  (la otra posibilidad llevaría a  $n = l$  siendo que  $l \leq n - 1$ . Salvo para este caso habrá entonces una degeneración doble de los niveles.

Desarrollando en potencias de  $\alpha^2$  tendremos

$$E_{n,j} \approx m - \frac{mZ^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{mZ^4\alpha^4}{n^3(2j+1)} + \frac{3mZ^4\alpha^4}{8n^4} + \dots \quad (7.17)$$

con  $n = 1, 2, \dots$  y  $j = 1/2, 3/2, \dots, n - 1/2$ .

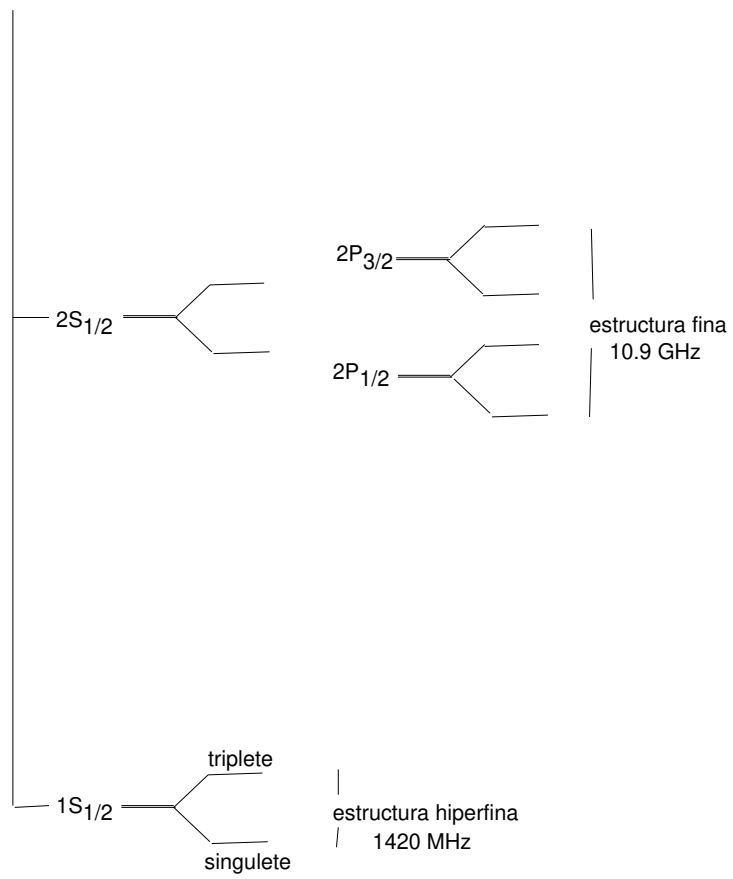
Vemos entonces que, para un dado  $n$ , diferentes valores de  $j$  implican diferentes valores de la energía de los niveles. Esto produce la llamada estructura fina (por ello a la constante  $\alpha$  se la llame constante de estructura fina).

Queda, como vemos, una degeneración de estados que se distinguen por su momento angular orbital  $l$ , que puede ser  $j \pm 1/2$  excepto para el caso en que  $j = n - 1/2$  en el que  $l = n - 1$ .

Para tener una idea de la magnitud del desdoblamiento en niveles con el mismo  $n$  y  $j$  diferente, consideremos el caso en que  $Z = 1$ ;  $n = 2$ ;  $j = 1/2, 3/2$ ;  $l = 1$  (correspondiendo este valor a la letra  $P$  en la notación espectroscópica). Se tiene

$$\epsilon(2P_{3/2}) - \epsilon(2P_{1/2}) \approx \frac{m\alpha^4}{32} = 4.53 \times 10^{-5} \text{eV} \rightarrow 10.9 \text{GHz} \quad (7.18)$$

En la figura que sigue se representan los niveles de energía más bajos, utilizando la notación espectroscópica  $nl_j$ .



## Estructura hiperfina

La estructura hiperfina resulta de la **interacción del momento magnético del núcleo con el del electrón**, que no fue tomado en cuenta en lo anterior.

En particular, en el caso del átomo de Hidrógeno que trataremos, dado que el núcleo es un protón, la interacción en cuestión será la del momento magnético  $\vec{\mu}_p$  del protón con el electrón.

Consideraremos el efecto cuando el autovalor del momento angular orbital del electrón es  $l = 0$  (estado  $S$ ), que corresponde un estado con simetría esférica.

A una distancia  $r$  del protón, su momento magnético genera un campo magnético  $\vec{B}_p$  que se acopla con el spin del electrón. El acoplamiento será entonces

$$H_{hf} = -\frac{e}{2m} \vec{s}_e \cdot \vec{B}_p \quad (7.19)$$

donde  $\vec{s}_e$  el spin del electrón y  $\vec{B}_p$  el campo magnético asociado por el protón (  $hf$  se refiera a el desdoblamiento hiperfino que se producirá por esta interacción).

Tenemos que

$$\vec{B}_p = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}_p, \quad \vec{A}_p = -\frac{1}{4\pi} \vec{\mu}_p \wedge \vec{\nabla} \frac{1}{r} \quad (7.20)$$

donde  $\vec{\mu}_p$  es el momento magnético del protón. Para verificar la fórmula de la derecha se usa que según las ecuaciones de Maxwell

$$\vec{\mu} = \frac{1}{2} \int d^3x \vec{r} \wedge \vec{j}, \quad \nabla^2 \vec{A} = \vec{j} \quad (7.21)$$

Ahora bien, insertando el valor de  $\vec{A}_p$  en la ecuacion de la derecha se tiene

$$\vec{j}_p = -\frac{1}{4\pi} (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) \left( \vec{\mu}_p \wedge \vec{\nabla} \frac{1}{r} \right) = -\vec{\mu}_p \wedge \vec{\nabla} \delta^3(\vec{x}) \quad (7.22)$$

lo que muestra que el momento magnético del protón está muy localizado, como era de esperar. Con esto, luego de cierto trabajo se llega a la fórmula para la  $\vec{A}_p$ .

Conocido  $\vec{A}_p$ , se puede calcular  $\vec{B}_p$  según la fórmula

$$\vec{B}_p = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}_p \quad (7.23)$$

Para calcular el valor de  $\vec{B}_p$  a partir del de  $\vec{A}_p$ , notemos que deberemos calcular  $\partial_i \partial_j$  de ciertas funciones. Por tratarse de estados con simetría esférica podemos promediar esta fórmula sobre los ángulos y escribir

$$\partial_i \partial_j = \frac{1}{3} \nabla^2 \delta_{ij} \quad (7.24)$$

Con esto, es fácil ver que (7.19),

$$H_{hf} = -\frac{e}{2m} \vec{s}_e \cdot \vec{B}_p$$

toma la forma

$$H_{hf} = -\frac{e}{3m_e} \vec{s}_e \cdot \vec{\mu}_p \delta^{(3)}(\vec{r}) \quad (7.25)$$

El momento magnético del protón puede escribirse siguiendo un análogo clásico como se hizo en el curso pasado con el del electrón. La diferencia vendrá dada por el factor giromagnético  $g_p$  que debe ajustarse de manera de reproducir los datos de experiencias diversas. Se tiene

$$\vec{\mu}_p = -\frac{g_p e}{4m_p} \vec{s}_p \quad (7.26)$$

donde  $g_p = 5.587$  y  $m_p$  es la masa del protón. Usando teoría de perturbaciones se encuentra que a primer orden el corrimiento de energía en el nivel fundamental será

$$\langle H_{hf} \rangle = \frac{e^2}{12m_e m_p} g_p \vec{s}_e \cdot \vec{s}_p |\psi_1(0)|^2 \quad (7.27)$$

Aquí  $|\psi_1(0)|^2$  es el módulo cuadrado de la función de onda del fundamental,

$$|\psi_1(0)|^2 = \frac{(m_e \alpha)^3}{\pi} \quad (7.28)$$

Para calcular el producto  $\vec{s}_e \cdot \vec{s}_p$  se procede así:

$$\vec{s}_e \cdot \vec{s}_p = \frac{1}{2} (\vec{s}_p + \vec{s}_e)^2 - \frac{1}{2} \vec{s}_p^2 - \frac{1}{2} \vec{s}_e^2 \quad (7.29)$$

Los autovalores de  $\vec{s}_e^2$  y  $\vec{s}_p^2$  son iguales a  $3/4$ . En cuanto a  $(\vec{s}_p + \vec{s}_e)^2$ , como el spin total puede ser 0 (singlete) o 1 (triplete),  $s(s+1) = 0, 2$ .

Con esto, se tiene

$$\begin{aligned}\vec{s}_e \cdot \vec{s}_p &= -\frac{3}{4} \text{ singulete} \\ \vec{s}_e \cdot \vec{s}_p &= \frac{1}{4} \text{ triplete}\end{aligned}\tag{7.30}$$

Con esto, la diferencia entre los valores de  $\langle H_{hf} \rangle$ , que corresponde a la diferencia de energía entre los niveles desdoblados será

$$\Delta E_{hf}^{n=1, j=1/2}(\text{triplete} - \text{singulete}) = 5.89 \times 10^{-6} \text{ eV} = 1.42 \times 10^9 \text{ Hz}\tag{7.31}$$

Comparando este valor al de la estructura fina, vemos que se ha producido una reducción proporcional a  $m_e/m_p$ .

El acuerdo entre las predicciones de la teoría de Dirac y los espectros obtenidos para átomos hidrogenoides es muy bueno salvo en el caso de los niveles  $S_{1/2}$  y  $P_{1/2}$  en que la degeneración que debería existir entre dos estados con el mismo  $j$  y el mismo  $n$  y solo diferir en el  $l$  ( $l = 1/2 - 1/2 = 0$  y  $l = 1/2 + 1/2 = 1$ ) aparece rota, existiendo entre estos niveles un corrimiento llamado de Lamb, de 1057 MHz. Sólo al incluir los efectos de la cuantificación del campo electromagnético y calcular las llamadas correcciones radiativas en el contexto de la teoría cuántica de los campos del electrón y fotón (electrodinámica cuántica), se puede dar cuenta teórica de este hecho experimental.

## Interpretaciones de las soluciones de energía negativa

En el final de esta clase abandonaremos la ideología del avestruz y enfrentaremos el problema de explicar cómo pueden existir soluciones de la ecuación de Dirac con energía negativa aún para el caso de partículas libres.

Para ello, nos basaremos en la explicación intuitiva propuesta por Dirac en los años 30, basada en la siguiente

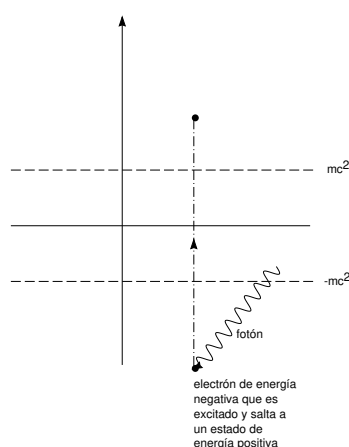
- **Suposición:** Todos los niveles de energía negativa están ocupados en el estado fundamental, que llamaremos estado de vacío.

Si ahora consideramos un electrón libre, no podrá estar en ninguno de los estados de energía negativa porque todos ellos están ocupados y el principio de exclusión de Pauli debe ser respetado también para estos infinitos niveles de energía negativa. Es por ello que el electrón libre deberá necesariamente estar en un estado de energía positiva y, siendo que está libre de toda interacción, será un estado estable. Más precisamente, escribe Dirac que:

*all the states of negative energy are occupied except perhaps a few of small velocity*

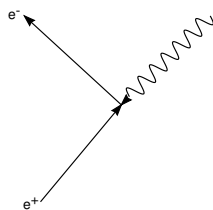
Por supuesto, esta propuesta enfrentó inmediatamente grandes dificultades: un problema obvio es cómo explicar la infinita densidad de carga implicada por los omnipresentes electrones de energía negativa. Como respuesta Dirac propuso reinterpretar la densidad que aparece en las ecuaciones de Maxwell como el apartamiento del estado de electrificación del universo.

En la interpretación de Dirac, los electrones que “tapan” todos los estados de energía negativa, pueden ser eyectados de ellos si se los excita. La energía de excitación debe ser suficiente como para saltar la brecha (el “gap”) de  $2mc^2$ . Para que ello suceda se los puede excitar por ejemplo haciendo que absorban la energía de un fotón que choque con uno de ellos. Tal proceso se representa en la figura siguiente:





Al eyectarse un electrón de ese mar de electrones de energía negativa (“mar de Dirac”), queda en éste un agujero (ausencia de una partícula con carga negativa) que puede interpretarse como una partícula de carga positiva. Un proceso tal se puede graficar así:



Se puede interpretar entonces al agujero como una verdadera partícula con carga positiva.

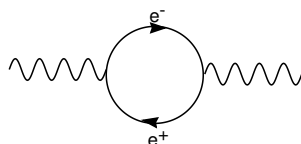
Señala Pais [10], físico y biógrafo de Dirac que este, inicialmente, no vio claramente lo que sucedía: a principios de 1928 propuso simplemente descartar la solución con energía negativa. En junio de ese año admitió en una conferencia que no se la podía ignorar y calificó por ello a su ecuación como aproximada. Hacia principios de 1929, junto con Weyl, comenzó a especular que la solución de energía negativa, como podía verse como una partícula con carga positiva, correspondería a un protón y pensó que la masa de su ecuación debía ser un promedio de las masas del electrón y del protón (!!). De hecho, el título de su trabajo en 1930 era *A theory of electrons and protons* [11]. Recién en mayo de 1931 descartó esto y escribió , en lo que eél llamó “ a small step forward” (!!!) [12]:

*A hole, if there were one, would be a new kind of particle, unknown to experimental physics, having the same mass and opposite charge of the electron.*

Antes de fin de año (y de que Dirac cumpliera 29 años) Carl Anderson, que aparentemente ignoraba la teoría de Dirac, anunció evidencia experimental para el anti-electrón o positrón sugerido por Dirac. Se trataba de la observación de la traza dejada por rayos cósmicos sometidos a un campo magnético, en una cámara de Wilson. La dirección en

que se curvaba la traza correspondía a una partícula con carga positiva y masa mucho menor que un protón.

Una vez creado el agujero, un electrón con energía positiva (el mismo que fuera eyectado, u otro), puede “caer” al estado con energía negativa correspondiente, que se encontraba desocupado. Se aniquilan así el electrón que cae y el positrón asociado con el agujero; la energía disponible al desaparecer el par electrón-positrón se manifiesta como emisión de un fotón. Usando nuevamente un diagrama, tendríamos, para el proceso completo, en el cual un fotón “crea” originalmente un par electrón-positrón, que luego se aniquila dando un fotón:



De hecho, un proceso como el de la figura anterior puede suceder aún si el fotón tiene energía menor que la mínima necesaria ( $E_{min} = 2mc^2$ ) para crear un par electrón-positrón. Esto sucede cuando un campo electromagnético produce un acomodamiento de carga dando origen a una “polarización del vacío”. Esto, que inicialmente fue una predicción teórica, se confirmó experimentalmente a través de la existencia del corrimiento de niveles al que nos referimos más arriba (de Lamb), que puede ser descripto con precisión, en el marco de la teoría cuántica de campos cuando diagramas como el anterior son tenidos en cuenta al estudiar los niveles de energía de un electrón (cuántico) en el campo electromagnético (cuántico) del núcleo.

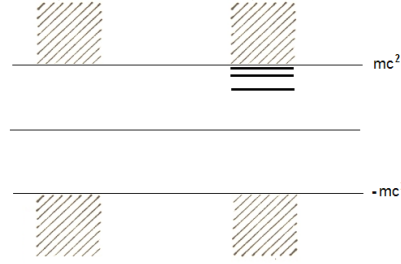
Una vez que se acepta que partículas masivas como el electrón y el positrón se pueden aniquilar, la descripción de las partículas en términos de funciones de onda pierde consistencia. En efecto, ¿qué se hace por ejemplo con la probabilidad de encontrar a una partícula en algún lugar del espacio en un instante  $t_2$ , expresada en términos de la función de onda, si la partícula fue aniquilada en un instante  $t_1 < t_2$ ? Sucede que en los términos planteados por Dirac al postular la existencia de un mar de infinitas partículas con energía negativa, debe

plantearse una teoría de muchas partículas y no de una única en presencia de un potencial. Notemos que con el abandono del concepto de función de onda de una partícula como medio para describir electrones relativistas, la razón por la que se descartaba a la ecuación de Klein-Gordon deja de existir. De hecho, como dijimos, la ecuación de Klein-Gordon describe correctamente, en otro contexto, partículas relativistas de spin cero. Pero la interpretación de Dirac sobre los estados de energía negativa deja de ser válida pues los bosones no obedecen el principio de exclusión de Pauli y no habría razón entonces para que el mar de Dirac de bosones estuviera “lleno”.

Será necesario entonces construir una verdadera teoría de muchas partículas para acomodar a partículas y antipartículas de manera consistente. Esto se logra luego de la llamada “segunda cuantificación”, que lleva a la introducción de campos cuantificados capaces de crear o aniquilar partículas. La formulación de la teoría de campos hace completamente innecesaria la interpretación de las antipartículas como el positrón como agujeros en un mar. Julian Schwinger, uno de los que desarrolló justamente la electrodinámica cuántica, escribió [13]:

*La imagen de un mar infinito de electrones de energía negativa es hoy considerada una curiosidad histórica, y olvidada.*

Concluimos esta sección representando el espectro de energías que obtuvimos al estudiar la ecuación de Dirac para electrón en el caso de un potencial coulombiano atractivo (sin tener en cuenta las correcciones de la electrodinámica cuántica). En la parte de la izquierda se representan, con rectas inclinadas, los posibles estados de un electrón (la parte inferior corresponde a los electrones de energía negativa del “mar de Dirac” o un electrón de Dirac libre con energía positiva. En la parte de la derecha, cuando actúa el potencial el potencial de Coulomb sobre un electron, vemos que el espectro comprende una franja continua de energía positiva que se extiende desde  $mc^2$  hasta  $+\infty$ , una serie discreta de energía positiva inferior a  $mc^2$  (el espectro observado en el átomo de hidrógeno) y una franja continua de energía negativa desde  $-mc^2$  hasta  $-\infty$ .



La figura muestra el espectro de energía de un electrón de Dirac: a la izquierda en el caso libre, en el derecho en el caso del potencial Coulombiano atractivo. Nótese que  $mc^2 = 511$  kev mientras que el nivel ms bajo del atomo de hidrógeno corresponde a una energía de 13.6 eV

## Conjugación de carga

La teoría de agujeros para explicar el rol de los estados de energía negativa de la teoría relativista de Dirac para el electrón, implica la existencia de partículas con la misma masa, el mismo spin y carga opuesta, los electrones y positrones. La ecuación de Dirac debe entonces admitir una nueva simetría que corresponda al intercambio entre partícula (electrón) y antipartícula (positrón).

Busquemos entonces una transformación que pase de un espinor  $\psi$ , que describa una partícula con una dada carga, a otro espinor  $\psi^C$  que describe uno con carga opuesta. Estos espinores deben obedecer las siguientes ecuaciones

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - e\gamma^\mu A_\mu - m) \psi = 0 \quad \text{para el electrón} \quad (7.32)$$

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu + e\gamma^\mu A_\mu - m) \psi^C = 0 \quad \text{para el positrón} \quad (7.33)$$

Buscamos una transformación

$$\psi \rightarrow \psi^C \quad (7.34)$$

que sea local y que, hecha dos veces sucesivamente deje a  $\psi$  sin cambiar, a menos de una fase inobservable. Para obtenerla, tomemos (7.32),

conjuguémosla,

$$(\gamma^{\mu*}(i\partial_\mu + eA_\mu) + m)\psi^* = 0 \quad (7.35)$$

Si logramos encontrar una matriz  $Q$  no singular tal que

$$\gamma^{\mu*} = -Q^{-1}\gamma^\mu Q \quad (7.36)$$

y reemplazamos en (7.35) tendremos

$$(-Q^{-1}\gamma^\mu Q(i\partial_\mu + eA_\mu) + m)\psi^* = 0 \quad (7.37)$$

Luego, multiplicando a izquierda por  $-Q$  llegamos a que

$$(\gamma^\mu(i\partial_\mu + eA_\mu) - m)Q\psi^* = 0 \quad (7.38)$$

que es la ecuación buscada siempre que identifiquemos al espinor conjugado de carga con

$$\psi^C = Q\psi^* \quad (7.39)$$

Conviene escribir a la matriz  $Q$  como un producto de dos matrices,  $C$  y  $\gamma_0$  y agreguemos una posible fase  $\eta_C$  inobservable:

$$Q = \eta_C C \gamma^0 \quad (7.40)$$

con lo que

$$\psi^C = \eta_C C \gamma^0 \psi^* = \eta_C C \bar{\psi}^T \quad (7.41)$$

$\psi^C$  correspondería entonces a la función de onda del positrón, si  $\psi$  fuera la función de onda del electrón. Para determinar a  $C$  a partir de la relación (7.36) trabajemos en una representación conveniente (una vez que la encontremos, podremos cambiar de representación usando el teorema fundamental de Pauli). Elegimos la representación de Dirac,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (7.42)$$

Tendremos entonces, a partir de (7.36)

$$\gamma^{\mu*} = -Q^{-1}\gamma^\mu Q \Rightarrow \gamma^\mu = -Q\gamma^{\mu*}Q^{-1} \Rightarrow \gamma^\mu = -C\gamma^0\gamma^{\mu*}\gamma^0C^{-1} \quad (7.43)$$

Es fácil ver que en esta representación se cumple

$$\gamma^0\gamma^{\mu*}\gamma^0 = \gamma^{\mu T} \quad (7.44)$$

con lo que (7.36) deviene

$$\gamma^\mu = -C\gamma^{\mu T}C^{-1} \quad (7.45)$$

En la representación elegida,  $\gamma^1$  y  $\gamma^3$  simplemente cambian de signo al transponer por lo que la ecuación (7.45) implica que  $C$  debe conmutar con ellas. Es fácil ver que una posible elección es

$$C = i\gamma^2\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^2 \\ -i\sigma^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.46)$$

Es importante analizar la acción de  $C$  sobre una solución con energía negativa, spin hacia abajo y que, por simplicidad, corresponda a una partícula en reposo:

$$\psi = \exp(imt) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7.47)$$

El conjugado de carga será, de acuerdo a lo anterior

$$\psi^C = \eta_C C \bar{\psi}^T = \eta_C \exp(-imt) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7.48)$$

Luego, el conjugado de carga de un electrón de energía negativa y spin hacia abajo es un electrón de energía positiva y spin hacia arriba.



# Clase 8

## Partículas Idénticas

Cuando en la mecánica clásica enfrentamos el estudio de un sistema con dos o más partículas idénticas (es decir, partículas indistinguibles por tener masa, carga, momento angular y cualquier otra propiedad física idéntica) nada cambia en la manera en que aplicamos las leyes de la cinemática y la dinámica respecto del caso de una única partícula o de varias partículas diferentes.

Si se trata de partículas idénticas, podemos, eventualmente “numerarlas” (por ejemplo, para dos partículas escribiendo las coordenadas con un subíndice  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  para distinguir a las dos partículas) y entonces, conocida la posición y velocidad de cada partícula del sistema en un instante inicial podemos, en el caso de la mecánica clásica, seguir sus trayectorias.

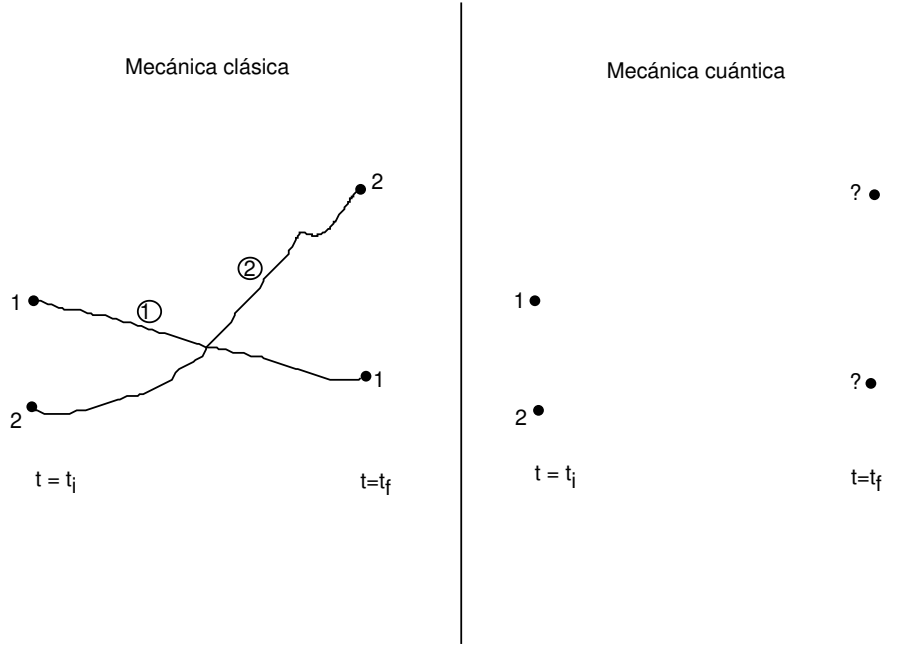
Suponiendo que el problema clásico tenga solución analítica cerrada, podemos determinar aplicando las leyes de Newton las trayectorias individuales de cada partícula y reconocer en el estado final cuál partícula ha seguido cada una de las trayectorias. Y si no tenemos una solución exacta, podemos utilizar los métodos clásicos de aproximación disponibles.

Es evidente que lo anterior no es posible en el caso de la mecánica cuántica. Básicamente, esta imposibilidad se debe a que, eliminada la noción de trayectoria (por el principio de incerteza), aunque sepamos con precisión absoluta la posición inicial de cada partícula idéntica del sistema, al no poder seguir o calcular trayectorias individuales pues el momento  $\vec{p}_i$  estaría indeterminado, no podremos saber en el estado final cuál partícula es la que ocupa una dada posición. Esta diferencia esta



esquemmatizada en la figura de la página siguiente.

Tal situación, que podría hacer pensar en un empobrecimiento del conocimiento de la dinámica de partículas idénticas en física cuántica, en realidad enriquece las propiedades de sistemas de partículas idénticas e implica propiedades nuevas sin análogo clásico, como veremos en lo que sigue.



Consideremos entonces, en el marco de la mecánica cuántica no-relativista,  $N$  partículas idénticas de masa  $m$  y demás posibles propiedades medibles -spin, carga, color, sabor, encanto, etc- iguales, que interactúan entre sí y, eventualmente, con un campo externo. El hamiltoniano del sistema es:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) + \hat{\Omega}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; \vec{s}_1, \vec{s}_2, \dots, \vec{s}_N; \dots) \quad (8.1)$$

Con  $\vec{r}_i$  indicamos la posición de la partícula  $i$ -ésima, con  $\hat{p}_i$  su operador impulso, con  $\vec{s}_i$  su spin. La suma en el primer término corresponde a

las energías cinéticas individuales de las partículas.  $\hat{V}$  representa a la interacción entre las partículas (por ejemplo, si se trata de partículas cargadas electricamente, las fuerzas de repulsión eléctricas entre pares). Finalmente,  $\hat{\Omega}$  representa un campo externo, el posible acoplamiento spin-órbita entre las partículas, etc., es decir, posibles interacciones en que juega un rol el spin.

La ecuación de Schrödinger para tal sistema es entonces

$$\hbar i \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t) \quad (8.2)$$

Por economía de notación escribiremos, mientras no quepa duda,

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t) \equiv \psi(1, 2, \dots, N) \quad (8.3)$$

En esta notación no hemos indicado a la dependencia temporal en el lado derecho porque en lo que sigue estudiaremos la función de onda de estados estacionarios.

Es conveniente introducir en este punto un operador  $\hat{\mathcal{P}}_{kl}$  cuya acción es el intercambio de la posición de las partículas que se encuentran originalmente situadas en la posición  $\vec{r}_k$  y  $\vec{r}_l$  (o sea, intercambia a la partícula  $k$  con la partícula  $l$ , siendo que son idénticas). Se trata entonces de un operador que permuta las partículas indicadas por su subíndice, i.e. un operador de permutación de partículas, que llamaremos  $\hat{\mathcal{P}}_{kl}$ ,

$$\hat{\mathcal{P}}_{kl} \psi(1, 2, \dots, k, \dots, l, \dots, N) = \psi(1, 2, \dots, l, \dots, k, \dots, N) . \quad (8.4)$$

Si el hamiltoniano  $\hat{H}$  describe un sistema de partículas idénticas, es evidente que debe conmutar con este operador (caso contrario el intercambio cambiaría el resultado de la medida de la energía),

$$\hat{\mathcal{P}}_{kl} \hat{H} = \hat{H} \hat{\mathcal{P}}_{kl} \quad (8.5)$$

Consideremos, por simplicidad, el caso de dos partículas:

$$\hat{\mathcal{P}}_{12} \psi(1, 2) = \psi(2, 1) \quad (8.6)$$

Debe cumplirse que

$$\hat{\mathcal{P}}_{12}^2 \psi(1, 2) = \hat{\mathcal{P}}_{12} \psi(2, 1) = \psi(1, 2) \quad (8.7)$$

Por lo que

$$\hat{\mathcal{P}}_{12}^2 = I \quad (8.8)$$

Llamemos  $\psi_p(1, 2)$  a una autofunción del operador  $\hat{\mathcal{P}}$ ,

$$\hat{\mathcal{P}}_{12}\psi_p(1, 2) = \lambda_p\psi_p(1, 2) \quad (8.9)$$

Por (8.8) tendremos

$$\psi_p(1, 2) = \lambda_p^2\psi_p(1, 2) \quad (8.10)$$

o

$$\lambda_p^2 = 1 \quad (8.11)$$

es decir que

$$\lambda_p = \pm 1 \quad (8.12)$$

Las autofunciones de  $\hat{\mathcal{P}}$  deben ser entonces simétricas o antisimétricas respecto al intercambio de dos partículas idénticas,

$$\psi_p(1, 2) = \pm\psi_p(2, 1) \quad (8.13)$$

o en general, si se trata de  $N$  partículas y se intercambian la  $k$ -ésima y la  $l$ -ésima,

$$\psi_p(1, 2, \dots, k, \dots, l, \dots, N) = \pm\psi_p(1, 2, \dots, l, \dots, k, \dots, N) \quad (8.14)$$

Volviendo al caso más sencillo de dos partículas, distingamos con un subíndice  $S$  ( $A$ ) a las autofunciones simétricas (antisimétricas),

$$\begin{aligned} \psi_S(1, 2) &= +\psi_S(2, 1) \\ \psi_A(1, 2) &= -\psi_A(2, 1) \end{aligned} \quad (8.15)$$

Desde el punto de vista de los fenómenos físicos, es entonces natural postular, con lo que venimos explicando, un

Principio de indistinguibilidad cuántico: Si un sistema está constituido por dos partículas idénticas 1 y 2, la densidad de probabilidad asociada al sistema no permite determinar cuál de ellas es la partícula “1” y cuál la “2”.

Es decir, se postula la identidad

$$|\psi(1, 2)|^2 = |\psi(2, 1)|^2 \quad (8.16)$$

lo que implica

$$\psi(1, 2) = \exp(i\alpha)\psi(2, 1) \quad (8.17)$$

El postulado anterior asegura entonces que las funciones de onda de los estados físicos son autofunciones del operador  $\hat{\mathcal{P}}$ . Usando lo que aprendimos para las autofunciones comunes del hamiltoniano y del operador de permutación, que se utilizarán para describir cualquier estado del sistema, combinación lineal de los autoestados, podemos inferir que  $\exp(i\alpha) = \pm 1 \Rightarrow \alpha = 0, \pi$ .

Desde el punto de vista experimental se ha comprobado que sistemas de electrones, de protones, de neutrones, de quarks, en general de partículas elementales o compuestas que forman la materia tienen funciones de onda antisimétricas.

En contraste, los sistemas que corresponden a mediadores de las interacciones para el electromagnetismo, las interacciones débiles y las fuertes (fotones, gluones, piones) tienen en general funciones de onda simétricas. No olvidemos partícula de Higgs, que juega un rol central en el Modelo estándar que unifica a las tres “fuerzas” y tiene función de onda de spin cero, es decir, es un escalar.

Dada la discusión anterior, agregaremos lo discutido a los postulados de cuantificación canónica estudiados al formular la mecánica cuántica el siguiente postulado

- **Postulado de indistinguibilidad cuántica**

**Es un hecho observado en la Naturaleza que la función de onda de sistemas cuánticos de partículas idénticas es, o bien simétrica o bien antisimétrica frente al intercambio de un par cualquiera de ellas.**

Ahora bien, ¿Quién nos asegura que las soluciones que encontremos de la ecuación de Schrödinger de un sistema de  $N$  partículas idénticas resultarán o bien simétricas o bien antisimétricas? Si bien intercambiar las partículas en la ecuación la mantiene inalterada, las soluciones

que encontremos no tienen por qué ser, en principio, simétricas o antisimétricas. Pero, dado que la ecuación de Schrödinger es lineal, matemáticamente cualquier combinación lineal con coeficientes arbitrarios tal que resulten soluciones con una dada simetría será solución. Habrá infinitas elecciones de coeficientes que darán soluciones sin simetría. Solo dos combinaciones de ellas corresponderán a funciones de onda simétricas y antisimétricas y son esas las que serán elegidas para describir fenómenos físicos en sistemas de partículas idénticas.

Para tratar este asunto más en detalle, iniciamos aquí el estudio de la dinámica cuántica de dos partículas idénticas para el caso más simple, aquel en el que las interacciones entre las partículas son despreciables, de manera que el hamiltoniano del sistema puede escribirse como la simple superposición de los hamiltonianos individuales,

$$\hat{H} = \hat{H}(1) + \hat{H}(2) \quad (8.18)$$

Esto implica que el problema estacionario

$$\hat{H}\psi_\alpha(1, 2) = E_\alpha\psi_\alpha(1, 2) \quad (8.19)$$

puede resolverse a partir de la solución de cada partícula independiente,

$$\hat{H}\phi_{\beta_1}(1) = E_{\beta_1}\phi_{\beta_1}(1) \quad (8.20)$$

$$\hat{H}\phi_{\beta_2}(2) = E_{\beta_2}\phi_{\beta_2}(2) \quad (8.21)$$

donde  $\phi_{\beta_i}$  son dos soluciones de partícula independiente del problema genérico

$$\hat{H}\phi_\beta = E_\beta\phi_\beta \quad (8.22)$$

Supondremos que estas autofunciones están adecuadamente normalizadas. A partir de estas soluciones, la del sistema de dos partículas podría escribirse simplemente como el producto

$$\psi_\alpha(1, 2) = \phi_{\beta_1}(1)\phi_{\beta_2}(2) \quad (8.23)$$

con

$$E_\alpha = E_{\beta_1} + E_{\beta_2} \quad (8.24)$$

si no fuera porque en general, (8.23) no es ni simétrica ni antisimétrica frente al intercambio de las dos partículas (Solo si  $\beta_1 = \beta_2$  el producto

sería automáticamente una función simétrica ante el intercambio de las partículas). Puede sin embargo construirse siempre una función de onda simétrica mas general con cada una de las partículas en estados diferentes de la manera siguiente:

$$\psi_{\alpha}^S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{\beta_1}(1)\phi_{\beta_2}(2) + \phi_{\beta_1}(2)\phi_{\beta_2}(1)) \quad (8.25)$$

Hemos supuesto aquí que  $\beta_1 \neq \beta_2$ . Si fueran iguales,  $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ , la función de onda simétrica sería, como señalamos más arriba  $\psi_{\alpha}^S(1, 2) = \phi_{\beta}(1)\phi_{\beta}(2)$ .

Por una vez, para aclarar cualquier confusión ante la proliferación de "1" y "2" escribamos la fórmula anterior más en detalle

$$\psi_{\alpha}^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{\beta_1}(\vec{r}_1)\phi_{\beta_2}(\vec{r}_2) + \phi_{\beta_1}(\vec{r}_2)\phi_{\beta_2}(\vec{r}_1)) \quad (8.26)$$

El factor  $1/\sqrt{2}$  hace que  $\psi_{\alpha}(1, 2)$  esté adecuadamente normalizada para el caso en que las funciones de onda independientes  $\phi_{\beta_i}(\vec{r}_i)$  lo estén.

Supongamos que las dos partículas descritas por la función de onda simétrica (8.25) tienen aproximadamente las mismas coordenadas (es decir, las dos partículas "estén muy cerca" una de la otra). Esto implica que las funciones de onda son básicamente no nulas cuando vale que  $\vec{r}_1 \approx \vec{r}_2$ . En tal caso, aplicando (8.25) se tiene

$$\psi_{\alpha}^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} 2\phi_{\beta_1}(\vec{r}_1)\phi_{\beta_2}(\vec{r}_2) = \sqrt{2}\phi_{\beta_1}(\vec{r}_1)\phi_{\beta_2}(\vec{r}_2) \quad (8.27)$$

ya que  $\phi_{\beta_1}(\vec{r}_1) \simeq \phi_{\beta_1}(\vec{r}_2)$  y  $\phi_{\beta_2}(\vec{r}_1) \simeq \phi_{\beta_2}(\vec{r}_2)$ . Luego, la densidad de probabilidad de encontrar a las partículas en el estado que llamamos  $\tilde{\alpha}$  sería

$$|\psi_{\tilde{\alpha}}^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 \simeq 2 |\phi_{\beta_1}(\vec{r}_1)|^2 |\phi_{\beta_2}(\vec{r}_2)|^2 \quad (\text{cuando } \vec{r}_1 \approx \vec{r}_2.) \quad (8.28)$$

cuando las partículas estan cerca una de la otra. Es interesante comparar este resultado con el que resultaría de una función de onda que no fuera simétrica ni antisimétrica,

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\phi_{\beta_1}(\vec{r}_1)|^2 |\phi_{\beta_2}(\vec{r}_2)|^2 \quad (8.29)$$

Vemos que el haber impuesto que la función de onda del sistema sea simétrica implica un factor 2 en la densidad de probabilidad: hay el doble de densidad probabilidad de encontrar al sistema con las partículas cerca una de la otra cuando la función de onda está simetrizada. Luego, hay más chances de encontrar a dos partículas juntas si su función de onda es simétrica que si no lo es. Obviamente, el análisis que acabamos de hacer tiene solamente valor aproximado y a nivel de densidad de probabilidad. Como  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  está normalizada, integrada en todo el espacio el resultado debe ser 1.

Veamos ahora el caso de dos partículas idénticas con función de onda antisimétrica. Se tiene, a partir de las soluciones de cada partícula

$$\psi_{\alpha}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{\beta_1}(\vec{r}_1)\phi_{\beta_2}(\vec{r}_2) - \phi_{\beta_1}(\vec{r}_2)\phi_{\beta_2}(\vec{r}_1)) \quad (8.30)$$

A pesar del signo opuesto en los dos términos del lado derecho, la energía resulta por supuesto la suma de las energías individuales:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_{\alpha}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi_{\alpha}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ &= (E_{\beta_1} + E_{\beta_2})\psi_{\alpha}^A(1, 2) \\ &= E_{\alpha}\psi_{\alpha}^A(1, 2) \end{aligned} \quad (8.31)$$

con  $E_{\alpha} = E_{\beta_1} + E_{\beta_2}$  como en el caso simétrico.

En contraste con el caso simétrico, no es posible en el caso de funciones de onda antisimétricas construir una función de onda antisimétrica en la que ambas partículas tengan los mismos números cuánticos, es decir, estén en el mismo estado. En efecto, de acuerdo a (8.30) si  $\beta_1 = \beta_2$  se tendrá

$$\psi_{\alpha}^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (8.32)$$

Es decir que la densidad de probabilidad de tal estado es nula. No puede existir un estado antisimétrico en que las dos partículas tengan los mismos números cuánticos.

La afirmación anterior no es otra cosa que el principio de exclusión de Pauli que sabemos es válido para electrones y, en general, para partículas de spin semientero que llamamos fermiones. Es entonces

necesario describir a los sistemas de fermiones idénticos con funciones de onda antisimétricas.

Lo anterior puede demostrarse como un teorema conocido como “teorema de spin-estadística”. El teorema fue formulado en 1939 por Fierz (*Helvetica Physica Acta*, 12 (1939) 3) y reobtenido por Pauli (*Progress of Theoretical Physics*, 5 (1950) 526); Schwinger en 1951 y Feynman en 1961 dieron pruebas más “conceptuales” del mismo teorema. Vale citar lo que señaló Feynman en su famoso “Curso de Física” refiriéndose al teorema: “Si bien probablemente es uno de teoremas más importantes de la física moderna, es también uno de los más difíciles de explicar de manera simple”

El enunciado puede escribirse así

- La función de onda de un sistema de partículas idénticas de spin entero tiene el mismo valor cuando la posición de cualquiera de las dos partículas es intercambiada. A estas partículas se las llama bosones.
- La función de onda de un sistema de partículas idénticas de spin semi-entero tiene el mismo valor pero con signo cambiado cuando la posición de cualquiera de las dos partículas es intercambiada. A estas partículas se las llama fermiones.

Todo lo anterior es fácilmente generalizable a un sistema de más de dos partículas idénticas. Las funciones de onda simétrica y antisimétrica pueden escribirse como

$$\begin{aligned}\psi^S &= \sum_{perm \{ \nu \}} \mathcal{P}_\nu \psi(1, 2, \dots, N) \\ \psi^A &= \sum_{perm \{ \nu \}} \varepsilon_\nu \mathcal{P}_\nu \psi(1, 2, \dots, N)\end{aligned}\quad (8.33)$$

Aquí  $\{ \nu \}$  representa una dada permutación de dos partículas  $\mathcal{P}_\nu$  de  $\{1, 2, \dots, N\}$  de las  $N$  presentes y  $\varepsilon_\nu$  el signo de la misma.

En caso que podamos escribir el hamiltoniano como una superposición de los de partícula independiente,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}(i) \quad (8.34)$$



las expresiones (8.33) se escriben

$$\begin{aligned}\psi^S &= \mathcal{N} \sum_{perm \{ \nu \}} \mathcal{P}_\nu \phi_{\alpha_1}(1) \phi_{\alpha_2}(2) \dots \phi_{\alpha_N}(N) \\ \psi^A &= \tilde{\mathcal{N}} \sum_{perm \{ \nu \}} \varepsilon_\nu \mathcal{P}_\nu \phi_{\alpha_1}(1) \phi_{\alpha_2}(2) \dots \phi_{\alpha_N}(N)\end{aligned}\quad (8.35)$$

Es interesante notar que la expresión de la función de onda antisimétrica coincide en el caso de la aproximación de partícula independiente con la del siguiente determinante (conocido como determinante de Slater)

$$\psi^A = \tilde{\mathcal{N}} \begin{bmatrix} \phi_{\alpha_1}(1) & \phi_{\alpha_1}(2) & \dots & \phi_{\alpha_1}(N) \\ \phi_{\alpha_2}(1) & \phi_{\alpha_2}(2) & \dots & \phi_{\alpha_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{\alpha_N}(1) & \phi_{\alpha_N}(2) & \dots & \phi_{\alpha_N}(N) \end{bmatrix} \quad (8.36)$$

Si cada función de onda individual está normalizada, entonces

$$\mathcal{N} = \tilde{\mathcal{N}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \quad (8.37)$$

En el caso de la función de onda antisimétrica, si dos partículas están en el mismo estado, habrá dos filas iguales y el determinante se anula y lo mismo sucederá si dos coordenadas son iguales o, lo que es lo mismo, dos columnas son iguales. Esto confirma que el postulado anterior lleva al principio de exclusión de Pauli .

Con  $N$  partículas idénticas se puede escribir en general  $N!$  productos del tipo

$$\phi_{\alpha_1}(1) \phi_{\alpha_2}(2) \dots \phi_{\alpha_N}(N) \quad (8.38)$$

que corresponden a las  $N!$  permutaciones de (8.38). Con estos  $N!$  productos diferentes se puede formar, en principio, una única combinación simétrica y una única antisimétrica. Las restantes  $N! - 2$  posibilidades no aparecen en la Naturaleza cuando se estudian sistemas de partículas idénticas.

Consideremos el caso en que  $N = 3$  y en particular, el caso en que

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \alpha \\ \alpha_2 &= \beta \\ \alpha_3 &= \beta\end{aligned} \quad (8.39)$$

Lo catalogamos de “particular” porque dos partículas están en el mismo estado. En este caso se puede formar solo 3 productos diferentes

$$\begin{aligned}\psi_I &= \psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\beta(3) \\ \psi_{II} &= \psi_\alpha(2)\psi_\beta(1)\psi_\beta(3) \\ \psi_{III} &= \psi_\alpha(3)\psi_\beta(1)\psi_\beta(2)\end{aligned}\tag{8.40}$$

La combinación simétrica será

$$\psi^S = \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_I + \psi_{II} + \psi_{III})\tag{8.41}$$

No puede haber en este caso una función de onda completamente antisimétrica pues necesariamente dos de las partículas están en el mismo estado  $\beta$ . Sí se puede formar dos combinaciones, una simétrica de a dos y otra antisimétrica de a dos, ortonormales a  $\psi^S$ :

$$\begin{aligned}\psi_{R_S} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(2\psi_I - \psi_{II} - \psi_{III}) \\ \psi_{R_A} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_I - \psi_{II})\end{aligned}\tag{8.42}$$

Es fácil ver que una permutación puede mezclar a  $\psi_{R_S}$  con  $\psi_{R_A}$ ,

$$\mathcal{P}_{12}\psi_{R_S} = -\frac{1}{2}\psi_{R_S} + \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_{R_A}\tag{8.43}$$

cosa que no sucede con las funciones de onda totalmente antisimétricas.

Concluamos remarcando nuevamente uno de los puntos fundamentales que hemos establecido como un postulado, respecto de partículas idénticas: la función de onda que describe un sistema cuántico de partículas idénticas es simétrica o antisimétrica.

Experimentalmente se ha encontrado que las partículas que forman la materia (electrones, quarks, ...) están descritas por funciones de onda antisimétricas mientras que las que median las interacciones (fotones, gluones, ...) por funciones de onda simétricas. Las primeras corresponden a partículas de spin semientero y las segundas de spin entero<sup>23</sup>.

Tenemos entonces

---

<sup>23</sup>Notemos al pasar que el “bosón de Higgs”, la partícula que en la teoría estándar

- materia  $\longrightarrow$  spin semientero, función de onda antisimétrica
- interacciones  $\longrightarrow$  spin entero, función de onda simétrica

Esto no es un hecho accidental y ya lo mencionamos cuando señalamos la existencia del teorema de spin-estadística. Cuando se examina el comportamiento estadístico de un sistema de partículas idénticas cuánticas, se encuentra una relación muy profunda entre el momento angular (de spin) de las funciones de onda del sistema, el tipo de función de onda y la estadística cuántica que las describe. Se habla de estadística de Bose-Einstein para bosones (de spin entero) y de Fermi-Dirac para fermiones (de spin fraccionario). El caso antisimétrico corresponde a fermiones (que obedecen el principio de exclusión de Pauli y garantiza que la materia no “condense” en el sentido de que las partículas que la forman no tiendan a estar todas en el mismo estado de energía más bajo) y el simétrico a bosones. Esta es la conexión que establece el teorema de spin-estadística y la manera más general de probarlo es en el marco axiomático de la teoría cuántica de campos.

- fermiones  $\Longleftrightarrow$  función de onda antisimétrica
- bosones  $\Longleftrightarrow$  función de onda simétrica

---

de las interacciones electrodébiles es responsable de que las partículas que forman la materia sean masivas y que fue detectado en 2013 en experimentos de colisión de protones en el Gran acelerador de hadrones (LHC) del CERN tiene spin cero (entero) a diferencia de campos de gauge (intermediarios de las interacciones) que tienen spin 1.

## Clase 9

### Partículas idénticas, mecánica estadística y límite clásico

Hemos visto que los sistemas cuánticos de partículas idénticas tiene que ser descriptos por funciones de onda simétricas (en el caso de bosones) o antisimétricas (en el caso de fermiones).

En el caso de fermiones como los electrones, cuando no interactuaban entre ellos o lo hacían tan débilmente que podíamos considerarlos como partículas independientes unas de las otras, vimos que podíamos expresar la función de onda como un determinante (de Slater),

$$\psi^A = \tilde{\mathcal{N}} \begin{bmatrix} \phi_{\alpha_1}(1) & \phi_{\alpha_1}(2) & \dots & \phi_{\alpha_1}(N) \\ \phi_{\alpha_2}(1) & \phi_{\alpha_2}(2) & \dots & \phi_{\alpha_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{\alpha_N}(1) & \phi_{\alpha_N}(2) & \dots & \phi_{\alpha_N}(N) \end{bmatrix} \quad (9.1)$$

donde cada  $\phi_j(k)$  era la solución de la ecuación de Schrödinger de la partícula  $k$ -ésima con energía  $E_j$ .

Dada la validez del principio de exclusión de Pauli, como es el caso para los electrones, hubiera bastado decir cuál de los estados  $\alpha_i$  posibles ( $i = 1, 2, \dots$ ), está ocupado (con un único fermión) y cuál no. Es decir, si el número  $n_i$  de ocupación del estado  $\alpha_i$  es  $n_i = 1$  o es  $n_i = 0$ . Es decir que en lugar de tener que escribir el determinante completo, de manera abreviada podemos escribir un dado estado en notación de ket así:

$$|\psi\rangle^A = |n_1 = 1, n_2 = 0, n_3 = \dots\rangle^A \quad (9.2)$$

o, de manera ms simple

$$|\psi\rangle^A = |1, 0, \dots\rangle^A \quad (9.3)$$

Aquí indicamos con  $|\rangle^A$  que el estado está adecuadamente antisimetrizado. No es un azar que esta notación de números de ocupación nos recuerde los métodos de la mecánica estadística. Como dijimos, puede mostrarse que los fermiones que tienen spin semientero, obedecen una estadística cuántica de Fermi-Dirac mientras que los bosones, con spin entero, una de Bose-Einstein.

¿Qué sucede con el principio de indistinguibilidad asociado a la formulación cuántica de la dinámica de partículas idénticas en el límite clásico? Vimos que dadas dos partículas idénticas, la función de onda  $\psi_{\pm}$  tiene que ser simétrica o antisimétrica,

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(1, 2) \pm \psi(2, 1)) \quad (9.4)$$

La densidad de probabilidad será entonces

$$dP = \frac{1}{2} (|\psi(1, 2)|^2 + |\psi(2, 1)|^2 \pm 2\text{Re}\psi(1, 2)\psi^*(2, 1)) d^3x^1 d^3x^2 \quad (9.5)$$

Notemos que estamos considerando un caso más general que el de partícula independiente que hemos estudiado hasta ahora y por eso incluimos el tercer término en el lado derecho de la ec.(9.5) (caso contrario aparecerían módulos de las funciones de partícula independiente al cuadrado). En efecto, en el caso de partículas que no interactúan entre sí (i.e. caso de partículas independientes), en la integral del tercer término aparecerían productos como  $\int d^3x^1 \psi_1^*(x^1) \psi_2(x^1) = 0$  puesto que las autofunciones de partícula independiente son ortogonales.

En el límite clásico, las funciones de onda corresponderán a paquetes bien localizados y que no se solapan. En tal caso,  $\psi(1, 2)$  será cero en todo el espacio salvo en una región finita  $A$  y  $\psi(2, 1)$  será nula salvo en otra región finita  $B$  y que además  $A \cap B = 0$ . Entonces el tercer término de (9.5), que es un término de interferencia, se anulará en todo el espacio en el límite clásico y las dos partículas devienen así distinguibles.

Ahora analizaremos los casos en que existen interacciones.

## Interacción de intercambio

Vamos ahora a discutir un primer caso en que las partículas interactúan entre así.

Consideremos el caso de partículas idénticas, cargadas, en presencia de un campo eléctrico constante. Hemos aprendido en el curso de mecánica cuántica I que en este caso, el hamiltoniano  $\hat{H}$  no incluye términos con operador de spin  $\hat{S}$ , es decir que  $\hat{H}$  es diagonal en lo que respecta al spin) y la función de onda se factoriza trivialmente en una parte que depende solo de las coordenadas  $r_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) y otra que depende solo de las variables de spin,  $\sigma_i$ ,

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \dots, \vec{\sigma}_N) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \chi(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \dots, \vec{\sigma}_N) \quad (9.6)$$

(Al escribir el vector  $\vec{\sigma}$  estamos indicando que para especificar el spin debemos tener en cuenta  $\hat{S}^2$  y  $\hat{S}_z$ ). Nótese que el hecho de que  $\hat{H}$  no contenga al operador de spin no implica que la partícula cuya dinámica es gobernada por  $\hat{H}$  no tenga spin.

En principio, el factor  $\chi$  de la función de onda es arbitrario ya que como el hamiltoniano no contiene al spin,  $\hat{H}$  solo determina la dependencia de las coordenadas. O sea que parecería que podemos olvidar el spin para resolver tal problema. Pero si se trata de un sistema de partículas idénticas, veremos que la necesidad de simetría o antisimetría de la función de onda completa (i.e., los dos factores incluidos) hace que el spin juegue un rol aún en este caso.

Para comprender esto, consideremos el caso más simple, de dos partículas idénticas que obedecen la ecuación de Schrödinger,

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2; t) = \hbar i \frac{\partial \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2; t)}{\partial t} \quad (9.7)$$

con un hamiltoniano en el que el operador de spin está ausente (no hay interacción spin-órbita, no hay campo magnético, etc). Es decir un hamiltoniano que podemos escribir así:

$$\hat{H} = \hat{H}_c \otimes I_\sigma \quad (9.8)$$

donde los subíndices  $c$  y  $\sigma$  indican los factores de coordenadas y de spin del producto tensorial con el que debe escribirse el hamiltoniano. En el

caso presente el factor de spin actúa trivialmente como la identidad en el espacio de las funciones de onda del sistema.

Si escribimos a la función de onda así:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2) \quad (9.9)$$

entonces, para determinar los niveles de energía del sistema se estudia el problema estacionario para el factor dependiente de las coordenadas.

$$\hat{H}\psi_\alpha(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_\alpha\psi_\alpha(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (9.10)$$

En principio, a partir de las autofunciones de onda espaciales  $\psi_\alpha$  podremos construir autofunciones simétricas y antisimétricas.

Consideremos el caso en que se trata de bosones de spin cero. En tal caso, la parte de spin que hemos llamado  $\chi$  en la ec.(9.9) estará ausente de la ec.(9.10). Por tratarse de bosones, en general la función de onda  $\Psi$  debe ser simétrica por lo que en este caso, sin spin, la función de onda de la parte espacial, que llamamos  $\psi$ , es la única presente por ello debe ser simétrica.

Se trata entonces de un problema de dos bosones idénticos con un potencial adecuado, por ejemplo coulombiano en que, intercambiarlos, equivale a una inversión espacial, un cambio de paridad. En efecto, dado el vector  $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ , el cambio  $1 \leftrightarrow 2$  equivale al cambio  $\vec{r}_{12} \rightarrow \vec{r}_{21} = -\vec{r}_{12}$ . En un desarrollo en armónicos esféricos, las autofunciones con  $l$  impar cambiarán ante paridad por lo que quedan descartadas en la construcción de estados simétricos.

Con este ejemplo hemos aprendido entonces que aunque el spin esté ausente del hamiltoniano, el hecho de que las partículas sean bosones idénticos a los que se aplica el principio de indistinguibilidad que enunciamos, afecta la forma de la función de onda. Hablamos por ello de una *interacción de intercambio* que produce el efecto de prohibir los estados con  $l$  impar.

Si se tratara de fermiones de spin  $1/2$ , la función de onda tendría **una parte de spin  $\chi$  no trivial y, a pesar de estar el spin ausente en el hamiltoniano**, por lo que debemos encargarnos de construir las autofunciones que lo contienen. Como aclaramos al iniciar este tema, consideramos el caso de la mecánica cuántica no relativista pero en la que los espinores tienen dos componentes (espinores de Pauli).

Aprendimos en el curso de mecánica cuántica I que, tratándose de dos partículas de spin  $1/2$ , el spin total puede ser  $\sigma = 0, 1$ . Construyamos las funciones de onda de spin asociadas con estos dos valores. En el caso de spin total 0, las componentes  $\sigma_z$  deben estar desapareadas para que el spin total  $\vec{\sigma} = \vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2$  sume a cero. La función de onda de spin debe ser entonces una combinación lineal de la forma:

$$\chi_0 = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + B \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \quad (9.11)$$

donde los coeficientes  $A$  y  $B$  deben ajustarse adecuadamente.

Para encontrar la solución que corresponde a  $s = 0$  conviene escribir a  $\hat{s}^2$  en la forma

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_{1z}\hat{s}_{2z} + \hat{s}_{1+}\hat{s}_{2-} + \hat{s}_{1-}\hat{s}_{2+} \quad (9.12)$$

de manera que los productos  $\hat{s}_{1+}\hat{s}_{2-}$ ,  $\hat{s}_{1-}\hat{s}_{2+}$  de manera de completar los doble productos asociados con  $s_x$  y  $s_y$  ya que como siempre

$$\begin{aligned} \hat{s}_+ &= \hat{s}_x + i\hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{s}_- &= \hat{s}_x - i\hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (9.13)$$

Resulta aquí que es la solución  $A = -B$  la que debe ser elegida para que  $s = 0$ .

Para mostrar esto se ve fácilmente que

$$\hat{s}_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad \hat{s}_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (9.14)$$

y análogamente

$$\hat{s}_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0, \quad \hat{s}_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9.15)$$

De esta manera la función de onda de spin adecuadamente normalizada toma la forma

$$\chi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right) \quad (9.16)$$



Basta aplicar el operador  $\hat{\sigma}_z = \hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}$  para comprobar que esta combinación antisimétrica corresponde a  $s_z = 0$ , lo cual es consistente con que el spin total sea nulo.

Luego, como la función de onda total debe ser antisimétrica por tratarse de un sistema de fermiones idénticos, la parte de coordenadas de la función de onda deberá ser simétrica de manera que el producto sea antisimétrico. Nuevamente podemos hablar de una interacción de intercambio que contribuye al comportamiento del sistema de fermiones idénticos.

## La simetría de sistemas compuestos

Consideremos el caso de objetos compuestos por partículas ligadas fuertemente. Son ejemplo de esto los protones y neutrones que están formados por 3 quarks. Tiene sentido en este caso preguntarse cuál es la simetría de la función de onda de un sistema de muchos de estos objetos ligados (por ejemplo la que describe el estado de protones y neutrones que están formados por 3 quarks o la función de onda de los mesones que están formados por 2 quarks).

Consideremos objetos compuestos idénticos que llamaremos  $B_i$  (con  $i = 1, 2$  indicando el estado de cada uno en la función de onda que los describe),

$$\Phi(B_1, B_2) \rightarrow \Phi(B_2, B_1) , \quad (9.17)$$

Podemos pensar que para intercambiarlos lo hacemos con cada partícula que forma a  $B_1$  con su correspondiente en  $B_2$ . Si las partículas que forman el compuesto  $B$  son fermiones (como es el caso de los quarks en que son 3 fermiones los que forman, por ejemplo, un protón) cada intercambio cambiará el signo de la función de onda por ser ésta antisimétrica.

Es decir que en general, un compuesto de fermiones se comportará como un fermión solo si tiene un número impar de componentes, como sucede en general con los bariones, partículas pesadas que incluyen a los nucleones, a los bariones  $\Omega, \Lambda \dots$  y que están formados por 3 quarks que son fermiones de spin  $1/2$ .

La partícula compuesta por fermiones será un bosón si el número de componentes fermiónicas es par (como sucede con los mesones  $\pi$ , kaones, ...). Cambiando un número par de bosones la función de onda

del compuesto no cambia de signo.

El número de bosones o fermiones que pueda contener el compuesto no importa. Si al compuesto lo forman distintos tipos de partículas, tiene sentido hablar de una **simetría ante intercambio de cada tipo de partícula separadamente**.

Vale la pena señalar que en las décadas 1960-1970 hubo muchas discusiones referidas al modelo de quarks propuesto por Murray Gell-Mann and George Zweig en 1964 para describir a los hadrones (partículas compuestas que pueden ser bariones (partículas con mucha más masa que por ejemplo los electrones) o mesones (con una masa intermedia entre el electrón y los protones)).

Para entender las razones de tales discusiones, notemos que en la década de 1960 además del spin  $1/2$ , se pensaba que todos los otros números cuánticos de los 3 quarks que formaban ciertos bariones (como el llamado  $\Delta^{++}$ ) eran tales que la partícula compuesta resultaba tener una función de onda simétrica, lo cual contradecía el principio de exclusión de Pauli.

Tal contradicción obedecía a que no se había aceptado totalmente la propuesta que Oscar Greenberg hizo en 1964 [35], de asignar a los quarks un número cuántico adicional a los ya conocidos, que fue llamado (desgraciadamente según R. Feynman, “color” (rojo, azul y verde aunque por supuesto, nada tiene que ver con los colores que llevan ese nombre). Esto resuelve el problema: el agregado de un número cuántico distinto de “color” diferente a cada uno de los 3 quarks que componen el barión hace que se pueda construir una configuración totalmente antisimétrica consistente con todos los números cuánticos medidos para el  $\Delta^{++}$ .

Como dijimos, la partícula  $\Delta^{++}$  es un barión compuesto por tres quarks que tienen todos los números cuánticos idénticos salvo uno que llamamos “sabor”, que designamos en este caso con la letra  $u$ :

- Spin  $J(\Delta^{++}) = 3/2$  ( $L = 0$ )
- Contenido de quarks:  $|uuu\rangle$   
( $u$  representa a un quark con un dado número cuántico llamado de sabor al que se designa con esa letra  $u$ )

- Necesariamente los spines deben estar todos alineados:  $|u^\uparrow u^\uparrow u^\uparrow\rangle \Rightarrow$  se viola el principio de exclusión de Pauli
- Solución:  $\frac{1}{\sqrt{6}}\varepsilon_{ijk}|u_i^\uparrow u_j^\uparrow u_k^\uparrow\rangle$ ,  $i, j, l$ : índices de color

Es decir, es necesario, además del número cuantico de sabor el de color.

## Atomos de dos electrones

Estudiaremos ahora los niveles de energía de átomos con dos electrones. En particular, consideraremos al Helio. Aún si tomamos al núcleo como una única partícula se trata de un problema de 3 partículas, muy complicado ya a nivel clásico en el que no hay una solución exacta.

Como la masa del núcleo es muy grande respecto de la de los dos electrones, podremos aproximar el problema considerando que el núcleo está en reposo y así el problema se ve reducido al estudio de la dinámica de dos electrones interactuando entre sí por el potencial coulombiano repulsivo entre las dos partículas con carga negativa y con el potencial coulombiano atractivo del núcleo tomado como un potencial externo. Esto sigue siendo un problema de difícil solución, aún en el caso clásico.

El método cuántico semiclásico (basado en las reglas de Bohr-Sommerfeld), aplicado antes de la construcción de la “nueva” mecánica cuántica, había tenido escaso éxito en el análisis de este problema por lo que fue un gran triunfo el acuerdo experimental que se obtuvo utilizando la teoría cuántica en la formulación de Schrödinger, teniendo en cuenta las peculiaridades motivadas por el hecho de tratarse de dos partículas idénticas con spin.

El hamiltoniano que describe al sistema, en ausencia de campos externos al átomo, y sin tener en cuenta el acoplamiento  $\vec{L} \cdot \vec{s}$  no contiene al spin. Entonces podemos escribir a la función de onda como

$$\Psi(1, 2) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi(1, 2) \quad (9.18)$$

es decir que la parte de spin se factoriza entonces trivialmente.

En cuanto a la parte de coordenadas, el problema estacionario toma la forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2 + \left(\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2Z}{r_1} - \frac{e^2Z}{r_2} - E\right)\right)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (9.19)$$

Hemos utilizado aquí unidades atómicas (“ua”) en que  $m_e = 1$ ,  $e = 1$ ,  $\hbar = 1$  que fue utilizado por Douglas Hartree<sup>24</sup> para resolver el problema. Al final del cálculo se pueden restituir ambos parámetros fácilmente. Como las masas de los electrones son iguales a 1 en estas unidades, podemos reacomodar la ecuación así

$$\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + 2\left(E + \frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} - \frac{1}{r_{12}}\right)\right)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (9.20)$$

Vemos que el cambio  $\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2$  deja invariante al hamiltoniano por lo que las autofunciones pueden ser escritas como autofunciones de energía y paridad definida, con autovalor +1 (simétrica) o -1 (antisimétrica),

$$\begin{aligned} \psi_p(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= +\psi_p(\vec{r}_2, \vec{r}_1), & \text{parahelio} \\ \psi_o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= -\psi_o(\vec{r}_2, \vec{r}_1), & \text{ortohelio} \end{aligned} \quad (9.21)$$

Como la función de onda total (9.18) debe ser antisimétrica, necesariamente la parte de spin tendrá que tener la simetría opuesta a la de la parte de coordenadas,

$$\begin{aligned} \chi_p(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) &= -\chi_p(\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_1), & \text{parahelio} \\ \chi_o(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2) &= +\chi_o(\vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_1), & \text{ortohelio} \end{aligned} \quad (9.22)$$

Ya vimos que la función de onda de spin dos fermiones idénticos con  $s = 1/2$  que se acoplan para dar un spin total  $S = 0$  es antisimétrica por lo que en este caso el factor espacial debe ser simétrico (parahelio).

El factor de spin tiene entonces la forma

$$\chi_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right) \quad \text{parahelio, singulete } s = 0 \quad (9.23)$$

---

<sup>24</sup>D.R. Hartree, *The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods* Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 24 (1928) 89 Cambridge Univ. Press.

Aplicando el operador  $\hat{s}^2$  escrito en la forma (9.12) a la autofunción (9.23) se ve fácilmente que  $s = 0$ .

También es fácil ver que cuando los spines se acoplan para dar  $s = 1$ , las funciones de onda de spin son simétricas y el factor espacial entonces debe ser antisimétrico, (ortohelio):

$$\begin{aligned}\chi_o^{-1} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \quad \text{ortohelio, triplete } s_z = -1 \\ \chi_o^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right) \quad \text{ortohelio, triplete } s_z = 0 \\ \chi_o^1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \quad \text{ortohelio, triplete } s_z = +1\end{aligned}\tag{9.24}$$

## Cálculo perturbativo

Para estudiar las funciones de onda de coordenadas, se debe apelar a un método perturbativo. Se comienza por escribir al hamiltoniano en la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_p\tag{9.25}$$

Escribiremos a  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_p$  en la forma

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) \\ \hat{H}_p &= -\frac{Z}{r_1} - V_1(\vec{r}_1) - \frac{Z}{r_2} - V_2(\vec{r}_2) + \frac{1}{r_{12}}\end{aligned}\tag{9.26}$$

donde se suma dos potenciales  $V_1(\vec{r}_1)$  y  $V_2(\vec{r}_2)$  en principio arbitrarios en la primera línea y se los resta en la segunda (de manera que, en conjunto nada se ha cambiado). Pero su rol es el siguiente: una elección adecuada hará que

1.  $\hat{H}_0\psi = E_0\psi$  sea un problema resoluble.
2. De manera de poder considerarlo que  $\lambda\hat{H}_p$  sea una pequeña perturbación a tratar en el marco de la teoría de perturbaciones

Aquí  $\lambda$  es, como aprendimos al estudiar la teoría de perturbaciones, un parámetro introducido para controlar el orden de las perturbaciones)

Como  $\hat{H}_0$  se separó en una parte que solo depende de las coordenadas  $\vec{r}_1$  y otra que solo depende de  $\vec{r}_2$ , a orden cero de perturbaciones la función de onda será un producto, adecuadamente simetrizado (parahelio) o antisimetrizado (ortohelio), de funciones de onda de una partícula. Habrá entonces para el hamiltoniano  $\hat{H}_0$  tres tipos de soluciones a orden cero:

- Cada partícula está en el estado fundamental, lo que corresponde al estado fundamental del Helio
- una solución está en el estado fundamental y la otra en un estado excitado.
- ambas partículas están en estados excitados

Para el caso del Helio, solo los estados con al menos un electrón en el fundamental son importantes ya que cuando ambos están en estados excitados se encuentra que tienen más energía que la suma del ion  $\text{He}^+$  + un electrón libre y por lo tanto por lo que ese estado se desintegrará en un ion y un electrón libre.

Comencemos entonces por el caso en que ambos electrones están en el estado fundamental. Si bien en general podríamos tomar  $V_1 \neq V_2$ , la elección más simple y obvia será

$$V_1(\vec{r}) = V_2(\vec{r}) = -\frac{Z}{r} \quad (9.27)$$

que corresponde a resolver para  $H_0$  un caso que estudiamos ya para átomos hidrogenoides ya que no hay interacción entre ellos.

Con esto, la única perturbación a tratar es  $1/r_{12}$  y la funciones de onda sin perturbar para el estado fundamental corresponderá al productos de dos funciones de onda  $\psi^{(0)}$  del estado fundamental de átomos hidrogenoides. Como se trata de un producto de funciones idénticas ya que ambos electrones están en el estado fundamental, el resultado solo puede ser simétrico (parahelio). Debe ir acompañado entonces por una función de onda de spin que es antisimétrica y está dada por (9.23).

Tendremos entonces, para el nivel fundamental, como función de onda de coordenadas, sin perturbar, el producto de las soluciones obtenidas

para átomos hidrogenoides

$$\psi_p^{(0)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi^{(0)}(\vec{r}_1) \psi^{(0)}(\vec{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi} \exp(-Z(r_1 + r_2)) \quad (9.28)$$

En cuanto a la energía  $E$ , escribiendo

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \dots \quad (9.29)$$

tendremos

$$\lambda E^{(1)} = \frac{Z^6}{\pi^2} \int d^3r_1 d^3r_2 \exp(-2Z(r_1 + r_2)) \frac{1}{r_{12}} = \frac{5}{8}Z \text{ ua} \quad (9.30)$$

Nótese que los términos de potenciales individuales en  $\hat{H}_p$  se cancelan con la elección que hicimos para  $V_1$  y  $V_2$  y la integral se calcula fácilmente expandiendo  $1/r_{12}$  en armónicos esféricos.

En el caso del Helio se tiene  $Z = 2$  con lo que, siendo que

$$E^{(0)} = -2 \frac{(Z = 2)^2}{2(n = 1)^2} = -4 \text{ ua} \quad (9.31)$$

se tendrá, como corrección al primer orden

$$E = -4 + \frac{5}{4} = -2.75 \text{ ua} \quad (9.32)$$

un valor en buen acuerdo con la medida experimental que es un 5% menor,  $E^{exp} = -2.904$  ua. El cálculo perturbativo se puede mejorar teniendo en cuenta que cada electrón apantalla la carga del núcleo.

En cuanto a los estados excitados del helio, que como dijimos corresponde a un electrón en el estado fundamental y el otro en uno excitado, discutiremos en lo que sigue un aspecto importante del cálculo perturbativo. Para comenzar, si  $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$  la función de onda espacial antisimétrica (**ortohelio**) se anula. Esto no sucede para la simétrica (**parahelio**) por lo que la probabilidad de que los dos electrones estén muy cerca es más pequeña para los estados orto que en los estados para. Luego, en el estado “para” los electrones pueden llegar a estar muy cerca y por lo tanto la energía de tales estados tiene que ser más alta.

En resumen, el esquema de niveles del átomo de helio o iones con dos electrones tiene un estado de energía mínima que corresponde al parahelio. En cuanto a los estados excitados, (que corresponderán a uno de los electrones en el estado fundamental y el otro en uno excitado), es mayor la energía de los estados para que de los estados orto.





# Clase 10

## Estados excitados del helio

En la clase anterior estudiamos al átomo de helio en su estado fundamental eligiendo dos potenciales idénticos del tipo de átomos hidrogenoides ( $V_1$  y  $V_2$ ) para cada electrón que sumamos en un sector cuya solución exacta conocemos y restamos en el que corresponde a una perturbación producida por la interacción entre ambos electrones. Aplicando teoría de perturbaciones a primer orden obtuvimos como corrección un valor de -2.75 ua respecto de la energía ignorando la perturbación, un valor razonable frente al experimental -2.90 ua.

Para estudiar los estados excitados del helio de manera perturbativa, es necesario considerar estados correspondientes a niveles diferentes para cada uno de los electrones. No tiene demasiado sentido entonces elegir  $V_1 = V_2$  (como hicimos en la clase anterior para el estado fundamental) al separar el hamiltoniano en una parte de resolución exacta  $\hat{H}_0$  y una perturbación  $\hat{H}_p$ ,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_p \quad (10.1)$$

con  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_p$  dados por

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V_1(\vec{r}_1) + V_2(\vec{r}_2) \\ \hat{H}_p &= -\frac{Z}{r_1} - V_1(\vec{r}_1) - \frac{Z}{r_2} - V_2(\vec{r}_2) + \frac{1}{r_{12}} \end{aligned} \quad (10.2)$$

Una suposición razonable propuesta por Heisenberg en 1927<sup>25</sup> para el potencial efectivo a que está sometido cada electrón es la siguiente:

---

<sup>25</sup>W. Heisenberg, Z. Physik **99** (1927) 499

de los dos electrones uno ocupará un estado de energía más baja que el otro. El que esté en el estado de menor energía, más cerca del núcleo, sentirá la atracción coulombiana de una carga  $Ze$  mientras que el que está excitado en una órbita de radio mayor, será atraído por una carga efectiva  $(Z - 1)e$  a causa del apantallamiento del electrón más cercano al núcleo. Luego, es razonable elegir

$$V_1(r_1) = -\frac{Z}{r_1}, \quad V_2(r_2) = -\frac{Z-1}{r_2} \quad \text{situación A} \quad (10.3)$$

Con esta elección, se trata a ambos electrones de manera no-simétrica: la fórmula (10.3) corresponde al caso en que el electrón “2” es el apantallado. Pero podemos considerar análogamente otra situación, que llamaremos “B” en la que el apantallado sea el electrón 1

$$V_1(r_1) = -\frac{Z-1}{r_1}, \quad V_2(r_2) = -\frac{Z}{r_2} \quad \text{situación B} \quad (10.4)$$

Debemos ser cuidadosos al manejar esta asimetría a primer orden de perturbaciones en el parámetro  $\lambda$ . Obviamente, por la construcción que hacemos en la que los potenciales son agregados en lo que llamamos  $H_0$  y sustraídos en  $H_p$  debe valer la igualdad

$$\hat{H} = \hat{H}_0^A + \lambda \hat{H}_p^A = \hat{H}_0^B + \lambda \hat{H}_p^B \quad (10.5)$$

o

$$\hat{H}_0^A - \hat{H}_0^B = \lambda(\hat{H}_p^B - \hat{H}_p^A) \quad (10.6)$$

O sea que podemos despreciar la diferencia de los hamiltonianos a orden cero respecto del parámetro  $\lambda$  que da la magnitud de la perturbación pues esa diferencia resulta ser según (10.6) de orden 1 en  $\lambda$ . Es decir, los autovalores de  $H_0^A$  y  $H_0^B$  que llamaremos  $E_0$  coinciden a orden cero:

$$\hat{H}_0^A \psi^{A(0)} = E^{(0)} \psi^{A(0)}, \quad \hat{H}_0^B \psi^{B(0)} = E^{(0)} \psi^{B(0)} \quad (10.7)$$

O bien  $\psi^{A(0)}$  y  $\psi^{B(0)}$  coinciden o bien son autofunciones ortogonales con el mismo autovalor. Las elegiremos ortogonales y a posteriori veremos hasta dónde esta elección es válida.

Escribiremos entonces, a orden  $\lambda$

$$\psi = \psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} \quad (10.8)$$

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} \quad (10.9)$$

Para tratar a ambos electrones en un pie de igualdad, elegiremos a la función de onda sin perturbar así:

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^{A(0)} + \psi^{B(0)}) \quad (10.10)$$

No confundir esto con un tratamiento en que la función de onda sin perturbar del sistema sea simétrica ya que, vimos que el estado excitado de energía más baja es de hecho antisimétrico. en las coordenadas. Lo que estamos haciendo tiene la forma de un promedio entre las dos situaciones.

Tenemos entonces

$$(\hat{H} - E)\psi = 0 \Rightarrow (\hat{H} - E)\psi^{(0)} + \lambda(\hat{H} - E)\psi^{(1)} = 0 \quad (10.11)$$

o, utilizando la ec.(10.9) que establece que  $E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)}$  podemos escribir

$$(\hat{H} - E^{(0)} - \lambda E^{(1)}) \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^{A(0)} + \psi^{B(0)}) + \lambda(\hat{H} - E)\psi^{(1)} = 0 \quad (10.12)$$

Cuando  $\hat{H} - E^{(0)}$  actúa sobre  $\psi^{A(0)}$  lo reemplazamos por  $\hat{H}_0^{(A)} + \lambda\hat{H}_1^{(A)} - E^{(0)}$  y cuando actúa sobre  $\psi^{B(0)}$  por  $\hat{H}_0^{(B)} + \lambda\hat{H}_1^{(B)} - E^{(0)}$ . En cuanto al último término del lado izquierdo podemos poner  $\hat{H} = \hat{H}^{(0)}$  y  $E = E^{(0)}$  pues ya hay un factor  $\lambda$  que corresponde al orden en que estamos calculando. Luego de un poco de álgebra se tiene:

$$\lambda\sqrt{2}(\hat{H} - E)\psi^{(1)} + \lambda \left( \hat{H}_p^A \psi^{A(0)} + \hat{H}_p^B \psi^{B(0)} \right) - \lambda E^{(1)} (\psi^{A(0)} + \psi^{B(0)}) = 0 \quad (10.13)$$

Multiplicando por  $\psi^{A(0)*} + \psi^{B(0)*}$  e integrando se obtiene

$$\begin{aligned} \lambda E^{(1)} \int dV |\psi^{A(0)} + \psi^{B(0)}|^2 &= \lambda\sqrt{2} \int dV (\psi^{A(0)*} + \psi^{B(0)*}) (\hat{H} - E)\psi^{(1)} + \\ &\lambda \int dV (\psi^{A(0)*} + \psi^{B(0)*}) \left( \hat{H}_p^A \psi^{A(0)} + \hat{H}_p^B \psi^{B(0)} \right) \end{aligned} \quad (10.14)$$

donde hemos anotado  $dV = d^3x_1 d^3x_2$ ).

Como  $\hat{H}$  es hermítico, el primer término de la derecha puede reescribirse así:

$$\begin{aligned} \lambda\sqrt{2} \int dV \left( \psi^{A(0)*} + \psi^{B(0)*} \right) (\hat{H} - E) \psi^{(1)} = \\ \lambda\sqrt{2} \int dV \underbrace{\left( (\hat{H} - E) \left( \psi^{A(0)} + \psi^{B(0)} \right) \right)^*}_{\text{esto es de orden } \lambda} \psi^{(1)} \end{aligned} \quad (10.15)$$

El orden  $\lambda$  indicado arriba resulta de que la parte de orden cero, actuando sobre las autofunciones originales se anula idénticamente. Por lo tanto da una contribución de orden  $\lambda^2$  que puede despreciarse. Teniendo en cuenta que elegimos que  $\psi^{A(0)} \perp \psi^{B(0)}$ , tendremos finalmente, para la igualdad entre la corrección de la energía y el segundo término de la derecha de la ecuación (10.14),

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} \int dV \left( \psi^{A(0)*} + \psi^{B(0)*} \right) \left( \hat{H}_p^A \psi^{A(0)} + \hat{H}_p^B \psi^{B(0)} \right) \quad (10.16)$$

Debemos ahora especificar las funciones de onda  $\psi^{A(0)}$  y  $\psi^{B(0)}$ . Llamando  $v(r)$  a la función de onda del estado fundamental para un átomo hidrogenoide, que no depende de las variables angulares y  $u_{nlm}(\vec{r})$  a la de un estado excitado, tendremos

$$\begin{aligned} \psi^{A(0)} &= v(r_1) u_{nlm}(\vec{r}_2) \\ \psi^{B(0)} &= \pm v(r_2) u_{nlm}(\vec{r}_1) \end{aligned} \quad (10.17)$$

La elección de signo  $+$  corresponderá a estados para (función de onda espacial simétrica), la de signo  $-$  a estados orto (función de onda espacial antisimétrica). En la función de onda  $u_{nlm}(\vec{r})$   $n$  debe ser  $n \geq 2$  pues describe un estado excitado. Tendremos además que tener en cuenta en  $E^{(0)}$  las energías sin perturbar de cada uno de los dos electrones

$$E^{(0)} = -\frac{Z^2}{2} - \frac{(Z-1)^2}{2n^2} \quad (10.18)$$

El haber considerado funciones de onda de dos estados diferentes tales que  $\psi^{A(0)} \perp \psi^{B(0)}$  equivale a que valga

$$\int d^3x v(\vec{r}) u_{nlm}(\vec{r}) = 0 \quad (10.19)$$

Como  $v(r)$  no tiene parte angular, la igualdad (10.19) se cumplirá trivialmente si  $l \neq 0$  ya que en tal caso habrá un único armónico esférico cuya integral angular se anula. Para  $l = 0$ , como  $u$  y  $v$  son soluciones de distintos problemas (con distintos  $Z$ ), no tienen porqué ser ortogonales. O sea que para  $l = 0$  nuestra aproximación está fuera de control. Descartaremos entonces en lo que sigue este caso  $l = 0$

Reemplazando en (10.16) la forma de las interacciones tendremos

$$E^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3x_1 d^3x_2 (v(r_1)u_{nlm}(\vec{r}_2) \pm v(r_2)u_{nlm}(\vec{r}_1))^* \times \\ \left( \left( \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} \right) v(r_1)u_{nlm}(\vec{r}_2) \pm \left( \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_1} \right) v(r_2)u_{nlm}(\vec{r}_1) \right) \quad (10.20)$$

Como se trata del caso  $l \neq 0$  podemos simplificar mucho esta expresión teniendo en cuenta la ortogonalidad entre  $u$  y  $v$ ,

$$E^{(1)} = J \pm K \quad (10.21)$$

$$J = \int d^3x_1 d^3x_2 \left( \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} \right) v(r_1)^2 |u_{nlm}(\vec{r}_2)|^2 \\ K = \int d^3x_1 d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} v(r_1)v(r_2)u_{nlm}^*(\vec{r}_1)u_{nlm}(\vec{r}_2) \quad (10.22)$$

A  $J$  se la conoce como “integral directa”: proviene de multiplicar los términos en que las autofunciones y sus conjugadas están en el mismo punto. En cuanto  $K$ , conocida como de “intercambio” cuando corresponden a distintos puntos.

Podemos interpretar a  $J$  en términos de potenciales coulombianos: incluye los efectos de la interacción de cada electrón con el núcleo y de los electrones entre sí. En cambio  $K$  tiene que ver con el intercambio de estados cuánticos de los electrones.

Tenemos entonces dos correcciones  $E^{(1)}$ , una para el caso  $J + K$  y otra para cuando se trata de  $J - K$ . Corresponden a los dos tipos de simetría espacial posible. El cálculo explícito de  $J$  y  $K$  se hace desarrollando  $1/r$  en serie de polinomios de Legendre. No lo detallaremos en esta clase pero podemos dar algunas propiedades cualitativas que se deducen de aproximar las integrales.

Para grandes  $n$ ,  $J$  tiende a cero según

$$\lim_{n \rightarrow \infty} J = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^3} F(Z, l) \quad (10.23)$$

Además,  $F(Z, l) \rightarrow 0$  cuando  $l \rightarrow \infty$ . Todo esto se puede probar utilizando el método WKB para la parte radial del problema estacionario ya que tal aproximación es válida para  $n$  grande. Una fórmula muy útil para los espectroscopistas es la que se obtiene aproximando el problema de la manera siguiente: para el caso del electrón más exterior, se suma el potencial coulombiano no perturbado producido por una carga apantallada  $Z - 1$  a la perturbación  $J$  :

$$E_R = -\frac{(1 - Z)^2}{2n^2} + J \approx \frac{(Z - 1)^2}{2(n + \delta_C)^2} \quad (10.24)$$

donde  $\delta_C$ ,

$$\delta_C = \frac{F}{(Z - 1)^2} \quad (10.25)$$

está ligada, como veremos más adelante, a los corrimientos de fase en teoría de scattering.

En cuanto a la integral de intercambio  $K$ , se procede de manera análoga. Nuevamente se puede probar que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} K = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^3} G(Z, l) \quad (10.26)$$

también definir

$$\delta_A = \frac{G}{(Z - 1)^2} \quad (10.27)$$

y así mejorar la fórmula de Rydberg para  $E_R$ . Se tiene entonces, agregando la energía del electrón en la capa más profunda,

$$E = -\frac{1}{2}Z^2 + E_R = -\frac{1}{2} \frac{(Z - 1)^2}{(n + \delta_C \pm \delta_A)^2} \quad (10.28)$$

correspondiendo el signo  $+$  al parahelio y el  $-$  al ortoheio.

## El método del "campo autoconsistente" a vuelo de pájaro

Cuanto más complejos se hacen los átomos, más complicado resulta un tratamiento similar al utilizado en el caso del helio para determinar los niveles de energía. Debe entonces apelarse a otras aproximaciones, entre las cuales se cuenta la del campo autoconsistente, que resulta muy útil en este contexto. El método hace varias suposiciones:

- Cada electrón en un sistema de muchos electrones es descripto por su propia función de onda.

Esta suposición, hecha por Hartree [15], implica que cada electrón está sujeto a un potencial único, resultante de su interacción con todos los demás electrones y con el núcleo. Evidentemente, para conocer exactamente (si existiera) tal potencial, deberíamos conocer exactamente todas las funciones de onda de las restantes partículas, de manera de poder calcular las densidades de carga y de ellas el potencial. Al no poder hacerlo, se propone un potencial "realista" que aproxime la situación, se calcula con él la función de onda aproximada, con ella se puede calcular una densidad de carga, con ella mejorar el potencial propuesto y así siguiendo. De allí el término de autoconsistente: en cada una de estas secuencias, se va logrando una auto consistencia entre la función de onda resultante y el potencial que la produce.

- Se postula el siguiente potencial que actúa sobre el electrón  $i$ -ésimo, producido por el núcleo y los demás electrones

$$V_i(\vec{r}_i) = \sum_{k \neq i} \int d\vec{\rho} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{\rho}|} |\psi_{k,\kappa}(\vec{\rho})|^2 - \frac{Z}{r_i} \quad (10.29)$$

Aquí  $\kappa$  representa el conjunto de números cuánticos del electrón  $k$ . Cada término de la suma representa la densidad de carga (recordemos que en nuestras convenciones  $e = 1$ ) producida por cada uno de los  $k \neq i$  electrones. Convolucionada con la función de Green del laplaciano esta fórmula reproduce la energía potencial del electrón en el campo coulombiano de los otros electrones. En cuanto al segundo término en (10.29) representa la contribución del núcleo a la energía potencial.



Si hay  $N$  electrones, cada uno obedecerá entonces una ecuación de Schrödinger estacionaria de la forma

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_i(\vec{r})\right)\psi_{i,\iota}(\vec{r}) = \epsilon_i\psi_{i,\iota}(\vec{r}) \quad (10.30)$$

En este punto se hace una tercera aproximación:

- Se impone *manu militari* simetría esférica al problema. Para ello, en lugar de usar en (10.30) el potencial (10.29), se utiliza uno que resulta de integrar  $V_i(\vec{r})$  sobre los ángulos:

$$V_i(r) \equiv \frac{1}{4\pi} \int \sin\theta d\theta d\varphi V_i(\vec{r}) \quad (10.31)$$

de manera que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo pasa a ser separable en coordenadas esféricas:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_i(r)\right)\psi_{i,\iota}(\vec{r}) = \epsilon_i\psi_{i,\iota}(\vec{r}) \quad (10.32)$$

Se escribe entonces

$$\psi_{i,\iota}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} R_{n,l}^i(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (10.33)$$

con  $R_{n,l}^i$  la parte radial que satisface

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 R_{nl}^i}{dr^2} + \left( \epsilon_{n,l} - V_i(r) - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right) R_{nl}^i = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (10.34)$$

Aquí  $n$  queda definido tomándolo tal que la función de onda  $R_{nl}$  tenga  $n - l - 1$  nodos (recordar el átomo de hidrógeno; no se incluye ni el cero del origen ni el del infinito).

Aún con todas estas simplificaciones, es evidente que dado que  $V_i(r)$  es una función en principio complicada de  $r$  y se trata de un sistema de  $N$  ecuaciones, (10.34) es de difícil solución. La idea de Hartree es comenzar por hacer una “elección inteligente” de funciones de onda de todos los electrones, sin atenerse al sistema de ecuaciones que éstas deben obedecer. Con ellas se calcula el potencial  $V_i(r)$  y recién entonces se resuelve con este potencial el sistema (10.34). Se obtiene entonces

funciones de onda que son un poco mejores que las propuestas inicialmente, con ellas se vuelve a calcular el potencial y así siguiendo hasta que el cambio entre una etapa y la siguiente sea menor que el error que se pretende para la determinación de los niveles de energía.

En este tratamiento no entra, en ninguna etapa la condición de que la función de onda del sistema de  $N$  electrones debe ser antisimétrica por tratarse de partículas idénticas de spin  $1/2$ . En realidad, se está tomando la función de onda del sistema como el simple producto de funciones de onda con lo que la interacción de intercambio es despreciada. Se puede sin embargo tener en cuenta al menos el principio de exclusión de Pauli eligiendo los números cuánticos de cada función de onda adecuadamente, de manera que no haya dos electrones en el mismo estado.

Estos problemas serán resueltos generalizando el método a lo que se conoce como aproximación de Hartree-Fock. En lugar de tomar a la función de onda del sistema como el mero producto, se construye el determinante de Slater, asegurando así la antisimetría de la función de onda. En cuanto a las interacciones de intercambio, se tratan de manera perturbativa, como se hizo en el caso del helio.



# Clase 11

## El método variacional de Hartree-Fock

Para incluir los efectos de la antisimetría de la función de onda de un sistema de  $N$  fermiones idénticos en el método de Hartree estudiaremos un método variacional que parte de elegir como función de onda de prueba para describir al sistema a una que, como determinante de Slater se expresa así:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \cdots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \cdots & \psi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \cdots & \psi_N(N) \end{vmatrix} \quad (11.1)$$

Cada función de onda de una partícula (se las llama orbitales para el caso de electrones en un átomo) es el producto de una parte espacial  $u$  y una de spin  $\chi$ :

$$\psi_i(p) = u_i(\vec{r}_p) \chi_i(\sigma_p) \quad (11.2)$$

Aquí  $\chi$  tiene la forma

$$\begin{aligned} \chi_{\frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \chi_{-\frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (11.3)$$

Las funciones de onda de partícula independiente serán ortogonales,

$$\int d^3x_p \psi_i(p) \psi_j(p) = \delta_{ij} \quad (11.4)$$

lo que se reduce, en vista de (6.43) a

$$\int d^3x_p u_i(\vec{r}_p) u_j(\vec{r}_p) = \delta_{ij} \quad (11.5)$$

El valor de expectación de cierto operador  $\hat{F}$  calculado con funciones de onda como la definida por (11.1) toma la forma

$$\langle \Psi_A | \hat{F} | \Psi_B \rangle = \frac{1}{N!} \int \sum_P \sum_Q \varepsilon_P \varepsilon_Q \prod_{i=1}^N \psi_i^{A*}(Q_i) \hat{F} \prod_{j=1}^N \psi_{P_j}^B(j) d^3x_j \quad (11.6)$$

donde hemos usado en el segundo factor que, bajo el producto, vale que  $\psi_j^B(P_j) = \psi_{P_j}^B(j)$ . Es decir, para  $\psi_i^{A*}$  permutamos los electrones y para  $\psi_{P_j}^B$  los estados.

Vamos ahora a escribir al producto doble como un único producto. Para ello notemos que podemos escribir  $j = Qi$ , ya que de ambas maneras se recorren los  $N$  valores posibles de las funciones de onda de cada electrón. Se tendrá entonces

$$\langle \Psi_A | \hat{F} | \Psi_B \rangle = \frac{1}{N!} \int \sum_P \sum_Q \varepsilon_P \varepsilon_Q \prod_{i=1}^N \psi_i^{A*}(Qi) \hat{F} \psi_{PQi}^B(Qi) d^3x_{Qi} \quad (11.7)$$

Notemos que  $\varepsilon_P \varepsilon_Q = \varepsilon_{PQ}$  así que podemos escribir

$$\langle F \rangle = \frac{1}{N!} \int \sum_{Q, PQ} \varepsilon_{PQ} \prod_{i=1}^N d^3x_i \psi_i^{A*}(i) \hat{F} \psi_{PQi}^B(i) \quad (11.8)$$

donde hemos redefinido a la variable  $x$  haciendo  $x_{Qi} \rightarrow x_i$ . Tomamos como índices de suma  $Q$  y  $PQ$ , por lo que no habrá signo para las permutaciones de  $Q$ . Como además la integral no depende de  $Q$ , al sumar sobre  $Q$  se tendrá  $N!$  términos idénticos, de manera que

$$\langle F \rangle = \int \sum_{PQ} \varepsilon_{PQ} \prod_{i=1}^N d^3x_i \psi_i^{A*}(i) \hat{F} \psi_{PQi}^B(i) \quad (11.9)$$

o, haciendo  $PQ \rightarrow P$ ,

$$\langle F \rangle = \int \sum_P \varepsilon_P \prod_{i=1}^N d^3x_i \psi_i^{A*}(i) \hat{F} \psi_{Pi}^B(i) \quad (11.10)$$

Consideremos los tres casos siguientes:

1.  $\hat{F} = 1$ : La ortogonalidad de las funciones de onda hace que los términos de la suma sean cero salvo aquella permutación  $P$  para la que  $\psi_i^A(i) = \psi_{P_i}^B(i)$  para todo  $i$ . Si asignamos a esa permutación el signo  $+$  tendremos

$$\langle 1 \rangle = 1$$

2.  $\hat{F} = \sum \hat{f}_j$ : donde  $\hat{f}_j$  es un operador de un electrón. Al insertar este  $\hat{F}$  en cada término de la suma, sólo se entera de la presencia del operador la función de onda  $j$ -ésima por lo que el resto debe, por ortogonalidad, acomodarse de manera que los índices coincidan. Simplificando la notación podemos escribir

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_i \langle i | \hat{f}_i | i \rangle$$

Muchas veces sucede que  $f_1 = f_2 = \dots$  y en ese caso se tiene

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_i \langle i | \hat{f} | i \rangle$$

3.  $\hat{F} = \sum_{ij} \hat{g}_{ij}$ : es decir,  $\hat{g}$  es un “operador de dos electrones”. Con argumentos similares a los anteriores se tendrá

$$\langle F \rangle = \sum_{i < j} (\langle ij | g_{ij} | ij \rangle - \langle ij | g_{ij} | ji \rangle)$$

Estamos ahora en condiciones de atacar el problema de un átomo de muchos electrones. El hamiltoniano a estudiar es

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_i \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i}}_{\sum f_i} + \underbrace{\sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}}}_{\sum g_{ij}} \quad (11.11)$$

Podemos escribir

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_i \int d^3r u_i^*(r) f u_i(r) + \sum_{i < j} (\langle ij | g | ij \rangle - \langle ij | g | ji \rangle) = h_1 + h_2 \quad (11.12)$$

$$f = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \quad (11.13)$$

$$g = \frac{1}{r} \quad (11.14)$$

Además de las funciones de onda espaciales  $u(r)$ , deberemos tener en cuenta las funciones de onda de spin  $\chi(\sigma)$  ya que sobre la parte que contiene  $g$  no se factorizarán trivialmente. Las tomaremos ortogonales según

$$\sum_{\sigma} \chi_i^*(\sigma) \chi_j(\sigma) = \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \quad (11.15)$$

Para la segunda suma  $h_2$  tendremos entonces

$$h_2 = \sum_{i < j} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \sum_{\sigma_1 \sigma_2} u_i^*(r_1) u_j^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} u_i(r_1) u_j(r_2) |\chi_i(\sigma_1)|^2 |\chi_j(\sigma_2)|^2 - \\ \sum_{i < j} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \sum_{\sigma_1 \sigma_2} u_i^*(r_1) u_j^*(r_2) \frac{1}{r_{12}} u_i(r_2) u_j(r_1) \chi_i^*(\sigma_1) \chi_j(\sigma_1) \chi_j^*(\sigma_2) \chi_i(\sigma_2)$$

Después de un poco de álgebra tendremos

$$h_2 = \sum_{i < j} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{1}{r_{12}} \left( |u_i(r_1)|^2 |u_j(r_2)|^2 - \right. \\ \left. \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} u_i^*(r_1) u_j^*(r_2) u_i(r_2) u_j(r_1) \right) \quad (11.16)$$

A esta altura, utilizaremos un método variacional, exigiendo

$$\delta \langle \hat{H} \rangle = \delta h_1 + \delta h_2 = 0 \quad (11.17)$$

donde  $\delta = (\delta / \delta u_i) \delta u_i$ , con el vínculo

$$\int d^3 x u_i^* u_j = \delta_{ij} \quad (11.18)$$

que puede ser incluido en la variación vía multiplicadores de Lagrange  $\lambda_{ij}$ :

$$h_{\lambda} = h_1 + h_2 + \sum_{i < j} \lambda_{ij} \left( \int d^3 x u_i^* u_j - \delta_{ij} \right) \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \quad (11.19)$$

de manera que se tiene

$$h_{\lambda} = h_1 + h_2 + \sum_{ij} \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \times \\ \left( \lambda_{ii} \int d^3 x |u_i|^2 + \lambda_{ij} \int d^3 x u_i^* u_j + \lambda_{ji} \int d^3 x u_j^* u_i \right) \quad (11.20)$$

Tomando  $\lambda_{ij} = \lambda_{ji}^*$  los dos últimos términos son complejos conjugados uno del otro.

Para proceder a calcular la variación, se toma un  $u_i$  particular y se lo varía sin tocar a los otros  $u_k$  con  $k \neq i$ . Procediendo de manera habitual con las variaciones se tiene

$$\delta(h_1 + h_2) = \int d^3x_1 \delta u_i^*(x_1) \left( f_1 u_i(\vec{r}_1) + \sum_j u_j^*(\vec{r}_2) g_{12} \times \right. \\ \left. (u_i(\vec{r}_1) u_j(\vec{r}_2) - \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} u_i(\vec{r}_2) u_j(\vec{r}_1) d^3x_2) \right) + \int d^3x_1 \delta u_i \left( \dots \right)^* \quad (11.21)$$

y de manera análoga se calcula el resto de la variación. Se toma a  $\delta u_i^*$  y a  $\delta u_i$  como variaciones independientes por lo que se iguala a cero cada uno de los paréntesis independientemente. Esto es equivalente al sistema de ecuaciones:

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 u_i(\vec{r}_1) - \frac{Z}{r_1} u_i(\vec{r}_1) + \left( \sum_j \int d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} |u_j(\vec{r}_2)|^2 \right) u_i(\vec{r}_1) - \\ \sum_j \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \left( \int d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} u_j^*(\vec{r}_2) u_i(\vec{r}_2) \right) u_j(\vec{r}_1) = \sum_j \lambda_{ij} \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} u_j(\vec{r}_1) \quad (11.22)$$

En este punto, conviene hacer una transformación unitaria sobre las funciones de onda,  $u \rightarrow u'$ , que simplificará este complicado sistema de ecuaciones. Escribimos

$$u'_j(\vec{r}) = \sum_k c_{kj}^* u_k(\vec{r}) \quad o \quad u_k(\vec{r}) = \sum_j c_{kj} u'_j(\vec{r}) \quad (11.23)$$

eligiendo

$$c_{kj} = 0 \quad \text{si} \quad m_{s_k} \neq m_{s_j} \quad (11.24)$$

de manera que los spines no se mezclen. Multiplicando por  $c_{ik}^*$  la ecuación (11.22) y sumando se obtienen las ecuaciones para los  $u'_i$ . Más, en términos de estos  $u'$ , los  $\lambda_{ij}$  aparecen siempre en una combinación que permite tomarlos diagonales:  $\sum_{kl} c_{ki}^* \lambda_{ij} c_{lj} \equiv \lambda'_{ij}$ . En efecto, quedan



suficientes libertades con los  $c$ 's como para que los podamos elegir de manera que los  $\lambda'$  sean diagonales. Si llamamos entonces a los elementos diagonales  $\lambda'_{ii} = \epsilon_i$ , se tiene finalmente:

$$-\frac{1}{2}\nabla^2 u_i(\vec{r}_1) - \frac{Z}{r_1} u_i(\vec{r}_1) + \left( \sum_j \int d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} |u_j(\vec{r}_2)|^2 \right) u_i(\vec{r}_1) - \sum_j \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \left( \int d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} u_j^*(\vec{r}_2) u_i(\vec{r}_2) \right) u_j(\vec{r}_1) = \epsilon_i u_i(\vec{r}_1) \quad (11.25)$$

Esta es la llamada ecuación de Hartree-Fock. También puede escribirse de la siguiente manera: si en la suma de la primera línea tomamos el término en que  $j = i$ , vemos que se anula con el que corresponde a  $j = i$  en la suma de la segunda línea. Luego, se tiene

$$-\frac{1}{2}\nabla^2 u_i(\vec{r}_1) - \frac{Z}{r_1} u_i(\vec{r}_1) + \left( \sum_{j \neq i} \int d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} |u_j(\vec{r}_2)|^2 \right) u_i(\vec{r}_1) - \sum_{j \neq i} \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \left( \int d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} u_j^*(\vec{r}_2) u_i(\vec{r}_2) \right) u_j(\vec{r}_1) = \epsilon_i u_i(\vec{r}_1) \quad (11.26)$$

Ahora estamos en condiciones de discutir en qué difiere la ecuación de Hartree-Fock de la ecuación de Hartree que discutimos (ecs.(10.29)-(10.32))

$$\left( -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_i(\vec{r}) \right) u_i(\vec{r}) = \epsilon_i u_i(\vec{r}) \quad (11.27)$$

$$V_i(\vec{r}) = \sum_{k \neq i} \int d\vec{\rho} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{\rho}|} |u_k(\vec{\rho})|^2 - \frac{Z}{r} \quad (11.28)$$

En la ecuación de Hartree está ausente la suma de la segunda línea de la ecuación (11.26) que es justamente un término de intercambio que surge de haber usado funciones de onda determinantes (antisimétricas). Los otros términos de Hartree-Fock son simplemente los que corresponden a los potenciales coulombianos de interacción entre electrones y de los electrones con el núcleo. El de intercambio, que llamaremos  $TI$  es bien diferente,

$$TI = - \sum_{j \neq i} \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \left( \int d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} u_j^*(\vec{r}_2) u_i(\vec{r}_2) \right) u_j(\vec{r}_1) \quad (11.29)$$

Este término corresponde a la ecuación para la función de onda del electrón  $i$ -ésimo y el índice  $i$  aparece en  $TI$  en una función de onda que está integrada por lo que  $TI$  es no-local. En efecto, podemos escribirlo así:

$$TI = \int d^3x_2 V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) u_i(\vec{r}_2) \quad (11.30)$$

donde el potencial no-local  $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  queda definido por

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = - \sum_{j \neq i} \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \frac{1}{r_{12}} u_j^*(\vec{r}_2) u_j(\vec{r}_1) \quad (11.31)$$

O sea que podemos escribir a la ecuación de Hartree-Fock como a una ecuación de Schrödinger no local:

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 u_i(\vec{r}) + V_i(\vec{r}) u_i(\vec{r}) + \int d^3x' V(\vec{r}, \vec{r}') u_i(\vec{r}') = \epsilon_i u_i(\vec{r}) \quad (11.32)$$

La forma de la ecuación hace pensar que  $\epsilon_i$  tiene que ver con la energía del electrón  $i$ -ésimo. Para interpretar de manera precisa a  $\epsilon_i$ , tomemos la ecuación de Hartree-Fock (11.25), multipliquémosla por  $u_i^*$  e integremos. Podemos escribir el resultado de la forma

$$\epsilon_i = \langle i | f | i \rangle + \sum_j (\langle ij | g | ji \rangle) \quad (11.33)$$

Esto no es más que el valor de espectación de la parte de energía cinética, potencial coulombiana y de intercambio, que corresponde al electrón  $i$ -ésimo.

De la fórmula que nos daba el valor medio del hamiltoniano, (11.12), puede verse que

$$E = \sum_i \epsilon_i - \sum_{j > i} (\langle ij | g | ji \rangle) \quad (11.34)$$

Si sacamos el electrón  $i$  del átomo, queda un ion. La energía para sacarlo es la del ión menos la del átomo. Si pensamos que las funciones de onda de los otros electrones son las mismas en el ion y en el átomo, tendremos para el ion

$$E_{ion} = \sum_{j \neq i} \epsilon_j - \sum_{j > i} (\langle ij | g | ji \rangle) \quad (11.35)$$

Luego, restando,

$$E_{ion} - E = -\epsilon_i \quad (11.36)$$

Luego,  $-\epsilon_i$  es la energía de ionización del electrón  $i$ -ésimo (Teorema de Koopmans).



# Clase 12

## La simetría esférica y las ecuaciones de Hartree-Fock

Discutimos las ecuaciones de Hartree-Fock,

$$-\frac{1}{2}\nabla^2 u_i(\vec{r}_1) - \frac{Z}{r_1} u_i(\vec{r}_1) + \underbrace{\left( \sum_j \int d^3 x_2 \frac{1}{r_{12}} |u_j(\vec{r}_2)|^2 \right)}_{V_C} u_i(\vec{r}_1) - \underbrace{\int d^3 x_2 \left( \sum_j \delta_{m_{s_i} m_{s_j}} \frac{1}{r_{12}} u_j^*(\vec{r}_2) u_j(\vec{r}_1) \right)}_{V_{int}} u_i(\vec{r}_2) = \epsilon_i u_i(\vec{r}_1) \quad (12.1)$$

o, en términos de potenciales equivalentes,

$$-\frac{1}{2}\nabla^2 u_i(\vec{r}) + V(\vec{r}) u_i(\vec{r}) + \int d^3 x' V(\vec{r}, \vec{r}') u_i(\vec{r}') = \epsilon_i u_i(\vec{r}) \quad (12.2)$$

Si suponemos que existen soluciones esféricamente simétricas, podremos escribir a la función  $u_i$  que describe uno de los electrones en el estado  $i$  en la forma

$$u_i(\vec{r}) = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (12.3)$$

El estado  $i$  pasa a estar caracterizado en el ansatz (12.3) por los números cuánticos  $n, l, m$ . A otro estado, digamos  $j$ , le corresponderá una función de onda  $u_j$  que entonces se escribirá como

$$u_j(\vec{r}) = \frac{R_{n'l'}(r)}{r} Y_{l'm'}(\theta, \phi) \quad (12.4)$$

donde ahora  $j \rightarrow n', l', m'$ .

Probaremos que para átomos con capa cerrada esta suposición de simetría esférica es correcta. Es decir, usando (12.3) veremos que los potenciales equivalentes en las ecuaciones de Hartree-Fock tienen simetría esférica con lo que la suposición será autoconsistente.

Para comenzar, definimos una capa cerrada como aquella en que están ocupados los  $4l + 2$  estados correspondientes a  $nl$  dados ( $4l + 2 = 2l + 1$  valores distintos de  $m \times 2$  valores distintos de  $m_s$ ).

Usando el teorema de adición de armónicos esféricos,

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \quad (12.5)$$

se tiene que

$$\sum_{m_s} \sum_{m'=-l'}^{l'} |u_j(r)|^2 = \frac{R_{n'l'}^2(r)}{r^2} 2 \frac{2l'+1}{4\pi} \quad (12.6)$$

Con esto, el potencial  $V_C$  de repulsión coulombiana entre los electrones puede escribirse como

$$\begin{aligned} V_C(\vec{r}_1) &= \sum_j \int d^3x_2 \frac{1}{r_{12}} |u_j(\vec{r}_2)|^2 = \sum_{n'l'} \int d^3x_2 \frac{R_{n'l'}^2(r_2)}{r_2^2} 2 \frac{2l'+1}{4\pi} \frac{1}{r_{12}} \\ &= \sum_{n'l'} 2(2l'+1) \int_0^\infty dr_2 R_{n'l'}^2(r_2) \frac{1}{r_>} \end{aligned} \quad (12.7)$$

donde  $r_>$  es el mayor entre  $r_1$  y  $r_2$ . Vemos entonces que esta parte del potencial efectivo es central, y ello ha resultado de haber podido sumar los armónicos esféricos con la fórmula (12.5). Para que la suma esté completa, fue necesario incluir todos los estados de capa cerrada.

También se puede probar, de manera análoga pero más trabajosa que el potencial de intercambio, si la capa es cerrada, es central. No daremos los detalles sino directamente la forma que toma la ecuación de Hartree-Fock para la parte radial que resulta:

$$\begin{aligned} R_{nl}''(r_1) - \frac{l(l+1)}{r_1^2} R_{nl}(r_1) + (2\epsilon_{nl} - 2V(r)) R_{nl}(r_1) = \\ -2 \sum_{n'l'} \sum_k \sqrt{\frac{2l'+1}{2l+1}} c^k(l'0, l0) \int_0^\infty R_{n'l'}(r_2) R_{nl}(r_2) \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} dr_2 R_{n'l'}(r_1) \end{aligned} \quad (12.8)$$

donde

$$V(r) = -\frac{Z}{r_1} + \sum_{n'l'} 2(2l' + 1) \int_0^\infty dr_2 R_{n'l'}^2(r_2) 2(2l' + 1) \frac{1}{r} > \quad (12.9)$$

En cuanto a los  $c^k$  que resultan de calcular al potencial de intercambio, están dados por

$$c^k(lm, l'm') = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} \int d\Omega Y_{lm}(\Omega) Y_{l'm'}(\Omega) Y_{k(m-m')}(\Omega) \quad (12.10)$$

Puede verse que son no nulos solo si

$$\begin{aligned} |l - l'| &\leq k \leq l + l' \\ l + l' + k &= 2p, \quad p \in Z \end{aligned} \quad (12.11)$$

Hemos probado entonces que

- dentro del marco de la aproximación de Hartree-Fock, la simetría esférica **no resulta de una aproximación sino que es un resultado exacto para el caso de átomos con capa cerrada.**

Solo cuando la capa no esta completamente ocupada, la suposición de simetría esférica pasa a ser aproximada, pero se justifica porque, en general, estos átomos tienen todas las capas cerradas menos la última.

## La tabla periódica

En 1869 Dimitri Mendeleiev logró organizar las propiedades de los “elementos químicos” (los átomos) como función periódica de  $Z$ , el número de electrones que tuvieran. Los elementos con propiedades físicas y químicas similares quedan acomodados en columnas ordenadas según el número de electrones de valencia que tengan (es decir, el número de electrones que no estén en capa cerrada): la primera columna corresponde a los elementos “alcalinos” que tienen un electrón de valencia, la última a los gases nobles, que tienen valencia cero.

En 1922, Niels Bohr comprendió, a la luz de la mecánica cuántica, que la naturaleza de esta periodicidad tenía que ver con la manera en que se van llenando las sucesivas capas electrónicas de los átomos, de acuerdo a lo que resulta del análisis cuántico de los átomos multi-electrónicos.

Combinando el principio de exclusión de Pauli y el resultado de los cálculos de la aproximación de Hartree-Fock, podemos entender el sistema periódico.

1S	1H					2He
2S	3Li	4Be				10Ne
3S	11Na	12Mg				18Ar
4S	19K	20Ca				36Kr
5S	37Rb	38Sr				54Xe
6S	55Cs	56Ba				86Rn
7S	87Fr	88Ra				
	s <sup>1</sup>	s <sup>2</sup>	.....			p <sup>6</sup>

El orden de la tabla depende del valor de la energía de las subcapas atómicas que estén ocupadas (es decir, con distinto  $l$ ). Para calcular estas energías, se utiliza el método de Hartree-Fock que permite obtener las energías de ionización  $\epsilon_i$ .

En la tabla de la página anterior se muestra a los elementos químicos ordenados

**en columnas que corresponden al llenado de los niveles con autovalor de momento angular creciente,**

a partir del primer valor posible,  $l = 0$ , (indicado desde los tiempos en que se obtuvieron los primeros espectros con la letra "S" inicial de "sharp" por lo bien definida de la línea que corresponde a transiciones a ese nivel), siguiendo por  $l = 1$  (indicado con la letra  $P$  de "principal"), etc.

**Las filas corresponden a los niveles de energía con  $n$  creciente hacia abajo  $n = 1, 2, \dots$**

Al movernos a la derecha vamos recorriendo átomos en que los electrones van llenando estados con  $l$  creciente: solo habra dos columnas que corresponden al orbital  $S$ , 6 al orbital  $P$  y así siguiendo.



En la tabla siguiente damos la lista de los potenciales de ionización para el primer electrón (primera y segunda columna<sup>26</sup>) y para el segundo electrón (tercera columna). En esta última columna aparecen iones. Se ve que los alcalinos (Li, Na) y los correspondientes iones como el  $C^+$ , que tienen un electrón fuera de capa cerrada, tienen la menor energía de ligadura. El segundo electrón s (Be, Mg) está ligado más fuertemente. El siguiente electrón debe ir a una capa p y nuevamente tiene menor energía de ligadura (B, Al). Al ir llenando la capa p, la energía de ligadura aumenta, como es de esperar.

Li	5.40	Na	5.14	$C^+$	11.9
Be	9.32	Mg	7.64	$Sc^+$	12.8
B	8.28	Al	5.97	$Ti^+$	13.6
C	11.37	Si	8.15	$V^+$	14.1
N	14.55	P	10.9	$Cr^+$	16.7
O	13.62	S	10.36	$Mn^+$	15.6
F	17.47	Cl	12.90	$Fe^+$	16.5
Ne	21.56	A	15.76	$Co^+$	17.4
				$Ni^+$	18.2
				$Cu^+$	20.2
				$Zn^+$	18.0
				$Ga^+$	20.5
				$Ge^+$	16.0

Sin embargo, aparece una rotura en el orden creciente de las energías de ionización justo después de que 3 electrones son puestos en la capa p (i.e. en el O, en el S, etc). Esto se debe a que los primeros tres electrones pueden ser puestos con el mismo spin mientras que el cuarto debe tener uno de los spines opuestos. Un sistema con tres electrones con spin de un dado signo tiene necesariamente función de onda de spin simétrica y por lo tanto función de onda espacial antisimétrica. Esta antisimetría los mantiene más alejados uno del otro disminuyendo su interacción de repulsión coulombiana y aumentando en consecuencia la energía de ligadura.

---

<sup>26</sup>Las columnas son aquellas limitadas por una doble raya vertical

En la tercera columna damos una lista de los potenciales de ionización de iones con una capa externa 3d. No elegimos átomos neutros porque en ellos hay una competencia muy fuerte entre llenar la capa 3d o comenzar con la 4s. La energía de ligadura aumenta hasta que el orden se altera una vez que 5 electrones se acomodaron en la capa d (justo antes del Mn). La razón es la misma que describimos en el párrafo anterior. La capa se completa con el Cu<sup>+</sup>. Luego, comienza en Zn<sup>+</sup> a llenarse la capa 4s, con menor energía de ligadura. Los primeros electrones 4p (Ge<sup>+</sup>) tienen nuevamente menos energía de ligadura que el segundo 4s (Ga<sup>+</sup>).

Vemos que el orden de llenado queda determinado por el principio de exclusión de Pauli y por consideraciones energéticas. Madelung formuló una regla heurística que permite recordar el orden de llenado de las capas en átomos neutros:

*Llene las capas en orden creciente de  $n + l$ . Para un  $n + l$  dado, llene en orden creciente de  $n$ . Una capa (en el sentido químico) está cerrada después de que los electrones  $p$  fueron todos ubicados, excepto en el caso de la primera capa que se cierra con  $1s^2$ .*

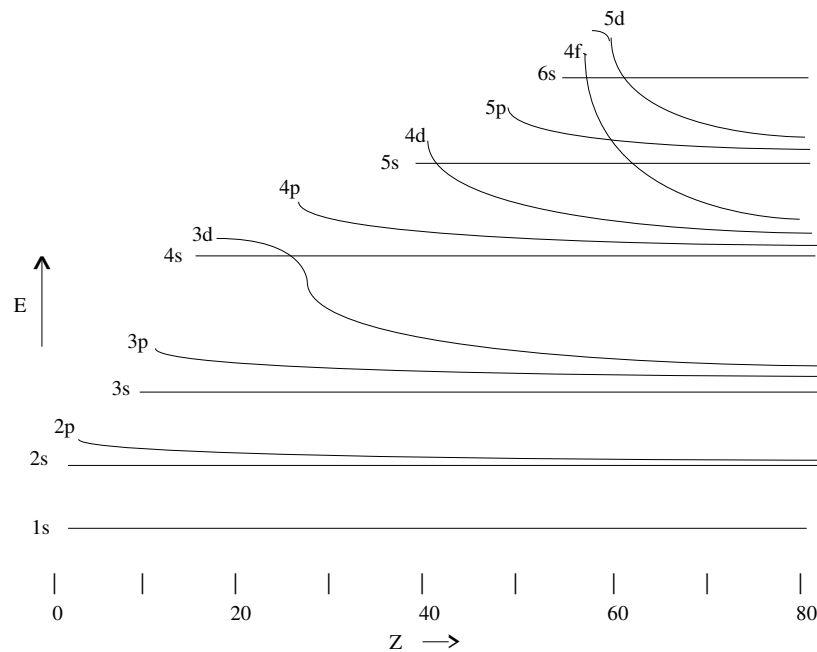
Las capas d son muy sensibles a la competencia con las capas s del  $n$  siguiente. Por ejemplo, se llena primero la capa 4s con dos electrones (Ca) y recién después empieza a llenarse la capa 3d. Luego de ubicarse 3 electrones en esta capa (V), en el átomo siguiente (Cr), uno de los dos electrones de la capa 4s pasa a estar en la d, con lo que la “configuración”<sup>27</sup> es 4s3d<sup>5</sup>.

Otra manera de representar lo que hemos estado describiendo está dada en la figura de la página siguiente.

Concluamos este análisis señalando que es importante recordar que la antisimetrización de la función de onda hace imposible asignar un dado conjunto de números cuánticos a un electrón determinado. Una afirmación del estilo de ... *el electrón  $nl$*  se refiere meramente a la existencia en el determinante de Slater de una función de onda de partícula independiente (un orbital) con números cuánticos  $n$  y  $l$ .

---

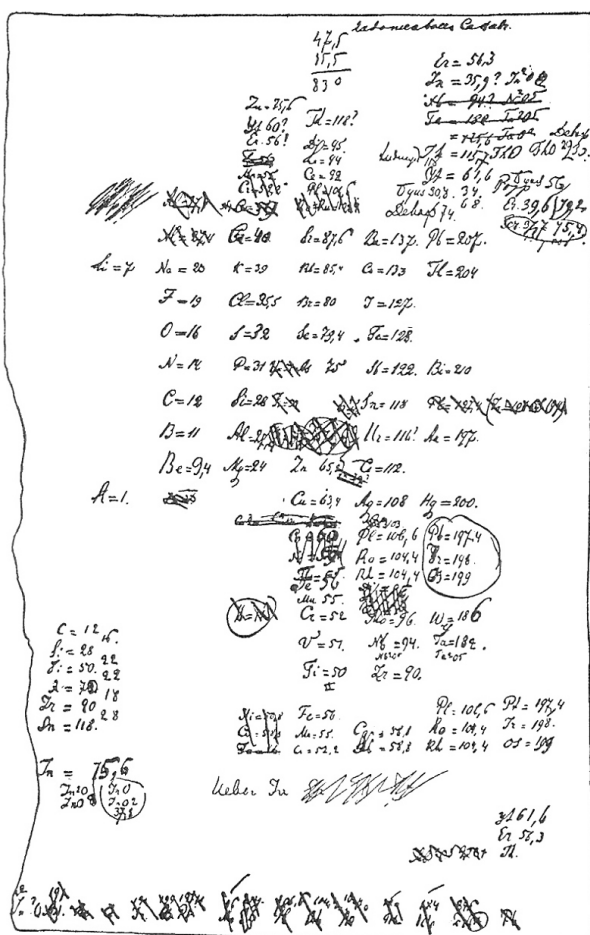
<sup>27</sup> Aquí el término configuración describe la asignación a niveles específicos  $nl$ . Por ejemplo, se dice que el fósforo tiene una configuración  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ .



Vemos entonces que la química funciona de la manera que lo hace a causa de leyes físicas. De allí el anuncio triunfal de Dirac en 1929 [16]:

*... the underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a larger part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the application of these laws leads to equations much too complicated to be solved.*

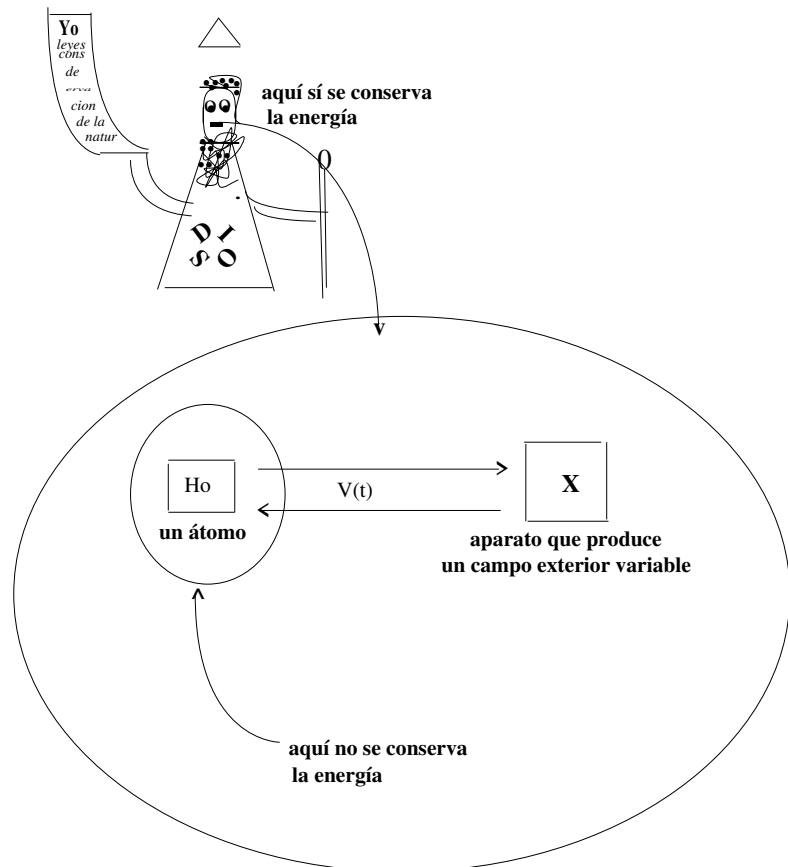
La figura siguiente muestra una página del manuscrito (circa 1871) de Dimitri Ivanovich Mendeleev (1834-1913) con el esbozo de la tabla periódica



## Perturbaciones dependientes del tiempo

Vamos a extender la teoría de perturbaciones independientes del tiempo, que estudiamos en el primer curso de mecánica cuántica como manera aproximada de resolver la ecuación de Schrödinger, al caso en que el potencial es dependiente del tiempo.

Por ejemplo, podemos pensar en una perturbación que se “enciende”, actúa un dado tiempo y luego se “apaga”. La situación que se enfrenta está descrita en la figura siguiente:



Tenemos entonces que resolver una ecuación de Schrödinger de la forma

$$\hat{H}\psi(\vec{x}, t) = \hbar i \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (12.12)$$

en la que el hamiltoniano tiene la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\vec{x}, t) \quad (12.13)$$

Como en el caso de perturbaciones independientes del tiempo, consideramos que  $H_0$  es lo suficientemente “simple” como para que nos sea posible calcular exactamente sus autofunciones y autovalores.

Puesto que  $\hat{H} = \hat{H}(t)$ , la energía del sistema descrito por este hamiltoniano no se conserva. No debemos preocuparnos pues lo que sucede es lo que está representado en la figura de la página precedente, donde consideramos, como ejemplo, el caso de un átomo que, cuando no está perturbado está descrito por un hamiltoniano  $\hat{H}_0$  y que es sometido a una interacción dependiente del tiempo. La interacción es producida por un aparato  $X$  que origina un campo exterior variable. Si se analiza al átomo y al campo exterior representado por el hamiltoniano  $\hat{H}(t)$  tomados por separado no hay conservación de la energía en cada uno pero como conjunto, sí la hay.

Si se tratara de un sistema que incluyera una perturbación independiente del tiempo, lo natural sería separar variables proponiendo un desarrollo de la función de onda tomada como un producto de funciones de  $t$  y de  $\vec{x}$ ,

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n C_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \psi_n(\vec{x}) \quad (12.14)$$

con coeficientes constantes  $C_n$  (i.e., independientes del tiempo) y las autofunciones  $\psi_n(\vec{x})$  del hamiltoniano que representan **estados estacionarios** de energía  $E_n$ . entre los cuales cuando el potencial era independiente del tiempo permitía analizar cómo se modificaban los niveles de energía de esos estados por la presencia de tal perturbación.

Pero si en el hamiltoniano hay un potencial dependiente del tiempo no es posible apelar a la separación de variables que lleva a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la que los autovalores se

identifican justamente con los posibles valores que puede tomar la energía del sistema.

Parece sin embargo razonable en el caso de perturbaciones dependientes del tiempo apoyarse en los estados estacionarios del sistema sin perturbar y modificar el desarrollo (12.14) escribiendo

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n C_n(t) \psi_n(\vec{x}) \quad (12.15)$$

donde  $\{\psi_n(\vec{x})\}$  es una base adecuada (e independiente del tiempo) en el espacio de Hilbert del sistema sin perturbar y  $C_n(t)$  ciertos coeficientes **dependientes del tiempo** que reemplazan a los  $C_n$  constantes y a la dependencia exponencial en el tiempo presente en la fórmula (12.14). Anotamos suma sobre un índice  $n$  pero como siempre todo se aplica también al caso del continuo.

En general podríamos trabajar con cualquier base  $\{\psi_n(\vec{x})\}$  pero evidentemente será más simple si buscamos una ligada al problema de autovalores del hamiltoniano independiente del tiempo.

Por supuesto, como en todos los casos de la teoría de perturbaciones, supondremos que el espacio de Hilbert del sistema físico no es alterado por la presencia del potencial que perturba al sistema. O sea que las autofunciones que forman la base siguen correspondiendo a una base completa.

Consideremos entonces el espectro de energías del hamiltoniano no perturbado  $H_0$  (que suponemos por simplicidad no es degenerado), que aparece en la ec.(t)

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + V(\vec{x}, t). \\ \hat{H}_0 \varphi_n &= E_n \varphi_n \end{aligned} \quad (12.16)$$

Se supone que sabemos resolver este problema por lo que conocemos y utilizaremos como base a la provista por las autofunciones  $\varphi_n$ . Además, inspirados en el caso de potenciales independientes del tiempo, escribiremos a los coeficientes en la forma

$$C_n(t) = c_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \quad (12.17)$$

con  $c_n(t)$  coeficientes a ajustar. Veremos que la inclusión del exponencial  $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$  simplificará las ecuaciones que obedecerán los coeficientes  $c_n(t)$ .

Trabajaremos entonces con un desarrollo de la forma

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \varphi_n(\vec{x}) \quad (12.18)$$

Utilizando este desarrollo en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$\hbar i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{x}, t)$$

Ahora bien, el término que resulta de derivar  $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$  cancela el que resulta de aplicar  $\hat{H}_0$  a las autofunciones  $\varphi_n$  en cada término de la suma del lado derecho de la ecuación (12.18) con lo que se tiene

$$\hbar i \sum_n \frac{dc_n(t)}{dt} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \varphi_n(\vec{x}) = V(\vec{x}, t) \sum_n c_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \varphi_n(\vec{x}) \quad (12.19)$$

Multiplicando (12.19) por  $\varphi_m^*$ , integrando y utilizando ortonormalidad se obtiene

$$\hbar i \frac{dc_m(t)}{dt} = \sum_n V_{mn}(t) c_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t\right) \quad (12.20)$$

donde

$$V_{mn}(t) = \int d^3x \varphi_m^*(\vec{x}) V(\vec{x}, t) \varphi_n(\vec{x}) \quad (12.21)$$

una fórmula que coincide con la obtenida a primer orden en el caso de perturbaciones independientes del tiempo. Pero ahora debemos resolver la ecuación que obedecen los coeficientes  $c_n(t)$ .

Vamos a suponer que en el instante  $t = 0$  el sistema se encuentra en un estado que es autoestado de  $\hat{H}_0$ ,

$$\psi(\vec{x}, 0) = \varphi_i(\vec{x}) \quad (12.22)$$

Esto implica que

$$c_m(0) = \delta_{mi} \quad (12.23)$$

El cálculo perturbativo se organiza como en el caso de una perturbación independiente del tiempo: a orden cero se aproxima  $c_m(t)$  por su valor en el instante inicial  $t = 0$  y luego se consideran términos de orden superior



en el parámetro que habitualmente se introduce haciendo  $V \rightarrow \lambda V$ , de manera de controlar el desarrollo perturbativo y que, al final del cálculo, será puesto a 1.

$$c_m(t) = c_m(0) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \lambda^2 c_m^{(2)}(t) + \dots \quad (12.24)$$

Con esto, la ecuación (12.20),

$$\hbar i \frac{dc_m(t)}{dt} = \sum_n V_{mn}(t) c_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t\right)$$

toma la forma

$$\begin{aligned} \hbar i \left( \lambda \frac{dc_m^{(1)}(t)}{dt} + \lambda^2 \frac{dc_m^{(2)}(t)}{dt} + \dots \right) = \\ \lambda \sum_n V_{mn}(t) \left( \delta_{mi} + \lambda \frac{dc_m^{(1)}(t)}{dt} + \dots \right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t\right) \end{aligned} \quad (12.25)$$

Igualando potencias de  $\lambda$  se tiene, a primer orden,

$$\begin{aligned} \hbar i \frac{dc_m^{(1)}(t)}{dt} &= \sum_n V_{mn}(t) \delta_{ni} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t\right) \\ &= V_{mi}(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_i - E_m)t\right) \end{aligned} \quad (12.26)$$

emos que gracias a la aproximación que hemos hecho, el sistema de ecuaciones a resolver para determinar los  $c_m^{(1)}(t)$  se ha desacoplado del resto de los coeficientes. Comencemos para resolver el caso  $m = i$ . Tendremos

$$\hbar i \frac{dc_i^{(1)}(t)}{dt} = V_{ii}(t) \quad (12.27)$$

Luego,

$$c_i^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{ii}(t') dt' \quad (12.28)$$

De manera análoga se tendrá, para  $m \neq i$ ,

$$c_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mi}(t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_i - E_m)t'\right) dt' \quad (12.29)$$

de manera que podemos escribir a orden  $\lambda$ ,

$$c_m(t) = \delta_{mi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mi}(t') \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_i - E_m)t'\right) dt' + O(\lambda^2) \quad (12.30)$$

Dado que en  $t = 0$  el sistema se hallaba en el estado  $i$ , podemos interpretar a  $c_m(t)$  estableciendo que

- $|c_m(t)|^2$  (con  $m \neq i$ ) es la probabilidad de que al cabo de un tiempo  $t$ , el sistema, que originalmente estaba en el estado estacionario  $i$ , haga una transición al estado  $m$  inducido por la perturbación  $V(t)$  que comenzó a actuar en  $t = 0$ .

Obviamente, cuanto más débil sea la perturbación, mejor será la aproximación. De ser necesario y siguiendo un procedimiento análogo, puede calcularse el siguiente orden.

## Un ejemplo sencillo

Consideremos el caso de una perturbación periódica:

$$\hat{V}(\vec{x}, t) = \hat{F}(\vec{x}) \exp(-i\omega t) + \hat{G}(\vec{x}) \exp(i\omega t) \quad (12.31)$$

Es natural restringirse a perturbaciones tales que  $\hat{V}$  es hermítico por lo que debe valer que

$$\hat{F}(\vec{x}) = \hat{G}^\dagger(\vec{x}) \quad (12.32)$$

o, lo que es lo mismo, sus elementos de matriz entre estados  $\varphi_k(\vec{x})$  del hamiltoniano sin perturbar,

$$\begin{aligned} F_{mn} &= \int d^3x \varphi_m^*(\vec{x}) \hat{F}(\vec{x}) \varphi_n(\vec{x}) \\ G_{mn} &= \int d^3x \varphi_m^*(\vec{x}) \hat{G}(\vec{x}) \varphi_n(\vec{x}) \end{aligned} \quad (12.33)$$

satisfagan

$$F_{mn} = G_{nm}^* \quad (12.34)$$

Tendremos entonces

$$V_{kn}(t) = \int d^3x \varphi_k^*(\vec{x}) \hat{V}(\vec{x}, t) \varphi_n(\vec{x}) = F_{kn} \exp(-i\omega t) + F_{nk}^* \exp(i\omega t) \quad (12.35)$$

Con esto,  $c_m(t)$  viene dado por

$$c_m(t) = \delta_{mi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (F_{mi} \exp(-i\omega t') + F_{im}^* \exp(i\omega t')) \exp(-i\omega_{im} t') \quad (12.36)$$

donde

$$\hbar\omega_{im} = E_i - E_m \quad (12.37)$$

Integrando sobre  $t'$  se obtiene finalmente

$$\begin{aligned} c_m(t) = & \delta_{mi} + \frac{1}{\hbar} \frac{\exp(-i(\omega_{im} + \omega)t - 1)}{\omega_{im} + \omega} F_{mi} + \\ & \frac{1}{\hbar} \frac{\exp(-i(\omega_{im} - \omega)t - 1)}{\omega_{im} - \omega} F_{im}^* \end{aligned} \quad (12.38)$$

Estrictamente, este resultado es válido solo si  $\omega_{im} \neq \pm\omega$  o, lo que es lo mismo, si  $E_i - E_m \neq \pm\hbar\omega$ . Volveremos a este punto más adelante.

## Clase 13

En la clase anterior hemos considerado un sistema físico en el que existe un potencial dependiente del tiempo tal que su hamiltoniano tiene la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0[\hat{p}, \hat{x}] + V(\vec{x}, t) \quad (13.1)$$

Para el caso en que la perturbación dependiente del tiempo  $\hat{V}(\vec{x}, t)$  actúa a partir del instante  $t = 0$  sobre el sistema con hamiltoniano (independiente del tiempo)  $\hat{H}_0$ , hemos escrito a la función de onda del sistema perturbado en la forma

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_m \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t\right) \varphi_m(\vec{x}) c_m(t) \quad (13.2)$$

donde las funciones  $\varphi_m(\vec{x})$  tomadas como base del desarrollo han sido convenientemente elegidas como el conjunto de autofunciones  $\{\varphi_m(\vec{x})\}$  del hamiltoniano  $\hat{H}_0$ . Los coeficientes del desarrollo, calculados a primer orden en teoría de perturbaciones, resultaron ser para los coeficientes  $c_m(t)$

$$c_m(t) = \delta_{mi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mi}(\tau) \exp(i\omega_{mi}\tau) \quad (13.3)$$

Para llegar a esta fórmula consideramos que en  $t = 0$  el sistema se encontraba en un cierto estado estacionario del hamiltoniano  $\hat{H}_0$ , el correspondiente a una de las autofunciones  $\varphi_i(\vec{x})$  del conjunto incluido en la suma 13.2.

A los módulos cuadrados de los  $|c_m(t)|^2$  cuando  $m \neq i$  los interpretamos como probabilidades de transición del estado  $i$  al estado  $m$  al cabo de un tiempo  $t$ . En cuanto a  $|c_i(t)|^2$ , representa la probabilidad de que el sistema no haya hecho transición alguna.

Hicimos hincapié en que tratándose de perturbaciones dependientes del tiempo, no tiene sentido hablar de estados estacionarios del sistema perturbado. Lo que ha cambiado es que nos referimos a transiciones que son inducidas entre estados del sistema sin perturbar, que sí tiene estados estacionarios, por una perturbación que actúa durante cierto intervalo finito de tiempo.

Para estudiar con más cuidado este asunto, consideraremos ahora el caso de “perturbaciones adiabáticas”.

## Perturbaciones adiabáticas

Son aquellas en la que la perturbación varía muy poco en el tiempo en comparación con una que fuera constante todo el tiempo. Para entender lo que queremos indicar con la expresión “muy poco”, consideremos el caso en que  $\hat{H}_0$  describe un átomo con niveles de energía  $E_n$ . La escala “natural de tiempos de tal sistema cuántico es la que infiere del principio de incerteza para el par de cantidades  $E$  y  $t$ .

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar \quad (13.4)$$

Si escribimos

$$\Delta E = (E_m - E_i) = \hbar \omega_{mi} \quad (13.5)$$

resulta que

$$\Delta t \sim \frac{1}{\omega_{im}} \quad (13.6)$$

Diremos que  $V(t)$  varía muy poco (perturbación adiabática) cuando vale que

$$V(t + \Delta t) \sim V(t) \quad (13.7)$$

Equivalentemente podemos afirmar, usando la ec. (13.6) y desarrollando el lado izquierdo de la ec. (13.7) que el intercambio de energía puesto en juego en un intervalo  $\Delta t$ ,

$$\left| \frac{dV_{mi}}{dt} \right| \Delta t = |E_m - E_i| = |\Delta E| \quad (13.8)$$

Entonces, para una perturbación adiabática en el tiempo tenemos

$$\left| \frac{dV_{mi}}{dt} \right| \frac{\hbar}{|E_m - E_i|} \ll |E_m - E_i| \quad (13.9)$$

Para llegar a este resultado hemos reemplazado la derivada de  $V$  respecto del tiempo por la de  $V_{mi}$ , el elemento de matriz del potencial entre los estados en cuestión y hemos utilizado la relación de incerteza  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ .

Si vale la condición (13.9)

$$\left| \frac{dV_{mi}}{dt} \right| \frac{\hbar}{|E_m - E_i|} \ll |E_m - E_i|$$

entonces

$$\hbar \left| \frac{dV_{mi}}{dt} \right| \ll |E_m - E_i|^2 \quad (13.10)$$

y  $V_{mi}$  será casi constante mientras que la fase en el exponencial del lado derecho de la ec.(13.3)

$$c_m(t) = \delta_{mi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mi}(\tau) \exp(i\omega_{mi}\tau) d\tau$$

oscilará de manera que la contribución del integrando se promediará casi a cero y realmente el sistema estará apenas perturbado.

En conclusión, para perturbaciones adiabáticas, antes de aplicar el método descripto arriba debemos analizar si la derivada de la perturbación satisface la ec. (13.10)

## Una perturbación que se enciende en $t = 0$

Consideremos el caso de una perturbación que se enciende en  $t = 0$  y luego permanece constante al pasar el tiempo,

$$V(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t < 0 \\ V(\vec{x}) & \text{si } t \geq 0 \end{cases} \quad (13.11)$$

Se trata entonces de una perturbación en la que la dependencia temporal proviene exclusivamente del acto de “encendido”.

Utilizando la ecuación (13.3) para el caso en que  $V_{ni}$  no depende del tiempo y sale fuera la integral

$$c_n(t) = \delta_{ni} - V_{ni} \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \exp(i\omega_{ni}\tau) \quad (13.12)$$

se tiene:

$$\begin{aligned} c_i(t) &= 1 - \frac{i}{\hbar} V_{ii} t \\ c_{n \neq i}(t) &= \frac{V_{ni}}{E_n - E_i} \left( 1 - \exp \left( \frac{i}{\hbar} (E_n - E_i) t \right) \right) \end{aligned} \quad (13.13)$$

Vimos al discutir perturbaciones independientes del tiempo que los niveles de energía del sistema sin perturbar cambian, a primer orden, según

$$E_n^{(0)} \rightarrow E_n^{(0)} + V_{nn} \quad (13.14)$$

En contraste, en el caso de una perturbación encendida en  $t = 0$  lo que se tiene son coeficientes de un desarrollo, a cuyos módulos cuadrados los podemos interpretar como probabilidades de transición.

El análisis anterior se asoció al caso de un átomo perturbado por un potencial variable en el tiempo. Se puede considerar una situación más simple que tiene que ver con la dispersión de partículas. En efecto, consideremos una partícula originalmente libre que, en un dado instante, “choca” con un centro dispersor. Es decir, inicialmente (digamos en  $t_i = -\infty$ ) el hamiltoniano es el de una partícula libre

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (13.15)$$

En un dado instante que elegimos sin pérdida de generalidad como  $t = 0$  se produce el choque de la partícula con el centro dispersor. Luego de un tiempo  $T$  suficientemente grande ( $T \gg 0$ ) la partícula se habrá alejado lo suficiente del centro dispersor como para poder considerarla nuevamente como libre, es decir nuevamente descrita por el hamiltoniano (13.15).

Queremos calcular la probabilidad de transición, en un instante final  $t_f = T \rightarrow \infty$ , al estado final “ $f$ ” de partícula libre que puede ser en principio diferente del estado inicial “ $i$ ”.

Usaremos la fórmula (13.13) para calcular el módulo cuadrado de  $c_n(t_f)$  que nos da la probabilidad de la transición al estado con energía  $E_n$

$$P_{i \rightarrow n} = |c_n(t_f)|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{(E_n - E_i)^2} 4 \sin^2 \left( \frac{(E_n - E_i)T}{2\hbar} \right) \quad (13.16)$$

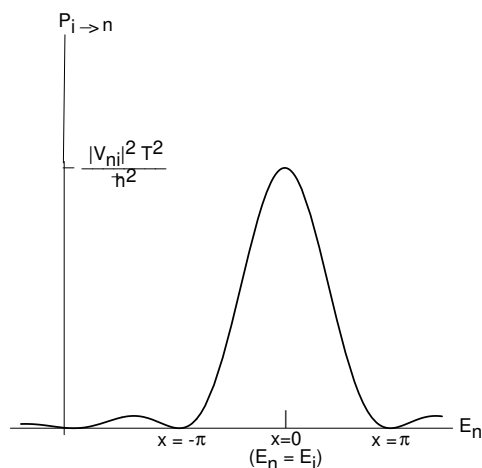
Usando la variable adimensional

$$x = \frac{(E_n - E_i)T}{2\hbar} \quad (13.17)$$

tendremos

$$P_{i \rightarrow n} = \frac{|V_{ni}|^2 T^2}{\hbar^2} \left( \frac{\sin x}{x} \right)^2 \quad (13.18)$$

En la figura siguiente, representamos esta probabilidad de transición al tiempo  $T$  como función de la energía de  $E_n$ ,



La curva muestra que las transiciones son más probables cuanto más cerca estén los valores de  $E_n$  del de  $E_i$ . Si llamamos  $\Delta E$  al ancho del máximo central, vemos de la fórmula (13.17) que define  $x$

$$\frac{\Delta E T}{2\hbar} = 2\pi \quad (13.19)$$

o sea que

$$\Delta E = \frac{2\hbar}{T} \sim \frac{h}{T} \quad (13.20)$$



Esta última fórmula,

$$\Delta E = \frac{2h}{T} \sim \frac{h}{T}$$

puede interpretarse de la siguiente manera. Si la perturbación fuera constante, la energía debe conservarse. O sea, no hay transiciones a niveles en que  $E_n \neq E_i$ . O sea que en este caso solo es posible, para que haya conservación de la energía que  $T \rightarrow \infty$ . Si la perturbación solo actúa un tiempo finito,  $T = \Delta t$ , tenemos de la fórmula anterior,

$$\Delta t \Delta E \sim h \quad (13.21)$$

que no es otra cosa que la relación de incerteza aproximada. Concluimos que la energía se conserva a menos de una cantidad  $\Delta E$  que de todas maneras coincide con la precisión en la medida de la energía que impone el principio de incerteza.

Para estudiar con más cuidado el límite de  $T \rightarrow \infty$ , podemos utilizar la siguiente representación de la delta de Dirac

$$\delta(y) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \lambda y}{\lambda y^2} \quad (13.22)$$

con lo que podemos escribir usando la ec.(13.18),

$$P_{i \rightarrow n} = \frac{|V_{ni}|^2 T^2}{\hbar^2} \left( \frac{\sin x}{x} \right)^2$$

que

$$\lim_{T \rightarrow \infty} P_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 T \delta(E_n - E_i) \quad (13.23)$$

resultando que la probabilidad de transición por unidad de tiempo es

$$\mathcal{W}_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i) \quad (13.24)$$

En el límite de  $T \rightarrow \infty$  la conservación de la energía queda garantizada por la presencia de la delta de Dirac.

## Transiciones en el continuo

Consideremos un caso general en el que  $H_0$  tiene un espectro continuo (el de una partícula libre es un ejemplo) y que la perturbación (la producida por ejemplo por el centro dispersor) induce transiciones entre estados del continuo. Supongamos que el espectro es tal que hay un número  $\Delta N_n$  de niveles con energías entre  $E_n$  y  $E_n + \Delta E_n$ . En términos de diferenciales,

$$dN_n = \frac{dN_n}{dE_n} dE_n \equiv \rho(E_n) dE_n \quad (13.25)$$

Donde se interpreta a  $\rho(E_n)$  como una densidad de estados (numero de estados por unidad de energía). La probabilidad total de transición entre un estado  $i$  y alguno de los posibles estados finales  $n$  del conjunto de tales estados corresponde a la suma (integral en este caso continuo) sobre los estados  $\{n\} \in F$ .

$$P_{i \rightarrow F}(T) = \int |c_n(T)|^2 dN_n = \int |c_n(T)|^2 \rho(E_n) dE_n \quad (13.26)$$

En el límite de  $T \rightarrow \infty$ ,

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} P_{i \rightarrow F}(T) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2\pi T}{\hbar} \int |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i) \rho(E_n) dE_n \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2\pi T}{\hbar} |V_{ni}|^2 \rho(E_i) \end{aligned} \quad (13.27)$$

Vemos que sólo hay transiciones si la energía del estado final es igual a la del inicial. En el caso de una partícula libre, esto puede corresponder, por ejemplo, a estados diferentes en los que si bien la cantidad de movimiento de la partícula es la misma en módulo, cambia de dirección por efecto de la colisión. Es decir, cuando se da el caso que  $E_i \in E_F$  a pesar de que  $f \in F \neq i$ . En tal caso, reescribimos el resultado anterior así:

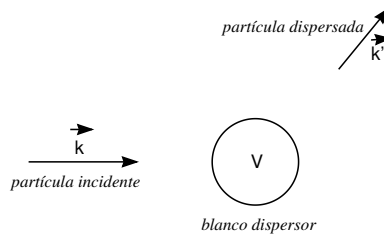
$$\lim_{T \rightarrow \infty} P_{i \rightarrow f}(T) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2\pi T}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho(E_f) \quad (13.28)$$

Luego, la probabilidad de transición por unidad de tiempo será

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho(E_f) \quad (13.29)$$

Esta es la regla de oro de Fermi calculada por Fermi en 1950. Se la llama así porque Fermi la catalogó “regla de oro N<sup>o</sup>2” (la número 1 corresponde al segundo orden). Pero fue Dirac quien la escribió en 1927 en una forma casi idéntica a la de la ec.(13.29) [23]-[24]. Este hecho confirma la llamada ley de Stigler que afirma, en su versión más dura que “Un descubrimiento no lleva jamás el nombre de su autor” (en realidad esta “ley” fue originalmente enunciado por el sociólogo Robert K. Merton).

Apliquemos este resultado a una partícula libre que es dispersada por un potencial  $V$



El estado inicial estará descrito por una función de onda de la forma

$$\psi_i = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (13.30)$$

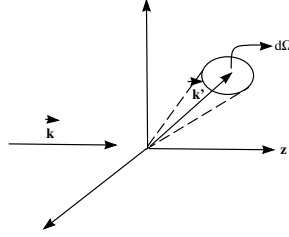
Análogamente, tenemos en el estado final

$$\psi_f = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r}) \quad (13.31)$$

con  $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ .

El número de estados en un volumen  $d^3k'$  alrededor del punto definido por  $\vec{k}'$  es

$$dN = 4\pi k'^2 dk' \quad (13.32)$$



Por otra parte, dada la relación entre energía y momento

$$E = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \quad (13.33)$$

se tiene

$$dE = \frac{\hbar^2 k'}{m} dk' \quad (13.34)$$

de manera que de (13.32)

$$dN = 4\pi k'^2 dk'$$

y (13.34) resulta

$$\frac{1}{4\pi} \frac{dN}{dE} = \frac{k'm}{\hbar^2} \quad (13.35)$$

Para un diferencial de ángulo sólido  $d\Omega$  tendremos

$$\rho(E) = \frac{1}{4\pi} \frac{dN}{dE} d\Omega = \frac{km}{\hbar^2} d\Omega \quad (13.36)$$

(Hemos usado que los módulos de  $\vec{k}$  y  $\vec{k}'$  son iguales,  $k = k'$ ). En cuanto a los elementos de matriz del potencial,

$$V_{fi} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r \exp(-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}) V(\vec{r}) \equiv \frac{\tilde{1}}{(2\pi)^3} \tilde{V}(\vec{k}' - \vec{k}) \quad (13.37)$$

donde  $\tilde{V}(p)$  es la transformada de Fourier de  $V(x)$ .

La probabilidad de transición para el ángulo sólido  $d\Omega$  es entonces:

$$\mathcal{W}_{if} = \frac{2\pi}{\hbar^3} |\tilde{V}_{if}|^2 km \frac{d\Omega}{(2\pi)^3} = \frac{|\tilde{V}(\vec{k}' - \vec{k})|^2}{(2\pi)^5 \hbar^3} km d\Omega \quad (13.38)$$

Para calcular a partir de (13.38) la sección eficaz, debemos dividir por el diferencial de ángulo sólido y por la corriente incidente,

$$\frac{d\sigma(k, k')}{d\Omega} = \frac{\mathcal{W}_{if}}{|J_i| d\Omega} \quad (13.39)$$

Es fácil ver que la corriente incidente está dada por

$$J_i = \frac{\hbar i}{2m} (\psi_i \nabla \psi_i^* - \psi_i^* \nabla \psi_i) = \frac{\hbar k}{(2\pi)^3 m} \quad (13.40)$$

con lo que finalmente se tiene

$$\frac{d\sigma(k, k')}{d\Omega} = \left| \frac{m}{2\pi \hbar^2} \tilde{V}(\vec{k}' - \vec{k}) \right|^2 \quad (13.41)$$

Cuando estudiemos problemas de dispersión, veremos una manera alternativa de obtener este resultado (conocido como “aproximación de Born”).

## Perturbaciones armónicas

Volvamos al problema que tratamos en la clase 12, cuando discutimos el caso de un potencial armónico,

$$\hat{V}(\vec{x}, t) = \hat{F}(\vec{x}) \exp(-i\omega t) + \hat{G}(\vec{x}) \exp(i\omega t) \quad (13.42)$$

con  $\hat{F} = \hat{H} - \hat{H}_0$ .

Propusimos para la función de onda perturbada por  $V(\vec{x}, t)$  un desarrollo de la forma (ver ec.(12.18))

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \varphi_n(\vec{x}) \quad (13.43)$$

con  $\varphi_n$  las autofunciones del hamiltoniano  $\hat{H}_0$  sin perturbar. Obtuvimos, en el desarrollo propuesto de la función de onda perturbada, para el caso en que el estado inicial (i.e. antes de que actuara la perturbación) era  $\varphi_i$ , que el coeficiente  $c_n$ , con  $n \neq i$ , tomaba la forma

$$c_n(t) = \frac{1 - \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_n - E_i + \hbar\omega)t\right)}{E_n - E_i + \hbar\omega} F_{ni} - \frac{1 - \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_i - E_n + \hbar\omega)t\right)}{E_i - E_n + \hbar\omega} F_{in}^* \quad (13.44)$$

Al módulo cuadrado de  $c_n$ , tal que  $c_n \neq c_i$ , lo relacionamos con la probabilidad de transición del estado “ $i$ ” al estado “ $n$ ”.

Vemos que si  $E_n \approx E_i - \hbar\omega$  el denominador del primer término se hace muy pequeño, por lo que es este término el que predomina y, despreciando entonces el segundo término se tiene en este caso

$$|c_n(t)|^2 \approx \frac{4 |F_{ni}|^2}{(E_n - E_i + \hbar\omega)^2} \sin^2\left(\frac{(E_n - E_i + \hbar\omega)t}{2\hbar}\right) \quad (13.45)$$

Es una forma idéntica a la de la perturbación constante que estudiamos previamente. La probabilidad de transición es apreciable cuando

$$E_n \sim E_i - \hbar\omega \quad (13.46)$$

Vemos que el estado final tiene menos energía que el inicial por lo que podemos decir que en este caso hay una probabilidad apreciable de emisión de energía al pasar el sistema de un estado dado a otro de menor energía.<sup>28</sup> Repitiendo el análisis para la probabilidad de transición por unidad de tiempo definida en la ecuación (13.24) tendremos (llamamos como antes  $f$  al estado final):

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f + \hbar\omega - E_i) \quad \textbf{emisión} \quad (13.47)$$

---

<sup>28</sup>Podemos identificar a  $\hbar\omega$  como la energía de un fotón emitido durante el proceso.

Si en cambio  $E_n = E_i + \hbar\omega$ , el que predomina es el segundo término de (13.44) ya que el denominador se hace muy pequeño cuando

$$E_n \sim E_i + \hbar\omega \quad (13.48)$$

La energía del estado final es, en este caso, mayor que la inicial por lo que hablamos de absorción de energía. El análisis se repite y se obtiene

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}^\dagger|^2 \delta(E_f - \hbar\omega - E_i) \quad \textbf{absorción} \quad (13.49)$$

Nótese que estos dos procesos son producidos por la presencia del potencial armónico (13.42).

# Clase 14

## Teoría Semiclásica de la Radiación

El estudio de perturbaciones dependientes del tiempo nos llevó naturalmente al análisis de situaciones en las que un átomo puede absorber o emitir energía bajo la forma de radiación. Por ejemplo vimos que cuando un átomo es sometido a una perturbación periódica en el tiempo la probabilidad de **emisión** de energía por unidad de tiempo (ec.13.47) toma la forma

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f + \hbar\omega - E_i) \quad \text{emisión inducida}$$

y para la **absorción** (ec. 13.49)

$$\mathcal{W}_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}^\dagger|^2 \delta(E_f - \hbar\omega - E_i) \quad \text{absorción}$$

Las técnicas desarrolladas para obtener estos resultados nos permitirán ahora establecer una teoría semiclásica de la radiación. Nos concentraremos en el caso atómico pero el tratamiento puede extenderse al de moléculas e, inclusive, núcleos.

El uso del prefijo “semi” se refiere a que el carácter cuántico solo concierne al átomo mientras que el campo electromagnético no está cuantizado y es tratado clásicamente. Esto fue lo que hicimos ya en las discusiones previas sobre perturbaciones dependientes del tiempo solo que en **este caso discutiremos específicamente la perturbación producida por un campo electromagnético.**

Consideremos un sistema ligado de  $N$  partículas cargadas (con carga  $e$ ) que puede corresponder a los electrones de un átomo, una molécula,



etc. El hamiltoniano de tal sistema toma la forma

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \hat{p}_i^2 + \hat{U} \quad (14.1)$$

Aquí  $\hat{U}$  representa a las interacciones entre las  $N$  partículas cargadas que forman al sistema cuántico, por ejemplo, los  $N$  electrones de un átomo que es el caso en que nos concentraremos.

Estudiaremos qué sucede cuando se “sumerge” al sistema cuántico en un campo electromagnético clásico externo y dependiente del tiempo. Es decir, un campo que obedece las ecuaciones (clásicas) de Maxwell.

Consideraremos en particular el caso en que el campo externo corresponde a ondas electromagnéticas planas (cuyas fuentes consideraremos ubicadas en el infinito). Trabajaremos en el gauge de Coulomb,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t) = 0 \quad A_0 = \phi = 0 \quad (14.2)$$

y consideraremos que el potencial vector  $A_i(\vec{r}, t)$  corresponde a una solución de onda plana escrito como un vector real

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}^{(0)} \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) + \vec{A}^{(0)*} \exp(-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) \quad (14.3)$$

donde el vector constante  $\vec{A}^{(0)}$  esta asociado con la amplitud de la onda. Por haber tomado al potencial escalar nulo,  $\phi = 0$ , el campo eléctrico es

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (14.4)$$

mientras que, como siempre, el magnético está dado por

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (14.5)$$

En cuanto al vector de Poynting, que representa el flujo de energía asociada al campo electromagnético (en la dirección del versor de onda  $\check{k}$ ) se reduce a

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \vec{E} \wedge \vec{B} = \frac{c}{4\pi} |\vec{E}|^2 \check{k} \quad (14.6)$$

donde  $\check{k}$  denota la dirección de propagación de la onda, que elegimos como la del eje  $z$ .

En presencia del campo electromagnético  $\vec{A}(\vec{r}_i, t)$ , el impulso  $\hat{\vec{p}}_i$  para la partícula  $i$ -ésima debe reemplazarse de acuerdo a

$$\hat{\vec{p}}_i \rightarrow \hat{\vec{p}}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i, t) \quad (14.7)$$

según aprendimos en el primer curso de mecánica cuántica, con lo que el hamiltonian toma la forma

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \left( \hat{\vec{p}}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i, t) \right)^2 + \hat{U} \quad (14.8)$$

(recordemos que  $U$  representa la interacción independiente del tiempo entre las  $N$  partículas)

Nos restringiremos a una aproximación no-relativista, por lo que tendremos solo el términos al orden más bajo en que aparece el cociente  $e/c$ ,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \left( \left( \hat{\vec{p}}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t) \right) + \vec{A}(\vec{r}_i, t) \cdot \hat{\vec{p}}_i \right) \quad (14.9)$$

En esta ecuación hemos separado la parte libre del hamiltoniano y la interacción  $U$  entre las partículas en lo que llamamos  $\hat{H}_0$  del campo electromagnético externo dependiente del tiempo dado por el segundo término de la ec.(14.9).

Debe notarse que en la fórmula anterior ha desaparecido el factor  $1/2$  que aparece multiplicando el primer término del lado derecho de la ec (14.8). Eso se debe a que, como veremos más abajo, al campo de Gauge  $\vec{A}$  tiene asociado un spin que puede ser  $\pm 1$  por lo que debe incluirse un factor 2 a la contribución de ese primer término.

Dado que hemos elegido el “gauge de Coulomb” definido en la ec.(14.2) se tiene que  $\hat{\vec{p}}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t) \propto \partial_i A_i(\vec{r}_i, t) = 0$  por lo que la expresión para  $\hat{H}$  pasa a ser (recordar el factor 2 que incluimos dadas las dos posibilidades de  $s = \pm 1$ ):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \vec{A}(\vec{r}_i, t) \cdot \hat{\vec{p}}_i \quad (14.10)$$

o, de manera compacta

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (14.11)$$

haciendo hincapié en la notación del potencial  $\hat{V}(t)$  su dependencia temporal, proveniente de la dependencia temporal del potencial vector  $\vec{A}(\vec{r}_i, t)$  (por supuesto,  $\hat{V}$  depende también de las coordenadas e impulsos de las  $N$  partículas).

Además de determinar la amplitud de la onda el vector  $\vec{A}^{(0)}$  está relacionado con la dirección de propagación de la misma. En efecto, en el gauge de Coulomb debe cumplirse que  $\vec{k} \cdot \vec{A} = 0$  por lo que se tiene.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = i\vec{k} \cdot \vec{A}^{(0)} \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) - i\vec{k} \cdot \vec{A}^{(0)*} \exp(-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) = 0 \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{A}^{(0)} = 0 \quad (14.12)$$

El vector asociado a la amplitud de la onda debe entonces estar contenido en un plano perpendicular a la dirección de propagación. Diremos de manera más breve que la onda está “**polarizada**” en un plano perpendicular a  $\vec{k}$ . Escribiremos entonces

$$\vec{A}^{(0)} = A^0 \vec{\epsilon} \quad (14.13)$$

con el “vector polarización” (complejo)  $\vec{\epsilon}$  está definido de manera que

$$\vec{\epsilon} \perp \vec{k} \quad (14.14)$$

Cualquier vector perpendicular a uno dado (en este caso  $\vec{k}$ ) puede ser representado por dos vectores independientes que denotaremos como

$$\epsilon(\vec{k}, \sigma), \quad \sigma = \pm 1 \quad (14.15)$$

Por ejemplo, si  $\vec{k}$  está en la dirección  $z$  podremos tomar a  $\epsilon(\vec{z}, \pm 1)$  en la forma

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, +i, 0) \text{ y } \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i, 0) \quad (14.16)$$

Notar que esta elección corresponde a que la componente  $y$  del vector es imaginaria.

Para  $\vec{k}$  en cualquier otra dirección podemos tomar

$$\vec{\epsilon}(\vec{k}, \pm 1) = \sum_j R_{ij}(\vec{z}) e_j(\vec{z}, \pm 1) \quad (14.17)$$

donde  $R_{ij}(\vec{k})$  es la rotación que lleva de la dirección  $\vec{z}$  a la dirección  $\vec{k}$

Tendremos entonces en general

$$\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{k}, \sigma) = 0, \quad \vec{\epsilon}(\vec{k}, \sigma) \cdot \vec{\epsilon}(\vec{k}, \sigma')^* = \delta_{\sigma\sigma'} \quad (14.18)$$

donde  $\sigma = \pm 1$ .

Recordemos que la polarización de las ondas electromagnéticas puede ser lineal, circular o elíptica. Si tomamos a  $\vec{k} = (0, 0, k)$  será  $\vec{\epsilon} = (\epsilon_1, \epsilon_2, 0)$  y cuando una de las componentes  $e_i$  se anula se habla de polarización lineal. La polarización es circular cuando  $|\epsilon_1| = |\epsilon_2|$  y elíptica cuando  $|\epsilon_1| \neq |\epsilon_2|$ . Podemos entonces interpretar a  $\sigma$  como la “helicidad” levógira o dextrógira de las ondas.

Ahora bien, recordemos que la helicidad  $\hat{\Lambda}$  fue definida, en el marco de la ecuación de Dirac (ver ec.(4.29) como

$$\hat{\Lambda} = \frac{\hbar}{2} \hat{\Sigma} \cdot \hat{k} \quad (14.19)$$

donde  $\hat{\Sigma}$  es el operador de spin. O sea que si interpretamos a  $\sigma$  como los autovalores de la helicidad  $\hat{\Lambda}$  y que la proyección del spin en la dirección de movimiento que elegimos sea la del eje  $z$ , la ec.(14.18) indica entonces que el spin en la dirección  $z$  es nulo,  $s_z = 0$ .

En cuanto a los posibles valores de  $\sigma$ ,  $\sigma = \pm 1$ , pueden entonces ser asociadas con los valores posibles de una partícula de spin total  $s = 1$ . Por eso se dice que el fotón tiene spin 1 con la peculiaridad de que la proyección del spin sobre  $\vec{k}$  es cero,  $\vec{s} \cdot \vec{k} = 0$ . Y los fotones con helicidad  $\pm 1$  pueden interpretarse en lenguaje clásico como los que forman haces de luz circularmente polarizada a derecha o a izquierda.

Utilizando explícitamente la forma de onda plana para escribir al vector de Poynting asociado al fotón

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} |\vec{E}|^2 \vec{k}$$

en la forma

$$\vec{S} = \frac{\omega^2}{4\pi c} \left( 2 |\vec{A}^{(0)}|^2 + \vec{A}^{(0)*2} \exp(2i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) + A^{(0)*2} \exp(-2i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) \right) \vec{k} \quad (14.20)$$

La intensidad de la radiación electromagnética asociada a esta onda plana viene dada por la integral que define el promedio temporal del módulo del vector de Poynting,

$$I = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T S dt \quad (14.21)$$

Al reemplazar  $S = |\vec{S}|$  por la expresión (14.20), puede verse que la integral de los términos ondulatorios de  $S$  se anula<sup>29</sup> por lo que la intensidad viene dada por

$$I = \frac{\omega^2}{2\pi c} |\vec{A}^{(0)}|^2 \quad (14.23)$$

A partir del hamiltoniano (14.59),

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \vec{A}(\vec{r}_i, t) \cdot \hat{\vec{p}}_i$$

y usando la forma explícita del potencial vector asociado al campo electromagnético dado por la ec. (14.3),

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}^{(0)} \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) + \vec{A}^{(0)*} \exp(-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$$

podemos escribir explícitamente el potencial perturbador  $\hat{V}(t)$  en la forma:

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= -\exp(-i\omega t) \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) A^{(0)} \hat{\epsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_i \\ &- \exp(i\omega t) \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) A^{(0)*} \hat{\epsilon}^* \cdot \hat{\vec{p}}_i \end{aligned} \quad (14.24)$$

Vemos que  $\hat{V}(t)$  corresponde exactamente al caso de la perturbación armónica que ya hemos estudiado (ver (12.31))

$$\hat{V}(\vec{x}, t) = \exp(-i\omega t) \hat{F}(\vec{x}) + \exp(i\omega t) \hat{F}^*(\vec{x}) \quad (14.25)$$

---

<sup>29</sup>Las integrales temporales son de la forma

$$\frac{1}{T} \int_{-T}^T dt \exp(\pm 2i\omega t) = \mp \frac{1}{T} \frac{i}{2\omega} \exp(\pm 2i\omega t) \Big|_{-T}^T = \frac{\sin 2\omega T}{\omega T} \quad (14.22)$$

una expresión que tiende a 0 cuando  $T \rightarrow \infty$ .

si identificamos a  $\hat{F}$  con

$$\hat{F} = - \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) A^{(0)} \vec{\epsilon} \cdot \vec{p}_i \quad (14.26)$$

No tenemos entonces más que repetir el análisis para la emisión inducida en este caso por las ondas electromagnéticas que inciden sobre el sistema. Utilizando la fórmula (13.43),

$$\mathcal{W}_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{if}|^2 \delta(E_f + \hbar\omega - E_i) \quad (14.27)$$

donde  $F_{fi}$  es el elemento de matriz del operador  $\hat{F}$  entre los estados inicial y final en este caso de los electrones atómicos. Se tiene así

$$\mathcal{W}_{fi}^{EI} = \frac{4\pi^2 c}{\hbar\omega^2} I |v_{fi}|^2 \delta(E_f + \hbar\omega - E_i) \quad \text{emisión inducida} \quad (14.28)$$

donde al elemento de matriz  $v_{fi} = F_{fi}/A^0$  viene dado por

$$v_{fi} = - \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \langle \psi_f | \hat{p}_i \cdot \vec{\epsilon} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) | \psi_i \rangle \quad (14.29)$$

Análogamente, tendremos para la absorción<sup>30</sup>,

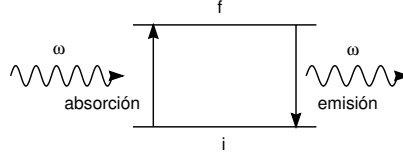
$$\mathcal{W}_{fi}^A = \frac{4\pi^2 c}{\hbar\omega^2} I |v_{fi}^\dagger|^2 \delta(E_i + \hbar\omega - E_f) \quad \text{absorción} \quad (14.30)$$

Como  $v_{if} = v_{fi}^\dagger$ , si tomamos lo que es el estado final en un caso como estado inicial en el otro y “mutatis mutando” el inicial como final del otro (de manera que también el argumento de las funciones delta coincida) tendremos

$$\mathcal{W}_{fi}^{EI} = \mathcal{W}_{if}^A \quad (14.31)$$

---

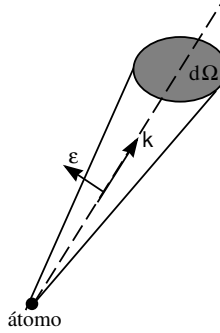
<sup>30</sup>Nótese que en relación a la fórmula (14.28) hablamos de emisión “inducida” (por la onda electromagnética) mientras que en el caso de absorción no incluimos esta palabra. Veremos más adelante, cuando introduzcamos una versión cuántica del electromagnetismo, que también tiene lugar otro fenómeno de emisión a la que calificaremos de “espontánea”.



Esta fórmula expresa matemáticamente lo que se conoce como

- *Principio del balance detallado*<sup>31</sup>: la probabilidad de emisión inducida entre dos niveles es igual a la de absorción entre los mismos niveles. Fue Einstein quien en 1916 lo utilizó en el contexto de la teoría cuántica de la emisión y absorción de radiación<sup>32</sup>.

En general, la radiación no es monocromática (i.e., con una única frecuencia angular  $\omega$  como hemos considerado hasta aquí) sino una mezcla incoherente de ondas con distintos  $\vec{\epsilon}$ ,  $\vec{k}$  y  $\omega$ . Supongamos entonces una superposición de ondas con frecuencias entre  $\omega$  y  $\omega + d\omega$ , con direcciones entre  $\vec{k}$  y  $\vec{k} + d\vec{k}$ .



Si llamamos  $d\Omega$  al ángulo sólido subtendido por  $d\vec{k}$  alrededor de  $\vec{k}$ , la energía transportada por las ondas, por unidad de tiempo y de área será:

$$I(\omega)d\omega d\Omega \quad (14.32)$$

<sup>31</sup>El principio del balance detallado fue introducido por L.Boltzmann en el contexto de la mecánica estadística y establece que en equilibrio los procesos elementales se igualan con los procesos inversos

<sup>32</sup>A. Einstein, Emisión y absorción de radiación en la teoría cuántica, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft 18 (1916) 318323.

Si se considera (a) un área  $dA$  y que (b) por cada frecuencia y dirección se tiene 2 posibles polarizaciones, la energía en un intervalo infinitesimal  $dt$  será

$$2I(\omega)d\omega d\Omega dA dt \quad (14.33)$$

Consideremos ahora la energía por unidad de volumen  $u(\omega)$  transportada por una única onda con frecuencia  $\omega$ . Cuando pasa un tiempo  $dt$ , el elemento de volumen atravesado por la onda será

$$dV = dA c dt \quad (14.34)$$

de manera que la energía  $u(\omega)$  para ondas en un rango  $d\omega$ , tomará la forma

$$u(\omega)d\omega dA c dt \quad (14.35)$$

Para incluir todas las direcciones posibles de  $\vec{k}$  en el  $d\Omega$  se escribe

$$u(\omega)d\omega dA c dt \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (14.36)$$

Las ecuaciones (14.33) y (14.36) expresan la misma cantidad de energía por lo que al igualarlas se puede obtener una relación entre la intensidad  $I(\omega)$  de la radiación y la energía  $u(\omega)$  de una onda de frecuencia  $\omega$ :

$$I(\omega) = \frac{c}{8\pi} u(\omega) \quad (14.37)$$

Esta expresión puede ser utilizada en (14.28)

$$\mathcal{W}_{fi}^{EI} = \frac{4\pi^2 c}{\hbar \omega^2} I |v_{fi}|^2 \delta(E_f + \hbar\omega - E_i) \quad \text{emisión inducida}$$

en la que, al integrarse sobre frecuencias utilizando la delta de Dirac se tiene, en un ángulo sólido diferencial  $d\Omega$ ,

$$\mathcal{W}_{fi} = \frac{4\pi^2 c}{\hbar \omega_{fi}^2} \frac{c}{8\pi} u(\omega_{fi}) |v_{fi}|^2 d\Omega, \quad \text{emisión inducida} \quad (14.38)$$

con

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} \quad (14.39)$$



La expresión (14.38) da la probabilidad por unidad de tiempo de emisión inducida de radiación con polarización  $\check{\epsilon}$  en la dirección  $\vec{k}$ , dentro de un ángulo sólido diferencial  $d\Omega$ .

En lo que respecta a la absorción, se obtiene una expresión análoga

$$\mathcal{W}_{fi} = \frac{4\pi^2 c}{\hbar \omega_{fi}^2} \frac{c}{8\pi} u(\omega_{if}) \left| v_{fi}^\dagger \right|^2 d\Omega, \quad \text{absorción} \quad (14.40)$$

## Aproximación dipolar

Hemos estudiado arriba el caso en que la perturbación dependiente del tiempo sobre un sistema cuántico con hamiltoniano independiente del tiempo  $H_0 = \hat{p}^2/2m + U(x)$  era una onda plana de la forma

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = A^{(0)} \check{\epsilon} \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) + A^{(0)*} \check{\epsilon}^* \exp(-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$$

Como el hamiltoniano de partida era (ver (14.8))

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \left( \hat{\vec{p}}_i - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_i, t) \right)^2 + \hat{U} \quad (14.41)$$

Al orden más bajo en  $e/c$  pudimos escribirlo como

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_{i=1}^N \frac{e}{2m_i c} \left( (\hat{\vec{p}}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t)) + \vec{A}(\vec{r}_i, t) \cdot \hat{\vec{p}}_i \right) \quad (14.42)$$

con lo que el potencial dependiente del tiempo resultó ser (ver ec.(14.59))

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \vec{A}(\vec{r}_i, t) \cdot \hat{\vec{p}}_i \quad (14.43)$$

o poniendo para  $\vec{A}$  la forma explícita de una onda plana,

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) &= -\exp(-i\omega t) \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) A^{(0)} \check{\epsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_i \\ &- \exp(i\omega t) \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) A^{(0)*} \check{\epsilon}^* \cdot \hat{\vec{p}}_i \end{aligned} \quad (14.44)$$

Encontramos que las probabilidades por unidad de tiempo de emisión y absorción de radiación del tipo onda plana con polarización  $\vec{\epsilon}$  en la dirección  $\vec{k}$ , dentro de un ángulo sólido diferencial  $d\Omega$ ,

$$\begin{aligned}\mathcal{W}_{fi} &= \frac{4\pi^2 c}{\hbar \omega_{fi}^2} \frac{c}{8\pi} u(\omega_{fi}) |v_{fi}|^2 d\Omega, & \text{emisión inducida} \\ \mathcal{W}_{fi} &= \frac{4\pi^2 c}{\hbar \omega_{fi}^2} \frac{c}{8\pi} u(\omega_{if}) |v_{fi}^\dagger|^2 d\Omega, & \text{absorción}\end{aligned}\quad (14.45)$$

Trataremos el caso en el que el sistema sin perturbar es un átomo con  $N$  electrones. Para calcular los elementos de matriz  $v_{fi}$  de la perturbación a partir utilizaremos la ec.(14.29),

$$v_{fi} = - \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \langle \psi_f | \hat{p}_i \cdot \vec{\epsilon} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) | \psi_i \rangle \quad (14.46)$$

Tenemos entonces

$$v_{fi} = - \frac{e}{mc} \sum_{i=1}^N \langle \psi_f | \hat{p}_i \cdot \vec{\epsilon} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) | \psi_i \rangle \quad (14.47)$$

con  $\psi_i$  y  $\psi_f$  las funciones de onda del átomo en el estado inicial y final. Consideremos el desarrollo

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = 1 + i\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{1}{2}(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + \dots \quad (14.48)$$

En principio  $\vec{r}$  puede tener cualquier valor (se trata de la variable de integración). Pero las funciones de onda acotan el integrando a un rango de integración que es del orden del radio atómico  $a$ . Es decir al orden que en el desarrollo (14.48) se tiene (recordando que  $k = 2\pi/\lambda$ )

$$\vec{k} \cdot \vec{r} \sim \frac{a}{\lambda} \quad (14.49)$$

donde  $\lambda$  es la longitud de onda correspondiente. Si consideramos que los radios atómicos son del orden de  $a \sim \text{\AA}$  ( $1 \text{\AA} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$ ) y las longitudes de onda  $\lambda \sim 10^3 - 10^4 \text{\AA}$  se tendrá que

En física atómica se tiene entonces  $a/\lambda \sim 10^{-3}$

Se puede hacer el mismo análisis en física nuclear, pensando en un modelo simplificado con los protones en niveles de energía formando el núcleo pero teniendo en cuenta que  $a \sim 10^{-5} \text{ \AA}$  y que las longitudes de onda tienen órdenes  $\lambda \sim 10^{-3} - 10^{-4} \text{ \AA}$  se tiene

En física nuclear  $a/\lambda \sim 10^{-1}$

Vemos que en física atómica, la aproximación que consiste en guardar en (14.48) solo el primer orden es muy buena y desmejora en física nuclear donde habrá que incluir más términos.

A esta aproximación en la que el exponencial es aproximado a 1 se la conoce como aproximación dipolar por razones que quedarán claras más abajo.

Tenemos entonces en la aproximación dipolar,

$$v_{fi} \approx -\frac{e}{mc} \sum_{i=1}^N \langle \psi_f | \hat{p}_i \cdot \vec{\epsilon} | \psi_i \rangle \quad (14.50)$$

Ahora bien, dado que

$$[\hat{H}_0, \vec{r}_i] = \left[ \sum_{j=1}^N \frac{\hat{p}_j^2}{2m}, \vec{r}_i \right] = \frac{2}{2m} \sum_{j=1}^N \hat{p}_j [\hat{p}_j, \vec{r}_i] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{p}_i \quad (14.51)$$

podemos reemplazar  $\hat{p}_i$  en (14.50) por

$$\hat{p}_i = -\frac{m}{i\hbar} [\hat{H}_0, \vec{r}_i]$$

resultando

$$\begin{aligned} v_{fi} &\approx -\frac{emi}{mc\hbar} \sum_{i=1}^N \langle \psi_f | [\hat{H}_0, \vec{r}_i] \cdot \vec{\epsilon} | \psi_i \rangle = -\frac{ie}{c\hbar} (E_f - E_i) \sum_{i=1}^N \langle \psi_f | \vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_i | \psi_i \rangle \\ &= -\frac{ie}{c} \omega_{fi} \sum_{i=1}^N \vec{\epsilon} \cdot (\vec{r}_i)_{fi} = \frac{\omega_{fi}}{c} \vec{\epsilon} \cdot \vec{D}_{fi} \end{aligned} \quad (14.52)$$

donde hemos definido, como es habitual, un momento dipolar atómico  $\vec{D}$  como la suma de los valores de expectación los momentos dipolares

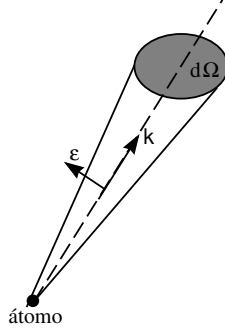
de cada electrón,

$$\vec{D}_{fi} = -e \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i)_{fi} \quad (14.53)$$

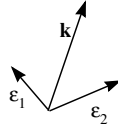
Vemos que la probabilidad de emisión inducida en un ángulo sólido  $d\Omega$ , alrededor de una dirección  $\vec{k}$  puede entonces escribirse como

$$dW_{fi} = \frac{4\pi^2}{\hbar c} I(\omega_{fi}) |\vec{\epsilon} \cdot \vec{D}_{fi}|^2 d\Omega \quad (14.54)$$

En la figura siguiente representamos como siempre al cono de la radiación cuya probabilidad de transición hemos calculado



O sea que hay una probabilidad de transición de un estado con energía  $E_i$  a otro estado con energía  $E_f < E_i$  acompañada de emisión de una onda electromagnética plana en la dirección  $\vec{k}$  dentro de un cono con ángulo sólido  $d\Omega$ . La polarización de la onda es  $\vec{\epsilon}$  y la frecuencia es  $(E_i - E_f)/\hbar$ . Para calcular la probabilidad total debemos comenzar por sumar sobre polarizaciones. Consideremos la terna ortogonal



Tenemos que sumar las probabilidades de emitir radiación con polarización  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$ . Para ello, escribimos

$$|\vec{\epsilon} \cdot \vec{D}_{fi}|^2_{total} = |\vec{\epsilon}_1 \cdot \vec{D}_{fi}|^2 + |\vec{\epsilon}_2 \cdot \vec{D}_{fi}|^2 \quad (14.55)$$

Si descomponemos  $\vec{D}_{fi}$  en componentes,

$$|\vec{D}_{fi}|^2 = |\check{k} \cdot \vec{D}_{fi}|^2 + |\check{\epsilon}_1 \cdot \vec{D}_{fi}|^2 + |\check{\epsilon}_2 \cdot \vec{D}_{fi}|^2 \quad (14.56)$$

Pasando el primer término del lado derecho al lado izquierdo de la igualdad tenemos

$$|\vec{D}_{fi}|^2 - |\check{k} \cdot \vec{D}_{fi}|^2 = |\vec{D}_{fi}|^2 (1 - \cos^2 \theta) = |\check{\epsilon} \cdot \vec{D}_{fi}|^2 \Big|_{total} \quad (14.57)$$

donde hemos llamado  $\theta$  al ángulo entre  $\vec{k}$  y  $\vec{D}$ .

Con todo lo anterior, podemos escribir a la probabilidad de emisión inducida en la unidad de ángulo sólido (14.54)

$$dW_{fi} = \frac{4\pi^2}{\hbar c} I(\omega_{fi}) |\check{\epsilon} \cdot \vec{D}_{fi}|^2 d\Omega$$

en la forma

$$\frac{dW_{fi}}{d\Omega} = \frac{4\pi^2}{\hbar c} I(\omega_{fi}) |\vec{D}_{fi}|^2 (1 - \cos^2 \theta) \quad (14.58)$$

Notemos que  $\theta$  mide el ángulo entre la dirección del momento dipolar atómico (que no podemos conocer más que a través sus elementos de matriz) y la de  $\vec{k}$ , que podemos identificar con un eje en el que alineamos el detector. Moviendo el detector mediremos valores diferentes de  $dW_{fi}/d\Omega$  según la fórmula (14.58).

## Reglas de Selección

En la última clase consideramos el caso en que un átomo era perturbado por un potencial dependiente del tiempo que tomamos como una onda plana (14.3)

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}^{(0)} \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) + \vec{A}^{(0)*} \exp(-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$$

En el gauge de Coulomb vimos que el Hamiltoniano completo resultante era

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \sum_{i=1}^N \frac{e}{m_i c} \vec{A}(\vec{r}_i, t) \cdot \hat{\vec{p}}_i \quad (14.59)$$

Debemos remarcar que en esta ecuación se tuvo en cuenta que habiendo dos valores posibles de proyección del spin  $s$  con dos posibles proyecciones  $s_z = \pm 1$  se ha incluido un factor 2 para incluir ambas contribuciones. Este factor 2 cancela el factor  $1/2$  que aparece en los términos del Hamiltoniano proporcionales a  $1/(2m_i)$ . Esto es equivalente a multiplicar por 2 la amplitud de la onda plana,

Calculamos las probabilidades de emisión inducida o absorbida de la energía transportada por el “fotón (ver eq.(14.45))

$$\mathcal{W}_{fi} = \frac{4\pi^2 c}{\hbar \omega_{fi}^2} \frac{c}{8\pi} u(\omega_{fi}) |v_{fi}|^2 d\Omega, \quad \text{emisión inducida}$$

$$\mathcal{W}_{fi} = \frac{4\pi^2 c}{\hbar \omega_{fi}^2} \frac{c}{8\pi} u(\omega_{if}) |v_{fi}^\dagger|^2 d\Omega, \quad \text{absorción}$$

donde  $v_{fi}$  es el elemento de matriz de la parte espacial de la onda plana

$$v_{fi} = -\frac{e}{mc} \sum_{i=1}^N \langle \psi_f | \hat{\vec{p}}_i \cdot \vec{\epsilon} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) | \psi_i \rangle$$

Comparando las dimensiones atómicas con la longitud de ondas consideramos que en primera aproximación era posible aproximar el exponencial de manera  $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \approx 1$  de manera que en ese caso pudimos escribir de manera compacta

$$v_{fi} = \frac{\omega_{fi}}{c} \vec{\epsilon} \cdot \vec{D}_{fi} \quad (14.60)$$

donde

$$\vec{D}_{fi} = -e \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i)_{fi}$$

no es otra cosa que la suma de los valores de expectación los momentos dipolares de cada electrón.

Evidentemente, las transiciones solo tienen lugar si el elemento de matriz  $\langle \psi_f | \vec{\epsilon} \cdot \vec{D}_{fi} | \psi_i \rangle$  es no nulo. Analizaremos ahora las llamadas “reglas de selección” que determinan cuáles transiciones son las que tienen lugar de acuerdo a que el bracket de  $\vec{D}_{fi}$  no se anule.

Debido a la presencia de  $\vec{r}_i$  en el argumento del momento dipolar, este cambia ante una transformación de paridad  $P$  por lo que los elementos de matriz serán no nulos solo si la paridad de los estados  $|\psi_i\rangle$  y  $|\psi_f\rangle$  es opuesta para compensar el cambio de signo de manera de que la integral no se anule. Es decir, debe ser

$$\Delta P = P_f - P_i \neq 0 \quad (14.61)$$

Esta es la llamada regla de Laporte (por el físico alemán Otto Laporte, que obtuvo en el año 1924).

Consideremos como ejemplo el caso de un único electrón atómico (en un campo central). Las funciones de onda serán

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \psi_i \rangle &= R_i(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ \langle \vec{r} | \psi_f \rangle &= R_f(r) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (14.62)$$

Si usamos las conocidas expresiones

$$\begin{aligned} z &= r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\theta, \varphi) \\ x + iy &= -r \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{11}(\theta, \varphi) \\ x - iy &= r \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1-1}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (14.63)$$

podemos escribir al momento dipolar  $\vec{\epsilon} \cdot \vec{r} = \epsilon_x \cdot x + \epsilon_y \cdot y + \epsilon_z \cdot z$  como

$$\vec{\epsilon} \cdot \vec{r} = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left( \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1}(\theta, \varphi) - \frac{\epsilon_x - i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{11}(\theta, \varphi) + \epsilon_z Y_{10}(\theta, \varphi) \right) \quad (14.64)$$

Luego, podremos escribir a los elementos de matriz en la forma

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | \vec{\epsilon} \cdot \vec{r} | \psi_i \rangle &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^\infty dr r^3 (r) R_i(\vec{r}) R_f(r) \int_0^\pi \sin \theta d\theta \times \\ &\quad \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) \left( \epsilon_z Y_{10}(\theta, \varphi) + \frac{\epsilon_x + i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1}(\theta, \varphi) - \right. \\ &\quad \left. \frac{\epsilon_x - i\epsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{11}(\theta, \varphi) \right) Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (14.65)$$

La parte angular de (14.65) se reduce entonces a integrales de productos de 3 armónicos esféricos que se pueden hacer explícitamente usando la ortogonalidad y la relación

$$\begin{aligned} Y_{1m}(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) &= \\ &= AY_{l'+1, m+m'}(\theta, \varphi) + BY_{l', m+m'}(\theta, \varphi) + CY_{l'-1, m+m'}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (14.66)$$

A partir de estas integrales angulares llegamos a las siguientes reglas de selección para transiciones permitidas:

- $\Delta l = l' - l = \pm 1$
- $\Delta m = m' - m = 0, \pm 1$

Para átomos como el de hidrógeno, o los alcalinos (con un único electrón fuera de capa cerrada), estas reglas de selección determinan totalmente el espectro.

En otros átomos, con muchos electrones disponibles para hacer transiciones, las reglas se complican. La función de onda es una función determinantal (de Slater), con productos de funciones de onda de una partícula (orbitales).

Como el operador de momento dipolar es un operador de en el que aparecen las coordenadas de distintos electrones ( $\sum \vec{r}_i$ ) si se produce un único salto por acción de la perturbación, sigue siendo necesario que  $\Delta l = \pm 1$ . Pero puede suceder que la transición implique que dos orbitales cambian y entonces lo que determinará la paridad serán los dos momentos angulares orbitales del estado inicial y dos del final. Será la diferencia entre la suma de ambos la que deberá dar un salto de  $\pm 1$ .



Es un poco más complicado deducir las fórmulas pero el resultado es parecido al caso de un electrón. Sin embargo, hay diferencias por el hecho de estar involucrados varios electrones. En particular, el momento angular orbital  $L$  del estado no tiene que ver de manera directa con la suma *naive* (ingenua) de momentos angulares de los orbitales con los que construimos la función de onda determinantal. de cada electrón puede ser 0. He aquí la lista de reglas (que incluye las condiciones ligadas a la existencia del spin):

- La paridad de los estado implicados debe cambiar.
- Cuando el sistema puede ser aproximado por orbitales, la configuración debe cambiar de manera que  $\Delta \sum l_i = \pm 1$
- $\Delta J = 0, \pm 1$
- $J = 0 \rightarrow J = 0$  está prohibida
- $\Delta m_J = 0, \pm 1$
- $\Delta L = 0, \pm 1$
- $\Delta M_L = 0, \pm 1$
- $\Delta S = 0$
- $\Delta M_S = 0$

Notemos que está permitido que  $\Delta L = 0$ . Pero este  $L$  nada tiene que ver con la paridad del estado (No es el  $L$  que aparece en un armónico esférico determinando su paridad a través de algún  $(-1)^L$ ).

## Transiciones prohibidas

Los resultados anteriores fueron obtenidos reteniendo solo el primer término (i.e. el 1) en el desarrollo de  $\exp(i\vec{k}\vec{r})$ . Debemos analizar cómo cambian los resultados si incluimos el término siguiente. Este término  $i\vec{k}\cdot\vec{r}$  da, al elemento de matriz  $v_{fi}$ , la contribución  $v^s$  siguiente:

$$v^s = -\frac{ie}{mc} \sum_i \left( \vec{\epsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_i \right) \left( \vec{k} \cdot \vec{r}_i \right) \quad (14.67)$$

Podemos escribir a  $v^s$  de la siguiente manera

$$v^s = v^M + v^Q \quad (14.68)$$

con

$$\begin{aligned} v^M &= -\frac{ie}{2mc} \sum_i \left( (\vec{\epsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_i) (\vec{k} \cdot \vec{r}_i) - (\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_i) (\vec{k} \cdot \hat{\vec{p}}_i) \right) \\ v^Q &= -\frac{ie}{2mc} \sum_i \left( (\vec{\epsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_i) (\vec{k} \cdot \vec{r}_i) + (\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_i) (\vec{k} \cdot \hat{\vec{p}}_i) \right) \end{aligned} \quad (14.69)$$

Es fácil ver que

$$(\vec{\epsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_i) (\vec{k} \cdot \vec{r}_i) - (\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_i) (\vec{k} \cdot \hat{\vec{p}}_i) = (\vec{k} \wedge \vec{\epsilon}) \cdot \vec{L}_i \quad (14.70)$$

de manera que

$$v^M = -\frac{ie}{2mc} (\vec{k} \wedge \vec{\epsilon}) \cdot \sum_i \vec{L}_i \quad (14.71)$$

o, recordando la relación entre momento angular orbital y momento magnético  $\vec{\mu}$

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L} \quad (14.72)$$

$$v^M = -i(\vec{k} \wedge \vec{\epsilon}) \cdot \sum_i \vec{\mu}_i = -i(\vec{k} \wedge \vec{\epsilon}) \cdot \vec{M} \quad (14.73)$$

donde hemos llamado  $\vec{M}$  al momento dipolar magnético total. Como  $\vec{M}$  es un vector axial, no cambia de signo ante transformaciones de paridad así que los elementos de matriz de  $v^M$  serán no nulos solo si  $\Delta P = 0$

Se puede proceder de manera análoga con  $v^Q$ , relacionado con el momento cuadrupolar eléctrico Consideremos ahora el término

$$v^Q = -\frac{ie}{2mc} \sum_i \left( (\vec{\epsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_i) (\vec{k} \cdot \vec{r}_i) + (\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_i) (\vec{k} \cdot \hat{\vec{p}}_i) \right) \quad (14.74)$$

Puede verse que cada término de la suma puede escribirse como

$$(\vec{\epsilon} \cdot \hat{\vec{p}}) (\vec{k} \cdot \vec{r}) + (\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}) (\vec{k} \cdot \hat{\vec{p}}) = \begin{pmatrix} k^1 & k^2 & k^3 \end{pmatrix} (\vec{x} \otimes \vec{p} + \vec{p} \otimes \vec{x}) \begin{pmatrix} \epsilon^1 \\ \epsilon^2 \\ \epsilon^3 \end{pmatrix} \quad (14.75)$$

donde el producto tensorial  $\vec{x} \otimes \vec{p}$  está dado por

$$\begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^1 & p^2 & p^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^1 p^1 & x^1 p^2 & x^1 p^3 \\ x^2 p^1 & x^2 p^2 & x^2 p^3 \\ x^3 p^1 & x^3 p^2 & x^3 p^3 \end{pmatrix} \quad (14.76)$$

Como en el caso del momento dipolar eléctrico, podemos escribir este resultado como un conmutador

$$\vec{x} \otimes \vec{p} + \vec{p} \otimes \vec{x} = \frac{im}{\hbar} [H_0, \vec{x} \otimes \vec{x}] \quad (14.77)$$

Tendremos entonces

$$\begin{aligned} (v_Q)_{FI} &= -\frac{eim}{2\hbar c} \sum_{l=1}^N \langle \psi_F | \vec{k} \cdot [\hat{H}_0, \vec{x}_l \otimes \vec{x}_l] \cdot \vec{\epsilon} | \psi_I \rangle \\ &= -\frac{ei}{2c} \omega_{fi} \vec{k} \cdot \sum_l^N \langle \psi_f | \vec{x}_l \otimes \vec{x}_l | \psi_i \rangle \cdot \vec{\epsilon} \end{aligned} \quad (14.78)$$

En vista del valor que toma el producto tensorial cuando se tiene  $\vec{x} \otimes \vec{x}$  (ver (14.76)) solo la parte de traza nula debe ser tenida en cuenta pues caso contrario se arma como factor común de la traza el producto  $\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}$  que es nulo. Luego se podrá poner para cada electrón, usando como notación que las coordenadas de un electron son  $\vec{x} = (x, y, z) = (x^a)$

$$(\vec{x} \otimes \vec{x})^{ab} = x^a x^b - \frac{|\vec{x}|^2}{3} \delta^{ab} \equiv T^{ab} \quad (14.79)$$

de manera que para el conjunto de los electrones a los que indicamos con el índice  $l = 1, 2, \dots, N$  queda construido el momento cuadrupolar eléctrico,  $Q_{FI}^{ab}$  que aparece en el desarrollo en multipolos del sistema de N cargas e

$$(v_Q)_{FI} = -\frac{ei}{2c} \omega_{FI} k^i \sum_l^N T_l^{ab} \epsilon^j \equiv -\frac{im}{c} Q_{FI}^{ab} \quad (14.80)$$

# Clase 15

## Dispersión de partículas

Estudiaremos aquí la dispersión elástica de partículas, es decir, aquella en que la energía cinética total de las partículas que intervienen en el proceso se conserva y no se producen cambios internos en ellas. En contraste, existen procesos de dispersión inelástica en los que la energía cinética total no se conserva y una parte o toda ella se convierte en energía interna de las partículas después del choque (produciendo deformaciones, vibraciones, rotaciones, ...).

Por supuesto, tanto en las dispersiones elásticas como en las inelásticas hay conservación del cuadrivector energía-impulso total del sistema.

Consideremos una partícula  $A$ , a la que llamaremos *proyectil*, que incide sobre otra partícula  $B$  a la que llamaremos *blanco*. Sin pérdida de generalidad, supondremos que  $A$  se mueve a lo largo del eje  $z$ , con una cantidad de movimiento que, en el sistema del laboratorio (L), llamaremos  $\vec{p}_A$  mientras que el blanco  $B$  está en reposo en L.

En el sistema del centro de masa (CM), ambas partículas se moverán cada una hacia la otra con igual (en módulo y dirección) de la cantidad de movimiento (pero sentido opuesto).

En el sistema CM, el problema de mecánica clásica de dos cuerpos de masa  $m_A$  y  $m_B$  es equivalente al de un cuerpo de masa reducida  $m$

$$m = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (15.1)$$

sometido, por ejemplo si se trata de partículas cargadas eléctricamente, al potencial coulombiano correspondiente. En el sistema reducido, que

se mueve solidario al centro de masa (sistema CM), la energía cinética clásica es

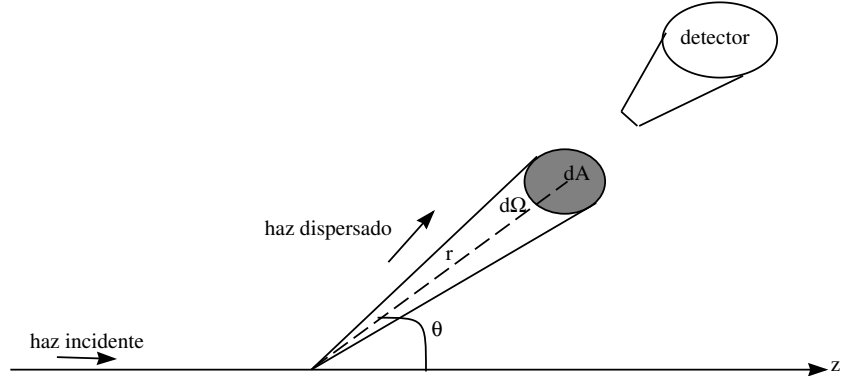
$$E_c = \frac{p^2}{2m} \quad (15.2)$$

donde

$$\vec{p} = \frac{m_B \vec{p}_A - m_A \vec{p}_B}{m_A + m_B} \quad (15.3)$$

Fuera del alcance (rango) del potencial, la energía total del sistema se reduce a la energía cinética. Si además la masa del blanco es mucho mayor que la del proyectil ( $m_B \gg m_A$ ), la masa reducida coincide aproximadamente con la del proyectil ( $m_A \approx m$ ) y los sistemas CM y del laboratorio (sistema L) son, a los efectos prácticos, idénticos.

Consideremos ahora el caso cuántico. Dado un haz de partículas A que incide según el eje  $z$ , como en la figura, pretendemos calcular la probabilidad de que las partículas sean dispersadas dentro de un cono con ángulos polares  $(\theta, \varphi)$  y una abertura del cono de ángulo sólido  $d\Omega$ :



Hablamos de “haz incidente” porque en una experiencia real en que inciden muchas partículas idénticas debemos considerar un *flujo de partículas incidentes* que en un diferencial de tiempo  $dt$  atraviesa un

diferencial de área  $dA$ . Análogamente, hablaremos de un haz dispersado (*flujo de partículas dispersadas* que llegan al detector por unidad de tiempo y área). El cociente entre estos dos flujos da la probabilidad de dispersión buscada.

Respecto de la partícula incidente con impulso  $\hbar k$ , en la región lejana en que no actúa el potencial tendrá una energía  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$  debida a su movimiento (i.e., se trata de pura energía cinética). En mecánica cuántica, sabemos que la función de onda asociada a esa partícula será una onda plana que en el caso de movimiento a lo largo del eje  $z$  tiene la forma espacial:

$$\psi_i = \exp(ikz) \quad (15.4)$$

El efecto del potencial será dispersar esta onda, de manera que, en el detector, a grandes distancias del potencial la función de onda será

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(ikz) + \psi_d \quad (15.5)$$

donde  $\psi_d$  es la parte de la función de onda que describe el efecto del potencial dispersor.

Es razonable suponer que la medida de este efecto depende de los ángulos  $(\theta, \varphi)$  en que se coloque el detector. Y que lo que se detecte como haz dispersado pueda expresarse como una onda saliente, esférica, del tipo  $(\exp(ikr)) / r$ . Este sería el comportamiento asintótico, a grandes distancias, si el potencial de interacción fuera un potencial central. Es razonable, a grandes distancias, imponer esta condición en el caso general.

Por lo anterior propondremos para (15.5) una expresión de la forma

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(ikz) + f_k(\theta, \varphi) \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (15.6)$$

Es importante notar que en (15.6) estamos dando una *condición de contorno* que corresponde a una onda esférica saliente con una amplitud  $f_k(\theta, \varphi)$  que no es constante sobre la superficie de la esfera de radio  $r$  en que medimos desplazando el detector. El factor  $1/r$  asegura que cuando calculemos flujos (donde aparecen los módulos al cuadrado de las funciones de onda) aparecerá un  $1/r^2$  que compensará el  $r^2$  del diferencial de superficie ( $r^2 d\Omega$ ) sobre la esfera. Más adelante veremos

que la ecuación de Schrödinger admite una solución que satisface (15.6) como condición de contorno.

El flujo incidente correspondiente a este problema es

$$\vec{J}_i = \frac{\hbar}{2mi} (\psi_i^* \vec{\nabla} \psi_i - \psi_i \vec{\nabla} \psi_i^*) = \frac{\hbar k}{m} \check{k} \equiv v_i \check{k} \quad (15.7)$$

Obviamente elegimos llamar  $v_i$  al impulso  $\hbar k$  de la partícula dividido su masa.

En cuanto al flujo dispersado, toma la forma, a grandes distancias, cuando la partícula ya no siente el efecto del potencial del blanco

$$\begin{aligned} \vec{J}_d = & \frac{\hbar}{2mi} (\psi_d^* \vec{\nabla} \psi_d - \psi_d \vec{\nabla} \psi_d^*) = \frac{\hbar}{2mi} \left( \frac{2}{r^2} |f_k(\theta, \varphi)|^2 i k \check{r} \right. \\ & + \frac{1}{r^3} \left( f_k^*(\theta, \varphi) \frac{df_k(\theta, \varphi)}{d\theta} - f_k(\theta, \varphi) \frac{df_k^*(\theta, \varphi)}{d\theta} \right) \check{e}_\theta + \\ & \left. \frac{1}{r^3 \sin \theta} \left( f_k^*(\theta, \varphi) \frac{df_k(\theta, \varphi)}{d\varphi} - f_k(\theta, \varphi) \frac{df_k^*(\theta, \varphi)}{d\varphi} \right) \check{e}_\varphi \right) \quad (15.8) \end{aligned}$$

A grandes distancias es el primer término el que domina por lo que podemos escribir

$$\vec{J}_d \sim \frac{\hbar k}{m} |f_k(\theta, \varphi)|^2 \frac{1}{r^2} \check{r} = v_i |f_k(\theta, \varphi)|^2 \frac{1}{r^2} \check{r} \quad (15.9)$$

A partir del flujo dispersado podemos calcular el número de partículas dispersadas que atraviesan el detector ,

$$dN_d = \vec{J}_d \cdot d\vec{A} = \vec{J}_d \cdot \check{r} r^2 d\Omega = v_i |f_k(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (15.10)$$

Dividiendo esta cantidad por el flujo de partículas incidentes tendremos el diferencial de la sección eficaz de dispersión,

$$d\sigma_d \equiv \frac{dN_d}{J_i} = |f_k(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (15.11)$$

La sección eficaz diferencial, que mide el número de partículas dispersadas por unidad de flujo incidente y por unidad de ángulo sólido, se obtiene dividiendo por el elemento de ángulo sólido

$$\frac{d\sigma_d}{d\Omega} = |f_k(\theta, \varphi)|^2 \quad (15.12)$$

A la cantidad  $f_k(\theta, \varphi)$  se la conoce como amplitud de dispersión. Si para un dado potencial se la puede calcular, (15.12) permite predecir la sección eficaz diferencial que se medirá en el correspondiente experimento. *Mutatis mutando*, si en un experimento se determina la sección eficaz diferencial, se puede conocer el módulo de la amplitud de dispersión y, de él, tener idea de la función de onda de las partículas dispersadas y también de las propiedades del blanco. Notemos que  $f_k(\theta, \varphi)$ , además de depender de los ángulos  $(\theta, \varphi)$ , depende de  $k$ , un parámetro asociado a la energía de las partículas incidentes.

Vamos a discutir ahora los métodos que permiten calcular la amplitud de dispersión  $f_k(\theta, \varphi)$ .

## El método de la función de Green

Consideremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un problema como el que nos ocupa. Es decir,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_E(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi_E(\vec{r}) = E \psi_E(\vec{r}) \quad (15.13)$$

donde  $V(\vec{r})$  es el potencial dispersor. Escribiendo

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad u(\vec{r}) = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2} \quad (15.14)$$

tendremos

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_k(\vec{r}) = u(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}) \quad (15.15)$$

En este punto, introducimos la función de Green asociada al problema libre de potencial

$$(\nabla^2 + k^2) G_k(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \quad (15.16)$$

Conocemos además la solución de la ecuación homogénea correspondiente a una onda:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_k^0(\vec{r}) = 0 \implies \psi_k^0 = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (15.17)$$



Con esto, podemos escribir la solución general de (15.15) en la forma

$$\psi_k(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' G_k(\vec{r}, \vec{r}') u(\vec{r}') \psi_k(\vec{r}') \quad (15.18)$$

Hemos pasado de esta manera del problema de resolver una ecuación diferencial, (15.13), al problema de resolver una ecuación integral. Veremos que la solución, que será iterativa, nos permitirá en particular, calcular  $f_k(\theta, \varphi)$  y así podremos calcular la sección eficaz de dispersión.

Debemos ajustar esta solución de manera que se cumpla la condición de contorno (15.5),

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(ikz) + \psi_d \quad (15.19)$$

Notemos que la solución de la ecuación homogénea corresponde en (15.18) a una onda plana que viaja en una dirección arbitraria mientras que en (15.5) nos restringimos al eje  $z$ . Por supuesto, esto se ajusta fácilmente poniendo en (15.18)  $\vec{k} = (0, 0, k)$ .

## Cálculo de la función de Green

Proponemos para  $G_k(\vec{r}, \vec{r}') = G_k(\vec{r} - \vec{r}')$  un desarrollo de Fourier de la forma

$$G_k(\vec{r}) \equiv \int d^3k' g_k(k') \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r}) \quad (15.20)$$

de manera que, utilizando esta definición en la ecuación que obedece la función de Green, (15.16),

$$(\nabla^2 + k^2) G_k(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$$

y la siguiente representación de la delta de Dirac,

$$\delta^{(3)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r}) \quad (15.21)$$

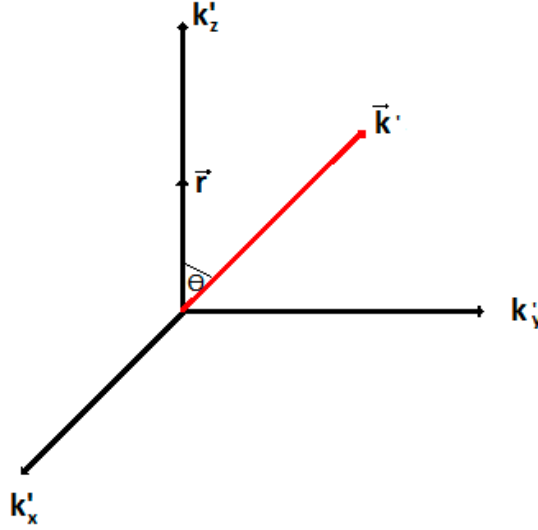
tenemos

$$g_k(k') = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{k'^2 - k^2} \quad (15.22)$$

Podemos ahora calcular

$$G_k(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \int d^3k' \frac{1}{k'^2 - k^2} \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r}) \quad (15.23)$$

Eligiendo el sistema de coordenadas de manera que  $\vec{k}' = (k'_x, k'_y, k'_z)$  sea tal que  $k'_x \cdot x = k'_y \cdot y = 0$  y que  $k'_z$  coincida con la dirección de  $\vec{r}$ , el exponencial se simplificará a (ver figura)



$$G_k(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \int k'^2 dk' \sin \theta' d\theta' d\varphi' \frac{1}{k'^2 - k^2} \exp(ik'r \cos \theta') \quad (15.24)$$

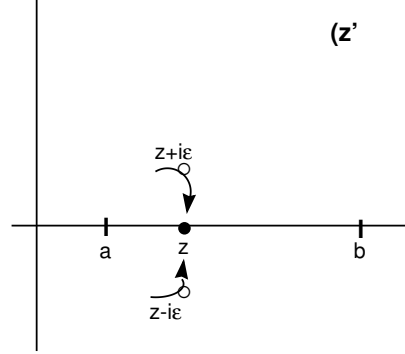
donde  $\theta'$  es el ángulo que forma  $\vec{k}$  con el eje  $z'$ . Luego de integrar trivialmente sobre  $\varphi'$  y sobre  $\theta'$ , llegamos a

$$\begin{aligned} G_k(\vec{r}) &= \frac{i}{\pi r} \int_0^\infty k' dk' \frac{1}{k'^2 - k^2} (\exp(ik'r) - \exp(-ik'r)) \\ &= \frac{1}{i\pi r} \int_{-\infty}^\infty k' dk' \frac{\exp(ik'r)}{k'^2 - k^2} \end{aligned} \quad (15.25)$$

Esta es una integral que tiene singularidades en el camino de integración. Se trata de un problema que tiene una solución muy simple en la teoría de una variable compleja, por lo que discutiremos primeramente cómo se trata en este contexto el problema de integrales de este tipo.

Consideremos la integral

$$f(z) = \int_a^b \frac{g(z')}{z' - z} dz' \quad z, z' \in C, \quad a, b \in R \quad (15.26)$$



Tomemos

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} f(z + i\epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_a^b \frac{g(z')}{z' - z - i\epsilon} dz' \quad (15.27)$$

y

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} f(z - i\epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_a^b \frac{g(z')}{z' - z + i\epsilon} dz' \quad (15.28)$$

de manera que definiendo

$$\mathcal{F}(z) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} (f(z + i\epsilon) - f(z - i\epsilon)) \quad (15.29)$$

tendremos

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(z) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_a^b g(z') \left( \frac{1}{z' - z - i\epsilon} - \frac{1}{z' - z + i\epsilon} \right) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_a^b g(z') \left( \frac{2i\epsilon}{(z' - z)^2 + \epsilon^2} \right) dz' \end{aligned} \quad (15.30)$$

Usando ahora la representación de la delta,

$$\delta(z - z') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{(z' - z)^2 + \epsilon^2} \quad (15.31)$$

tendremos

$$\mathcal{F}(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z \notin (a, b) \\ 2\pi i g(z) & \text{si } z \in (a, b) \end{cases} \quad (15.32)$$

vemos que lo que sucede con  $\mathcal{F}(z)$  es lo mismo que sucede por ejemplo con  $\sqrt{z}$ . En efecto, si escribimos  $z = \rho \exp(i\varphi)$ , tenemos  $\sqrt{z} =$

$\sqrt{\rho} \exp(i\varphi/2)$  y vemos que al considerar  $z + i\epsilon$  tenemos  $\varphi = 0$  y en cambio cuando tomamos  $z - i\epsilon$  tenemos  $\varphi = 2\pi$  de manera que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\sqrt{z + i\epsilon} - \sqrt{z - i\epsilon}) = 2\sqrt{\rho} \quad (15.33)$$

En el caso de la raíz tenemos puntos de ramificación en 0 y en  $\infty$  mientras que en el caso de  $\mathcal{F}$  los puntos de ramificación son  $a$  y  $b$ .

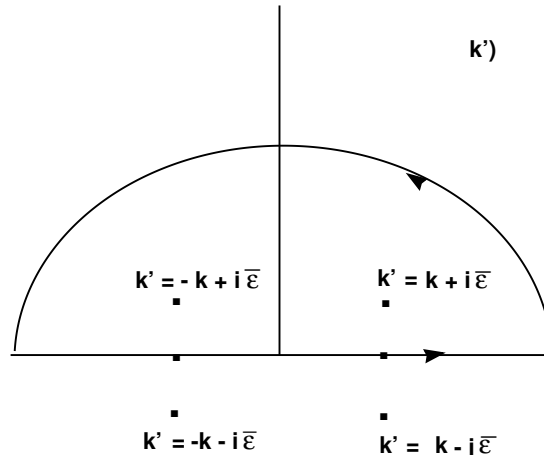
Evidentemente, con  $G_k(r)$  nos sucederá lo mismo, según consideremos que  $k^2$  tienda al eje real por arriba o por abajo. Si definimos

$$G_k^\pm(\vec{r}) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} G(k^2 \pm i\epsilon; \vec{r}) \quad (15.34)$$

tendremos

$$\begin{aligned} G_k^\pm(\vec{r}) &= \frac{1}{i\pi r} \int_{-\infty}^{\infty} k' dk' \frac{\exp(ik'r)}{k'^2 - (k^2 \pm i\epsilon)} \\ &= \frac{1}{i\pi r} \int_{-\infty}^{\infty} k' dk' \frac{\exp(ik'r)}{(k' - \sqrt{k^2 \pm i\epsilon})(k' + \sqrt{k^2 \pm i\epsilon})} \end{aligned} \quad (15.35)$$

Si consideramos que  $k'$  es una variable compleja con parte imaginaria positiva,  $\exp(ik'r)$  decrece exponencialmente cuando  $r \rightarrow \infty$ . En tal caso, si consideramos un camino de integración en el semiplano positivo como el de la figura que sigue, la integral sobre el semicírculo se anula.



$$\bar{\epsilon} = \frac{\epsilon}{2k}$$

Los polos corresponden a los valores de  $k'$  tales que

$$k' = \pm\sqrt{k^2 \pm i\epsilon} \approx \pm k \left(1 \pm \frac{i\epsilon}{2k^2}\right) + O(\epsilon^2) \quad (15.36)$$

Para el caso en que se suma  $+\epsilon$  a la parte imaginaria los polos están en  $k' = k + i\bar{\epsilon}$  y en  $k' = -k - i\bar{\epsilon}$  por lo que, en el camino de la figura solo contribuye el primero. En este caso se obtiene fácilmente, utilizando el teorema de Cauchy,

$$G_k^+(r) = \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (15.37)$$

Análogamente, , para el caso en que se suma  $-\epsilon$  solo contribuye el polo que corresponde a  $k' = -k + i\epsilon$  y se obtiene

$$G_k^-(r) = \frac{\exp(-ikr)}{r} \quad (15.38)$$

Lo mismo se hubiera obtenido de considerar un camino en el semiplano inferior. Tenemos entonces para la solución (15.18),

$$\psi_k^\pm(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\exp(\pm ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} u(\vec{r}') \psi_k^\pm(\vec{r}') \quad (15.39)$$

Que existan dos soluciones se debe a que la ecuación a resolver es de segundo orden Debemos entonces elegir la solución que se adecúe a la condición de contorno que impusimos, i.e. a una onda esférica saliente a grandes distancias. Es fácil convencerse que, para  $r \rightarrow \infty$ , es la solución  $\psi_k^+$  la que tiene el buen comportamiento. En efecto, desarrollando el argumento del exponencial se tiene

$$k|\vec{r} - \vec{r}'| \approx kr \left(1 - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r^2}\right) + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \quad (15.40)$$

de manera que

$$\psi_k^\pm(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ikr)}{r} \int d^3r' \exp(\mp i\vec{k}' \cdot \vec{r}') u(\vec{r}') \psi_k^\pm(\vec{r}') \quad (15.41)$$

donde hemos llamado  $\vec{k}' = k\hat{r}$ . Tenemos entonces como solución acorde con las condiciones de contorno a aquella que se escribe

$$\psi_k^+(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ikr)}{r} \int d^3r' \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}') u(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}') \quad (15.42)$$

De esta expresión podemos identificar a la amplitud de dispersión  $f_k(\theta, \varphi)$ , ya que la habíamos definido así:

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(ikz) + f_k(\theta, \varphi) \frac{\exp(ikr)}{r}$$

Tendremos entonces

$$f_k(\theta, \varphi) = f_k(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}') \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}') \quad (15.43)$$

Recordemos que  $\theta$  es el ángulo entre el eje de incidencia ( $z$ ) y el definido por el detector. Esa elección hizo que no hubiera dependencia en el ángulo azimutal  $\varphi$ .

Evidentemente, como no hemos resuelto la ecuación, no conocemos  $\psi_k^+$  por lo que no conocemos  $f_k(\theta)$ . Podemos sin embargo hacer una primera aproximación (llamada de Born) que consiste, sin más, en tomar a  $\psi_k^+$  como la onda plana incidente. En tal caso tendremos

$$f_k^{(0)}(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\vec{r}') \exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}') \quad (15.44)$$

Insertando este resultado en la fórmula (15.12),

$$\frac{d\sigma_d}{d\Omega} = |f_k(\theta, \varphi)|^2$$

obtendremos la sección eficaz diferencial en la aproximación de Born

$$\frac{d\sigma_d^0}{d\Omega} = |f_k^{(0)}(\theta)|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int d^3r' V(\vec{r}') \exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}') \right|^2 \quad (15.45)$$



## Clase 16

Vimos que cuando un haz de partículas es dispersado por un blanco, la función de onda que describe el estado de una partícula toma, a grandes distancias, la forma (ver (15.6))

$$\psi_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(ikz) + f_k(\theta, \varphi) \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (16.1)$$

donde el primer término del lado derecho representa la onda plana incidente, que describe el estado del proyectil cuando fue lanzado a tal distancia del blanco que corresponde a el de una partícula libre.

En cuanto al segundo término, corresponde a un *ansatz*<sup>33</sup> de onda esférica saliente dispersada en la que el denominador  $1/r$  asegura que el módulo cuadrado contenga un factor  $1/r^2$  que cancela, al integrar el  $r^2$  del diferencial de volumen. Finalmente la dependencia angular está dada por  $f_k(\theta, \varphi)$ , conocida como “amplitud de dispersión” y juega un rol central en el cálculo de las secciones eficaces.

Utilizando el método de la función de Green, vimos que el problema (que por tratarse del de un sistema de dos cuerpos puede reducirse al de una partícula en un potencial  $V(\vec{r})$ ) que nos lleva de la ecuación diferencial de Schrödinger a una ecuación integral, (ver la fórmula (15.39)) para la onda dispersada  $\psi_d$ ,

$$\psi_k^\pm(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar} \int d^3r' \frac{\exp(\pm ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_k^\pm(\vec{r}') \quad (16.2)$$

lo que lleva a una amplitud de dispersión (ver ec.(15.43)) a una solución

---

<sup>33</sup>ansatz: suposición sobre la forma de una función desconocida que se hace para encontrar la solución de un problema, particularmente de una ecuación.



de la forma

$$f_k(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}') \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}') \quad (16.3)$$

donde  $\vec{k}' = k\check{r}$ .

En la fórmula de arriba hemos escrito  $\vec{k}' = k\check{r}$  de manera que si elegimos la dirección de incidencia en la del eje  $z$ , el ángulo de dispersión es simplemente  $\theta$ , el de las coordenadas esféricas, por lo que se tiene que  $f_k(\varphi, \theta) = f_k(\theta)$ .

Luego, en una aproximación de orden cero en la que reemplazamos  $\psi_k^+(\vec{r}')$  por  $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}')$  llegamos a la sección eficaz en la llamada “aproximación de Born” (de orden cero),

$$\frac{d\sigma_d^0}{d\Omega} = |f_k^{(0)}(\theta)|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int d^3r' V(\vec{r}') \exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}') \right|^2 \quad (16.4)$$

No es fácil de hacer una estimación confiable de la validez de la aproximación de Born. Para potenciales de corto alcance se puede hacer una evaluación cruda que describiremos en lo que sigue.

En el integrando del lado derecho de la ec.(16.3) la función de onda  $\psi_k^+(\vec{r}')$  aparece multiplicando al potencial que supondremos centrado en  $r = 0$ . Por haber supuesto que se trata de un potencial de corto alcance, el dominio de integración se verá reducido a la región cercana a  $r' \approx 0$ . Podemos entonces brutalmente poner  $r' = 0$  con lo que la aproximación de Born consistiría en reemplazar  $\psi_k^+(\vec{r}')$  dentro de la integral por  $\exp(i\vec{k}' \cdot \vec{0}) = 1$ .

Esta aproximación se vuelve más precisa para el caso de potenciales centrales  $V = V(r)$  de corto alcance en los que  $V(r) \neq 0$  solo cuando  $r \approx 0$  ya que la integral se va a cortar fuera de esa región cercana al origen. Podemos entonces aproximar  $\psi_k^+ = \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r})/r \approx 1/r$ . Hecho esto se puede integrar sobre los ángulos  $(\theta, \phi)$

$$\begin{aligned} f_k(\theta) &\approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}') \frac{V(r')}{r'} \\ &= -i\frac{2m}{\hbar^2} \int r'^2 dr' \frac{\sin(kr')}{kr'^2} V(r') \end{aligned} \quad (16.5)$$

Esta contribución a la función de onda podrá despreciarse frente a la de la onda incidente siempre que

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2 k} \int dr' \sin(kr') V(r') \right| = \left| \frac{k}{E} \int dr' \sin(kr') V(r') \right| \ll 1 \quad (16.6)$$

De aquí podemos inferir que, cualitativamente, la aproximación es buena si la energía  $E$  del haz incidente es grande y el potencial pequeño.

### Un ejemplo: la dispersión de un electrón por un átomo

Al incidir sobre un átomo, el potencial al que está sometido un electrón incidente de alta energía tiene la forma

$$V(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r} + Ze^2 \int d^3r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (16.7)$$

El primer término representa el potencial atractivo del núcleo sobre el electrón incidente mientras que el segundo describe la repulsión coulombiana de los demás electrones a los que se les ha asignado una densidad de carga  $\rho(\vec{r})$  definida de manera que

$$\int d^3r \rho(\vec{r}) = 1 \quad (16.8)$$

con la carga total representada por el factor  $Ze$  de la ec. (16.7).

Si definimos una densidad de carga total  $\rho_T(\vec{r})$  de manera de incluir también al núcleo,

$$\rho_T(\vec{r}) = \delta(\vec{r}) - \rho(\vec{r}) \quad (16.9)$$

podemos escribir al potencial en la forma

$$V(\vec{r}) = -Ze^2 \int d^3r' \frac{\rho_T(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (16.10)$$

Utilizando ahora (16.3),

$$f_k(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\vec{r}') \psi_k^+(\vec{r}') \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}')$$

tendremos

$$f_k(\theta) = \frac{Zme^2}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' d^3r'' \frac{\rho_T(\vec{r}'')}{|\vec{r}' - \vec{r}''|} \psi_k^+(\vec{r}') \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}') \quad (16.11)$$

o, en la aproximación de Born en que  $\psi_k^+(\vec{r}') \approx \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}')$ , reacomodando el integrando e incluyendo un factor

$$\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}'') \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}'') = 1$$

se obtiene

$$f_k(\theta) = \frac{Zme^2}{2\pi\hbar^2} \int d^3r'' \rho_T(\vec{r}'') \exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}'') \times \int d^3r' \frac{\exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot (\vec{r}' - \vec{r}''))}{|\vec{r}' - \vec{r}''|} \quad (16.12)$$

La integral en la segunda línea de (16.12) es la transformada de Fourier de la función de Green del laplaciano (como puede comprobarse fácilmente por derivación). Tal transformada de Fourier toma el valor  $\tilde{g}(k, k') = 4\pi/|\vec{k} - \vec{k}'|^2$  de manera que

$$f_k(\theta) = \frac{2Zme^2}{\hbar^2} \int d^3r'' \rho_T(\vec{r}'') \frac{\exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}'')}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} \quad (16.13)$$

Reescribiremos esta expresión en la forma

$$f_k(\theta) = \frac{2Zme^2}{\hbar^2} \int d^3k' \frac{1 - F(\vec{k} - \vec{k}')}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} \quad (16.14)$$

donde hemos definido un *factor de forma atómico*  $F(\vec{q})$  como

$$F(\vec{q}) = \int d^3r \rho(\vec{r}) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (16.15)$$

que no es más que la transformada de Fourier de la densidad de carga de los electrones del átomo blanco. Usando

$$|\vec{k} - \vec{k}'|^2 = 2k^2(1 - \cos \theta) = 4k^2 \sin^2 \left( \frac{\theta}{2} \right) \quad (16.16)$$

donde  $\theta$  es el ángulo entre  $\vec{k}$  y  $\vec{k}'$ . Con esto se tiene finalmente

$$f_k(\theta) = \frac{Ze^2}{4E \sin^2 \left( \frac{\theta}{2} \right)} (1 - \tilde{F}(\vec{k} - \vec{k}')) \quad (16.17)$$

Aquí  $\tilde{F}$  es la transformada de Fourier de  $F$  y  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Si el blanco fuera solamente un núcleo (i.e., no hubiera nube electrónica), la amplitud de dispersión sería

$$f_k(\theta) = \frac{Ze^2}{4E \sin^2 \left( \frac{\theta}{2} \right)} \quad (16.18)$$

de manera que la sección eficaz diferencial estaría dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{16E^2 \sin^4 \left( \frac{\theta}{2} \right)} \quad (16.19)$$

A pesar de provenir de la aproximación de Born es idéntico al resultado exacto de la sección eficaz de Rutherford para la dispersión de una partícula clásica por un potencial  $1/r$  (ver por ejemplo la ecuación (19.3) del libro *Mecánica* de Landau-Lifshitz).

## Método de ondas parciales

Hemos descripto el cálculo de secciones eficaces de dispersión de partículas a partir de la ecuación de Schrödinger escrita como una ecuación integral. Ello nos permitió, utilizando el método de la función de Green, desarrollar un proceso iterativo que se vuelve más preciso cuanto más pequeño es el campo dispersor y mas grande la energía de las partículas incidentes.

En lo que sigue describiremos un método alternativo, llamado “de ondas parciales” que ataca el problema de dispersión a partir de la ecuación de Schrödinger en su forma diferencial y que es particularmente apropiado cuando se trata de potenciales centrales.

Partimos de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para una partícula de masa  $m$  en un potencial  $V(\vec{r})$

$$\left(-\nabla^2 + \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r}) - k^2\right)\psi(\vec{r}) = 0 \quad (16.20)$$

Para el caso de un potencial central  $V(\vec{r}) = V(r)$  y podemos separar variables de manera de pasar a una ecuación radial porque tenemos bajo control la parte angular

$$\psi(\vec{r}) = \frac{u_{k,l}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (16.21)$$

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} - k^2\right)u_{k,l}(r) = 0 \quad (16.22)$$

Para un problema de dispersión, tiene sentido suponer que  $V(r) \approx 0$  para  $r \geq a$  y en ese caso se habla de un potencial de rango  $a$  finito.

Es decir que para  $r \geq a$  (que es la región donde analizaremos la dispersión) la partícula está libre de toda interacción y la solución es bien conocida:

$$\frac{u_{k,l}(r)}{r} = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr), \quad r \geq a \quad (16.23)$$

donde  $j_l$  y  $n_l$  son las funciones de Bessel esféricas, relacionadas con las funciones de Bessel (de primera especie)  $J_l$  y de Neumann (de segunda especie)  $N_l$  según las fórmulas

$$\begin{aligned}
j_l(x) &= \frac{\sqrt{\pi}}{2x} J_{l+1/2}(x) \\
n_l(x) &= \frac{\sqrt{\pi}}{2x} N_{l+1/2}(x)
\end{aligned} \tag{16.24}$$

En cuanto a  $A_l$  y  $B_l$ , son pares de constantes a determinar (para cada  $l$ ) puesto que se trata de una ecuación diferencial de segundo orden para cada  $l$ .

Para valores de  $r$  grandes, que corresponde a la región que nos interesa en un problema de dispersión, el comportamiento asintótico de las funciones de Bessel es tal que podemos poner como solución una solución que sea combinación de las funciones cilíndricas del problema libre

$$\frac{u_{k,l}(r)}{r} \approx A_l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - B_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} \tag{16.25}$$

pero si el problema fuera el de una partícula libre, las soluciones de funciones de Bessel esféricas valdría para todo  $r$  y no solo para  $r$  grande. En tal caso, deberíamos elegir  $B_l = 0$  pues  $n_l$  diverge en el origen. Cuán distinto de cero sea el término que contiene  $B_l$  da en tonces una medida de cuán intenso es el potencial y, por ende, de la dispersión que produce.

Si escribimos

$$B_l = -A_l \tan \delta_l \tag{16.26}$$

tendremos, sacando denominador comun coseno en la ecuación (16.25), en forma compacta

$$\frac{u_{k,l}(r)}{r} \approx C_l \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr} \tag{16.27}$$

donde  $C_l = A_l / \cos \delta_l$

Vemos entonces que el comportamiento asintótico de la onda parcial  $l$  es el mismo que el de una partícula libre pero con una fase corrida en  $\delta_l$ . Por ello se conoce a  $\delta_l$  como el **corrimiento de fase** producido por el potencial.

Si la onda incidente fuera una onda plana, digamos en la dirección del eje  $z$ , el correspondiente autovalor  $m$  del operador  $\hat{L}_z$  tiene que ser

cero. Y como  $\hat{L}_z$  es una constante de movimiento del sistema (conmuta con  $\hat{H}$ ), la onda dispersada tendrá también  $m = 0$  por lo que en (16.21)

$$\psi(\vec{r}) = \frac{u_{k,l}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

tendremos  $Y_{lm}(\theta, \varphi) \Rightarrow Y_{l0}(\theta, \varphi) = P_l(\cos \theta)$  de manera que  $\psi_k(r, \cos \theta)$  puede escribirse como

$$\psi_k(r, \cos \theta) \approx \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{u_{k,l}(r)}{r}, \quad (r \text{ grande}) \quad (16.28)$$

con  $u_{k,l}(r)$  la parte radial de la función de onda propuesta.

Resta ajustar los coeficientes de (16.28) de manera de cumplir la condición de contorno habitual que utilizamos previamente

$$\psi \approx \exp(ikz) + f_k(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (16.29)$$

Conviene ahora desarrollar la onda plana del primer término a la derecha en serie de funciones esféricas de Bessel,

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} d_l j_l(r) P_l(\cos \theta) \quad (16.30)$$

(No aparece  $\varphi$  pues hemos elegido el eje del haz incidente de manera que  $\vec{k} \cdot \vec{r} = kz = kr \cos \theta$ ).

Para determinar los coeficientes  $d_l$  multiplicamos la igualdad (16.30) por  $P'_l(\cos \theta)$  y usamos la ortogonalidad de los polinomios de Legendre,

$$\int_{-1}^1 P_l(u) P_{l'}(u) du = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (16.31)$$

Se tiene

$$\frac{2}{2l+1} d_l j_l(kr) = \int_{-1}^1 P_l(u) \exp(ikru) du \quad (16.32)$$

En este punto conviene utilizar una representación integral de la función de Bessel  $j_l$ :

$$j_l(kr) = \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^1 P_l(u) \exp(ikru) du \quad (16.33)$$

que nos permite deducir que

$$d_l = (2l + 1)i^l \quad (16.34)$$

de manera que finalmente tenemos una expresión de la onda plana también escrita en términos de los polinomios de Legendre,

$$\exp(ikz) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (16.35)$$

Insertando esta expresión en la fórmula (16.29)

$$\psi \approx \exp(ikz) + f_k(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r}$$

tenemos

$$\psi \approx \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) + f_k(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (16.36)$$

o, utilizando la forma asintótica para  $j_l(kr)$ ,

$$\psi \approx \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)i^l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} P_l(\cos \theta) + f_k(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (16.37)$$

Podemos comparar esta expresión con la dada por (16.28)

$$\psi_k(r, \cos \theta) \approx \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{u_{k,l}(r)}{r}, \quad (r \text{ grande})$$

cuando la parte radial  $u_{k,l}$  es reemplazada explícitamente por (16.27)

$$\frac{u_{k,l}(r)}{r} \approx C_l \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr} \quad (16.38)$$

e incluyendo la parte angular y la suma sobre  $l$  tenemos

$$\psi_k(r, \cos \theta) \approx \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr} \quad (16.39)$$



Igualando los coeficientes de  $\exp(-ikr)P_l(\cos(\theta))$  en los lados derechos de (16.37) y (16.39) obtenemos

$$-(2l+1)i^l = -\exp(-i\delta_l(k))a_l(k) \quad (16.40)$$

o

$$a_l(k) = (2l+1)i^l \exp(i\delta_l(k)) \quad (16.41)$$

Si ahora igualamos el coeficiente de  $\exp(ikr)$ ,

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos \theta) + f_k(\cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} \exp(2i\delta_l(k)) P_l(\cos \theta) \quad (16.42)$$

obtenemos una expresión explícita para  $f_k(\theta)$

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(i\delta_l(k)) \sin(\delta_l(k)) P_l(\cos \theta) \quad (16.43)$$

de manera que la sección eficaz diferencial toma la forma

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f_k(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) \exp(i\delta_l(k) - i\delta_{l'}(k)) \\ &\quad \sin(\delta_l(k)) \sin(\delta_{l'}(k)) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \end{aligned} \quad (16.44)$$

La integral sobre  $\Omega$  de esta sección eficaz diferencial da la sección eficaz total. Utilizando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre se obtiene finalmente:

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \int_{-1}^1 du \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l(k)) \quad (16.45)$$

Vemos que hemos obtenido una expresión muy simple para la sección eficaz de dispersión en términos de los corrimientos de fase,

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l(k)) \quad (16.46)$$

Si comparamos esta expresión con la ec. (16.43) que da  $f_k$ , se tiene la importante relación

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(k, \theta = 0) \quad (16.47)$$

Este resultado se conoce como el teorema óptico. Se llama así por la analogía con lo que sucede con la luz cuando atraviesa un medio. En efecto, cuando las ondas electromagnéticas inciden sobre un centro dispersor, la sección eficaz del mismo es proporcional a la parte imaginaria de la amplitud de dispersión de la onda. El cálculo que lleva a esta relación se hace a partir de la potencia total  $P$  absorbida por el centro dispersor (que a su vez se obtiene de los vectores de Poynting de las ondas incidente y dispersada)

$$P = \frac{2\pi}{kZ_0} \text{Im}(A_0^* \vec{\epsilon}_0 \cdot \vec{F}(\vec{k}' = \vec{k})) \quad (16.48)$$

donde  $\vec{k}$  y  $\vec{k}'$  son los vectores de onda de las ondas incidente y dispersada,  $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$ ,  $A_0$  es la amplitud de la onda incidente y  $\vec{F}$  es la amplitud de scattering de la onda dispersada.

Introduciendo una “amplitud de scattering” relativa a la amplitud de la onda incidente,

$$\vec{f}(\vec{k}, \vec{k}_0) = \frac{\vec{F}(\vec{k}, \vec{k}_0)}{A_0} \quad (16.49)$$

y siendo que la sección eficaz total  $\sigma$  es la potencia total dividido el flujo incidente,

$$\sigma = \frac{P}{|A_0|^2/2z_0} \quad (16.50)$$

se tiene finalmente

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(\vec{\epsilon}_0 \cdot \vec{f}(\vec{k}' = \vec{k})) \quad (16.51)$$

que da una expresión idéntica a (16.47) para el caso en que la dispersión corresponde a ondas electromagnéticas (Nótese que poner  $\vec{k}' = \vec{k}$  corresponde a haber puesto  $\theta = 0$  en (16.47)).

Debe notarse que en la aproximación de Born,

$$f_k(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(r) \exp(i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}') = f^*(\theta) \quad (16.52)$$

por lo que en esta aproximación se llega a una contradicción con el teorema óptico. En otras palabras, la aproximación de Born falla en cuanto a que no satisface el teorema óptico.

Podemos escribir a la sección eficaz total en la forma

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad (16.53)$$

de manera que, de acuerdo a (16.45), se tiene para cada sección eficaz parcial  $\sigma_l$ ,

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2(\delta_l(k)) \quad (16.54)$$

El valor máximo de la sección eficaz parcial es entonces

$$\sigma_l^{max} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (16.55)$$

# Clase 17

## Más sobre los corrimientos de fase

Continuaremos el estudio de dispersion de proyectiles por un potencial central utilizando el método de ondas parciales. Si definimos una coordenada  $\rho = kr$  (adimensional en unidades tales en que  $\hbar = c = 1$ ), la ecuación de Schrödinger radial para una partícula de masa  $m$  en un potencial central  $V(\rho)$  se escribe

$$\frac{d^2 u_{k,l}(\rho)}{d\rho^2} + \left(1 - \frac{V(\rho)}{E} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) u_{k,l}(\rho) = 0 \quad (17.1)$$

Si el potencial fuera nulo, la solución regular en el origen es la función de Bessel esférica,

$$u_{k,l}(\rho) = \rho j_l(\rho) \equiv f_l(\rho) \quad (17.2)$$

Si el potencial es no nulo tendremos en general una solución  $u_{k,l} \equiv F_l(\rho)$ .

Comparemos las ecuaciones correspondientes a los dos casos

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_l}{d\rho^2} + \left(1 - \frac{V(\rho)}{E} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) F_l &= 0 \\ \frac{d^2 f_l}{d\rho^2} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) f_l &= 0, \end{aligned} \quad (17.3)$$

multiplicando la primera por  $f_l$ , la segunda por  $F_l$  y restando, obtenemos

$$f_l F_l'' - F_l f_l'' = \frac{V}{E} f_l F_l \quad (17.4)$$

o

$$(f_l F_l' - F_l f_l')' = \frac{V}{E} f_l F_l \quad (17.5)$$

de manera que si integramos entre 0 e  $\infty$  ambos miembros, tendremos

$$(f'_l F_l - F'_l f_l)|_0^\infty = -\frac{1}{E} \int_0^\infty d\rho V(\rho) f_l(\rho) F_l(\rho) \quad (17.6)$$

Como  $j_l(\rho = 0) = 1$  y  $f_l(\rho) = \rho j_l(\rho)$  se tiene que  $f_l(0) = 0$ . Análogamente, dada la ecuación que obedece  $F_l(\rho)$ , debe tenerse  $F_l(0) = 0$  ya que, cerca del origen la ecuación se reduce a  $F''(\rho) = 1/\rho^2$  que se puede integrar con una solución que del tipo exponencial que se anula en el origen.

En cuanto al comportamiento en el infinito, recordemos la ec.(16.25) que daba la solución asintótica general de la ecuación para el caso con potencial en trminos de las funciones de Bessel esféricas

$$\frac{u_{k,l}(r)}{r} \approx A_l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - B_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (17.7)$$

Vimos que en el caso libre  $B_l$  deba ser cero por lo que tenemos

$$\begin{aligned} f_l &\approx \sin(\rho - l\pi/2) \\ F_l &\approx \sin(\rho - l\pi/2 + \delta_l) \end{aligned} \quad (17.8)$$

Utilizando estos comportamientos y la relación trigonométrica

$$\sin(\alpha - \beta) = \sin \alpha \cos \beta - \cos \alpha \sin \beta \quad (17.9)$$

puede verse que el lado izquierdo de (17.6) resulta ser  $\sin(\delta_l(k))$  por lo que se tiene

$$\sin(\delta_l(k)) = -\frac{1}{E} \int_0^\infty d\rho V(\rho) f_l(\rho) F_l(\rho) \quad (17.10)$$

o, volviendo a la variable  $r$ ,

$$\sin(\delta_l(k)) = -\frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr V(r) F_l(kr) j_l(kr) kr \quad (17.11)$$

Esta es una fórmula exacta que permite relacionar los corrimientos de fase que se pueden determinar experimentalmente a partir de la medida de una sección eficaz de dispersión con el potencial que produce tal dispersión. No es sin embargo una relación muy útil pues requiere el conocimiento de  $F_l$  que es la solución del problema de Schrödinger precisamente con el potencial. Lo que podemos preguntarnos es bajo

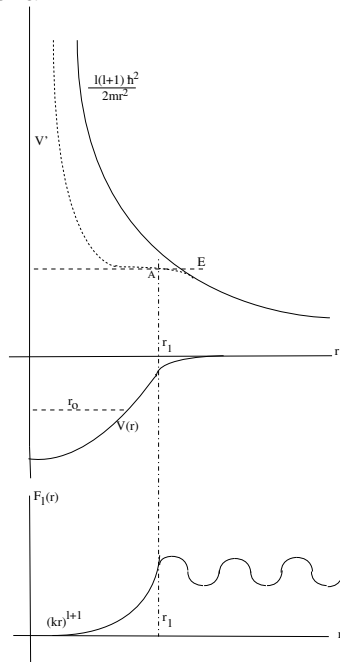
qué condiciones puede reemplazarse  $F_l$  por la solución del problema libre, de manera análoga a lo que se hace en la aproximación de Born.

Para analizar lo anterior consideremos un potencial atractivo  $V(r)$  como el de la figura siguiente. Llamaremos  $V'(r)$  al potencial efectivo que resulta de incluir el efecto de la barrera centrífuga:

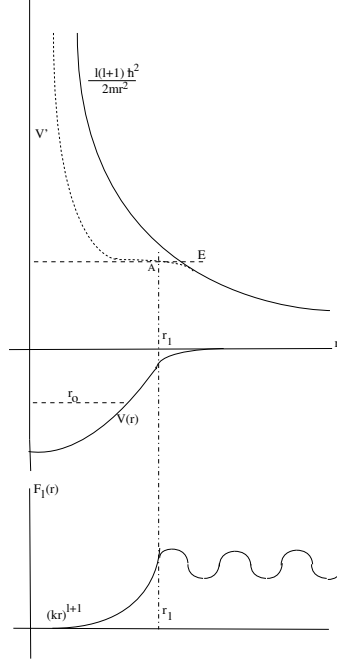
$$V'(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (17.12)$$

Llamamos  $E$  a la energía cinética de la partícula dispersada por este potencial (recordemos que en el experimento real, se trata del flujo de muchas, no una única partícula). Indicamos con la letra  $A$  al punto de retorno clásico con coordenada  $r_1$ , donde  $V' = E$ . En cuanto a  $r_0$ , es el rango del potencial.

Es importante notar que eligiendo  $l$  suficientemente grande, para una energía dada puede hacerse  $r_1$  tan grande como se quiera. Es decir, se puede alejar el punto de retorno tanto como se quiera hacia la derecha.



Para  $l$  grande observamos los siguientes hechos cualitativos acerca de  $F_l$ :



1. Para  $r > r_1$ ,  $V \approx 0$  y  $F_l(\rho)$  se comporta esencialmente como la solución de partícula libre  $f_l(\rho)$ .
2. Para  $r < r_1$ ,  $F_l(\rho)$  es de tipo exponencial (domina la barrera centrífuga) y se anula en el origen como  $(kr)^{l+1}$  así que  $F_l$  es pequeña en esta región. Si bien en esta zona el potencial es no nulo, cuando  $l \rightarrow \infty$  es la barrera centrífuga quien domina. O sea, la parte libre domina para grandes  $l$  por lo que tenemos

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \delta_l(k) = 0 \quad (17.13)$$

Es decir que las ondas parciales “altas” no son dispersadas.

Estudiemos ahora el punto de retorno clásico  $r_1$ , aquel en que vale

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V(r_1) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_1^2} \quad (17.14)$$

Cuando  $r_1$  es mucho más grande que el rango del potencial,  $r_1 \gg r_0$ ,  $V(r_1) \approx 0$  y a la energía solo contribuye la barrera centrífuga que es mucho menor cuando  $r_1 \gg r_0$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_1^2} \ll \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_0^2} \quad (17.15)$$

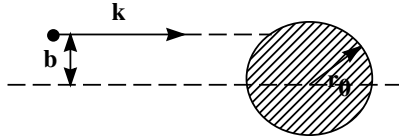
o lo que es lo mismo,

$$k^2 \ll \frac{l(l+1)}{r_0^2} \approx \frac{l^2}{r_0^2} \quad (17.16)$$

Es decir que en estas condiciones ( $r_1 \gg r_0$ ) vale que

$$l \gg kr_0 \quad (17.17)$$

Para comprender este resultado, consideremos una partícula clásica que incide sobre un centro dispersor como el de la figura, con un parámetro de impacto que llamaremos  $b$ .



El momento angular para la partícula que incide en la dirección  $z$  que siempre elegimos, a una distancia  $b$  en el eje  $y$  será

$$l_x = kb \quad (17.18)$$

Si  $r_0$  es el alcance del potencial, el máximo parámetro de impacto para la dispersión clásica de la partícula es precisamente  $r_0$ . De manera que, a  $k$  fijo, el máximo momento angular que resulta de (17.18) es  $l_{max} = kr_0$ , justamente la cota que aparece en la ecuación (17.17).

Clásicamente, para un momento angular  $l > l_{max}$  no puede haber dispersión. A nivel cuántico, hemos probado que cuando  $l \gg l_{max}$ ,  $\delta_l(k) \approx 0$ . Vemos que la evaluación de  $l_{max}$  nos permite estimar el número de ondas parciales que contribuyen a la sección eficaz (por tener  $\delta_l(k) \not\approx 0$ ). A muy baja energía  $E$  (o sea, a muy bajo  $k$ )  $l_{max}$  es pequeño



y muy pocas ondas contribuyen. Con  $k$  suficientemente pequeño, solo las ondas  $s$  ( $l = 0$ ) serán entonces dispersadas.

Volviendo a la fórmula (17.11)

$$\sin(\delta_l(k)) = -\frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr V(r) F_l(kr) j_l(kr) kr$$

que da el corrimiento de fase en términos del potencial, vemos que podemos poner, cuando  $l$  es suficientemente grande como para que la dispersión sea pequeña,  $F_l \approx kr j_l$ , el valor de la solución cuando no hay potencial

$$\sin(\delta_l(k)) \approx -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 dr V(r) j_l^2(kr) \quad (17.19)$$

Si bien la integral sobre  $r$  se extiende hasta  $r = \infty$ , la presencia de  $V(r)$  en el integrando corta efectivamente la integral en  $r \approx r_0$ . Podemos entonces usar la expresión de  $j_l(x)$  para  $x$  pequeño dada por (ver tablas de funciones de Bessel esféricas),

$$j_l(x) \approx \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad x \rightarrow 0 \quad (17.20)$$

de manera que (17.19) deviene

$$\sin(\delta_l(k)) \approx -\frac{2mk^{2l+1}}{(\hbar(2l+1)!!)^2} \int_0^{r_0} r^{2l+2} dr V(r) \quad (17.21)$$

Vemos que a bajas energías,  $\delta_l(k)$  se anula como  $k^{2l+1}$ . Es remarcable que aún a energía cero tenemos un resultado no nulo para el corrimiento de fase si  $l = 0$ :

$$\delta_0(k) \approx -ka \text{ si } k \rightarrow 0 \quad (17.22)$$

Si bien es cierto que hemos usado la fórmula (17.21) que dijimos es válida para  $l$  suficientemente grande para el caso en que  $l = 0$ , cuando  $k \approx 0$ ,  $l_{max}$  se hace muy pequeño. Hemos llamado  $a$  (conocida como longitud de dispersión) a

$$a = \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{r_0} V(r) r^2 dr \quad (17.23)$$

A la amplitud de dispersión  $f_k(\theta)$  sólo contribuirá  $\delta_0$  por lo que tendremos

$$f_k(\theta) \approx \frac{1}{k} \exp(i\delta_0(k)) \sin(\delta_0(k)) \approx -\frac{1}{k} \exp(-ika) \sin(ka) \quad (17.24)$$

La razón por la que  $f_k$  no depende de  $\theta$  es que  $P_0(\cos \theta) = 1$ . La dispersión es entonces isotrópica. Vemos que

$$\lim_{E \rightarrow 0} f_k(\cos \theta) = -a \quad (17.25)$$

Podemos ahora calcular la sección eficaz total,

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(ka) \quad (17.26)$$

Y el límite para  $E = \hbar k^2/2m$  yendo a cero es

$$\lim_{E \rightarrow 0} \sigma = 4\pi a^2 \quad (17.27)$$

que es la expresión de la sección eficaz que se obtiene en mecánica clásica cuando se analiza la dispersión por una esfera rígida de radio  $R = 2a$  (ver por ejemplo el problema 1 de la sección 18 del libro Mecánica de Landau y Lifshitz).

## Cálculo de corrimientos de fase en casos sencillos

**Ejemplo 1:** Un potencial del tipo “esfera rígida”

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > \rho_0 \\ \infty & \text{si } r \leq \rho_0 \end{cases} \quad (17.28)$$

puede ser analizado en mejor aproximación de la que aplicamos arriba.

Para  $r > \rho_0$  se tiene una solución radial que es el de partícula libre, con ambas funciones de Bessel esféricas presentes,

$$\frac{u_{k,l}(r)}{r} = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) = c_l (j_l(kr) \cos \delta_l(k) - n_l(kr) \sin \delta_l(k)) \quad (17.29)$$

Dentro de la esfera la función de onda debe anularse por lo que sobre la superficie debe valer

$$u_{k,l}(k\rho_0) = 0 = c_l (j_l(k\rho_0) \cos \delta_l(k) - n_l(k\rho_0) \sin \delta_l(k)) \quad (17.30)$$

o

$$\tan \delta_l(k) = \frac{j_l(k\rho_0)}{n_l(k\rho_0)} \quad (17.31)$$

Esta es la solución exacta al problema de calcular los corrimientos de fase. Veamos qué sucede para bajas energías y corto alcance (rango),  $k\rho_0 \ll 1$ . Para  $j_l$  y  $n_l$  usamos los comportamientos de las funciones esféricas a cortas distancias:

$$j_l(x) \approx \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(x) \approx -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \quad x \rightarrow 0 \quad (17.32)$$

donde

$$(2l-1)!! = \prod_{i=1}^l (2i-1) = 1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l-1)$$

Tenemos entonces

$$\tan \delta_l(k) = -\frac{(k\rho_0)^{2l+1}}{(2l+1)((2l-1)!!)^2} \quad (17.33)$$

que se puede probar es consistente con el resultado general (17.21)

$$\sin(\delta_l(k)) \approx -\frac{2mk^{2l+1}}{(\hbar(2l+1)!!)^2} \int_0^{r_0} r^{2l+2} dr V(r)$$

Para ondas  $s$  ( $l=0$ ) tenemos, de acuerdo a (17.31),

$$\tan \delta_0(k) \approx \delta_0(k) = -k\rho_0 \quad (17.34)$$

Recordemos nuestra definición de longitud de dispersión

$$a = \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{r_0} V(r) r^2 dr$$

que da una idea de cómo se ve el potencial cuando dispersa ondas de baja energía de manera de no poder determinar detalladamente al

potencial puesto que las longitudes de onda son muy grandes, Esto, junto con el resultado ya obtenido en general

$$\delta_0(k) \approx -ka \text{ si } k \rightarrow 0 \quad (17.35)$$

implica que  $a = \rho_0$ . La longitud de dispersión coincide entonces con el radio de la esfera.

Para altas energías, del resultado exacto podemos calcular la sección eficaz. En efecto, dado que

$$\sin^2 \delta_l(k) = \frac{j_l^2(ka)}{j_l^2(ka) + n_l^2(ka)} \quad (17.36)$$

Usando el comportamiento asintótico de  $j_l$  y  $n_l$  obtenemos

$$\sin^2 \delta_l(k) \approx \frac{\sin^2(ka - l\pi/2)}{\sin^2(ka - l\pi/2) + \cos^2(ka - l\pi/2)} = \sin^2(ka - l\pi/2) \quad (17.37)$$

con lo que la sección eficaz toma la forma

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{max}=ka} (2l+1) \sin^2(ka - l\pi/2), \quad \text{cuando } k \rightarrow \infty \quad (17.38)$$

**Ejemplo 2:** (*Un método práctico para calcular corrimientos de fase*)

El método que describiremos ahora parte de tomar un punto  $r = b$  fuera del alcance del potencial (i.e.,  $V(r) = 0$  para la zona exterior  $r \geq b$ ). En estas condiciones, la función de onda radial en la zona exterior es la que corresponde a una partícula libre (ver (17.29))

$$R_{l,k}(r) \equiv \frac{u_{k,l}(r)}{r} = c_l (j_l(kr) \cos \delta_l(k) - n_l(kr) \sin \delta_l(k)), \quad r \geq b \quad (17.39)$$

En la zona interior se trata de resolver la ecuación radial de Schrödinger de manera aproximada, analíticamente, numéricamente, etc. Supongamos haber obtenido tal solución  $R_{l,k}(r)$  para  $0 \leq r \leq b$ . Calculemos su derivada logarítmica en  $r = b$  definiendo

$$\beta_l(k) \equiv b \left( \frac{1}{R_{l,k}(r)} \frac{dR_{l,k}(r)}{dr} \right)_{r=b} \quad (17.40)$$

Podemos evaluar esta función  $\beta_l(k)$  en  $r = b$  usando la ecuación (17.39)

$$R_{l,k}(r) \equiv \frac{u_{k,l}(r)}{r} = c_l (j_l(kr) \cos \delta_l(k) - n_l(kr) \sin \delta_l(k)) , \quad r \geq b$$

Tendremos:

$$\beta_l(k) = kb \frac{j'_l(kb) \cos \delta_l(k) - n'_l(kb) \sin \delta_l(k)}{j_l(kb) \cos \delta_l(k) - n_l(kb) \sin \delta_l(k)} \quad (17.41)$$

De aquí, es fácil despejar los corrimientos de fase reemplazando los senos y cosenos por exponenciales con argumentos  $\exp(\pm i\delta_l)$

$$\exp(2i\delta_l(k)) = -\frac{j_l - in_l}{j_l + in_l} \left( 1 + kb \frac{\frac{j'_l + in'_l}{j_l + in_l} - \frac{j'_l - in'_l}{j_l - in_l}}{\beta_l - kb \frac{j'_l + in'_l}{j_l + in_l}} \right) \quad (17.42)$$

Hemos omitido en todos los casos indicar el argumento  $kb$  de las funciones de Bessel. Obviamente el lado derecho tiene que ser independiente del valor de  $b$  pues la elección de ese punto es arbitraria (siempre que corresponda a la región donde el potencial se anula).

Supongamos que la función de onda se anule en  $r = b$ . En tal caso, por ser una derivada logarítmica  $\beta_l$  se hace infinita y tendríamos dispersión por una esfera rígida de radio  $b$ , problema que ya resolvimos. Si llamamos  $\xi_l(k)$  al corrimiento de fase correspondiente a este problema, tenemos, poniendo  $\beta_l = \infty$  en (17.42),

$$\exp(2i\xi_l(k)) = -\frac{j_l - in_l}{j_l + in_l} \quad (17.43)$$

Usando este resultado para reemplazar el primer factor del lado derecho de la ec.(17.42) tendremos

$$\exp(2i\delta_l(k)) = \exp(2i\xi_l(k)) \left( 1 + kb \frac{\frac{j'_l + in'_l}{j_l + in_l} - \frac{j'_l - in'_l}{j_l - in_l}}{\beta_l - kb \frac{j'_l + in'_l}{j_l + in_l}} \right) \quad (17.44)$$

Salvo  $\beta_l$  el resto de cantidades son independientes de la forma específica del potencial. Definamos entonces

$$\Delta_l + iS_l = kb \frac{j'_l + in'_l}{j_l + in_l} , \quad \Delta_l - iS_l = kb \frac{j'_l - in'_l}{j_l - in_l} \quad (17.45)$$

Son cantidades que pueden ser calculadas de una vez para siempre  
Podemos entonces reescribir (17.44) en la forma

$$\exp(2i\delta_l(k) - 2i\xi_l(k)) = \frac{\beta_l(k) - \Delta_l + iS_l}{\beta_l(k) - \Delta_l - iS_l} \quad (17.46)$$

Para calcular la amplitud de dispersion a partir de (17.46) conviene utilizar la fórmula (16.43)

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(i\delta_l(k)) \sin(\delta_l(k)) P_l(\cos \theta) \quad (17.47)$$

Tendremos entonces, usando (17.46),

$$\exp(i\delta_l(k)) \sin \delta_l(k) = \exp(i\xi_l(k)) \sin \xi_l(k) + \exp(2i\xi_l(k)) \frac{S_l}{\beta_l - \Delta_l - iS_l} \quad (17.48)$$

Aplicaremos ahora este método al caso de un potencial de pozo “cuadrado” (las comillas recuerdan que estamos trabajando con la coordenada radial),

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > a \\ -V_0 & \text{si } r \leq a \end{cases} \quad (17.49)$$

Obviamente, conviene elegir el parámetro  $b$  (más allá del cual el potencial era prácticamente nulo) tal que satisfaga  $b = a$ , el punto a partir del cual en el potencial que estudiamos es efectivamente nulo. En el interior, la solución será una función de Bessel, la  $j_l$  (ya que la otra diverge en el origen):

$$R_{lk}(r) = \frac{u_{lk}(r)}{r} = j_l(\bar{k}r) \quad (17.50)$$

con

$$\bar{k} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (17.51)$$

Luego, la derivada logarítmica  $\beta_l$  toma el valor

$$\beta_l(k) = \bar{k}a \frac{j'_l(\bar{k}a)}{j_l(\bar{k}a)} \quad (17.52)$$

Consideremos más en detalle la onda  $l = 0$ . En tal caso tenemos

$$\beta_0(k) = \bar{k}a \cot \bar{k}a - 1 \quad (17.53)$$

En cuanto a las cantidades  $\xi_0(k)$ ,  $\Delta_0(k)$  y  $S_0(k)$ , pueden calcularse fácilmente a partir de (17.43)-(17.45),

$$\xi_0(k) = -ka, \quad \Delta_0(k) = -1, \quad S_0(k) = ka \quad (17.54)$$

Podemos entonces escribir la contribución de la onda  $s$  a la amplitud de dispersión como

$$\begin{aligned} f_k^{l=0} &= \frac{1}{k} \exp(i\delta_0(k)) \sin \delta_0(k) \\ &= \frac{\exp(-2ika)}{k} \left( \frac{k}{\bar{k} \cot \bar{k}a - ik} - \exp(-ika) \sin ka \right) \end{aligned} \quad (17.55)$$

Cuando  $k \rightarrow 0$ ,  $\bar{k} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \rightarrow \sqrt{2mV_0/\hbar^2} \equiv \bar{k}_0$  y obtenemos para  $\sigma$ , dominada por la onda  $s$ ,

$$\sigma = 4\pi a^2 \left( \frac{\tan \bar{k}_0 a}{\bar{k}_0 a} - 1 \right)^2 \quad (17.56)$$

vemos entonces que en este caso la longitud de dispersión está dada por  $-a \left( \tan \bar{k}_0 a / \bar{k}_0 a - 1 \right)$

## Propiedades analíticas

Hasta ahora hemos estudiado amplitudes de dispersión para energías del proyectil positivas ya que para energías negativas no pueden tener lugar procesos de dispersión. Fue así que estudiamos, por ejemplo, el “pozo esférico de potencial:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > a \\ -V_0 & \text{si } r \leq a \end{cases} \quad (17.57)$$

donde

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad \bar{k} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (17.58)$$

Formalmente, desde el punto de vista matemático, podemos estudiar, a partir de la ec.(17.55) la amplitud de dispersion para  $l = 0$

$$f^{l=0}(E) = \frac{\exp(-2ika)}{k} \left( \frac{k}{\bar{k} \cot \bar{k}a - ik} - \exp(-ika) \sin ka \right) \quad (17.59)$$

como una función analítica de  $E$  tomada como una variable compleja. En tal contexto conviene señalar que

1. Como  $E \propto \sqrt{k} = 0$ ,  $f^{l=0}(E)$  tiene un **punto de ramificación** como función de  $E$ . En efecto, si bien  $f^{l=0}(E)$  es analítica como función de  $k$  (en el primer término el denominador  $k$  se simplifica y en el segundo sin  $ka/k$  es finito para todo  $k$ ). Pero como función de  $E \propto \sqrt{k}$  existe un punto de ramificación ya que  $\sqrt{k}$  lo tiene.
2. Si hacemos una prolongación analítica de  $E$ , que era una variable real positiva al rango  $-V_0 \leq E \leq 0$  y escribimos

$$k = i\chi, \quad \chi = \sqrt{2m|E|}/\hbar, \quad \bar{k} = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}/\hbar$$

vemos que  $f^{l=0}(E)$  se hace infinita cuando

$$\bar{k} \cot \bar{k}a = ik \equiv -\chi \quad (17.60)$$

Cuando estudiamos el problema de estados ligados en un pozo cuadrado, encontramos justamente la condición (17.60). Recordemos brevemente lo que sucede en tal caso, simplemente considerando un potencial de profundidad  $-V_0$  teniendo en cuenta que aquí se trata de un caso en que la variable es  $r$  y no  $x$  de los problemas en una dimensión y la función de onda radial fue definida como  $R_{kl}/r$ .

Las soluciones tomaban la forma

$$R_{kl} = \begin{cases} A \sin \bar{k}r/r & \text{si } r < a \\ B \exp(-\chi r)/r & \text{si } r \geq a \end{cases} \quad (17.61)$$

y al igualar las derivadas logarítmicas en  $r = a$  al imponer condiciones de continuidad se obtiene la fórmula (17.60).

Luego, hemos comprobado que



**Los polos de  $f^{l=0}(E)$  en  $E = E_n$  coinciden con los estados ligados de onda  $s$ .**

Lo anterior vale en realidad para potenciales de corto alcance más generales y para  $l \neq 0$ .

3. **Resonancias:** Se observa en muchos casos que  $\delta_l(k)$  da un salto brusco de  $\pi$  para  $l = 1, 2, \dots$  en alguna región de valores de  $k$ . Esto no ocurre jamás para  $l = 0$ .

Por ejemplo, para  $l = 1$  en el ejemplo anterior se tiene que si  $\bar{k}a \approx 6$  entonces  $\delta_1$  cambia bruscamente en  $\pi$  en un rango muy pequeño de energías. Como la sección eficaz total puede escribirse como

$$\sigma = \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

el seno cuadrado sube y baja muy rápidamente dando lugar a un pico muy pronunciado en  $\sigma_l$ .

De la fórmula (17.46)

$$\exp(2i\delta_l(k) - 2i\xi_l(k)) = \frac{\beta_l(k) - \Delta_l + iS_l}{\beta_l(k) - \Delta_l - iS_l} \quad (17.62)$$

vemos que una variación brusca en  $\delta_l$  puede deberse únicamente a una variación brusca en  $\beta_l(k)$  ya que el resto de funciones que aparecen en la fórmula obtenida ( $\xi_l, \Delta_l, S_l$ ) son conocidas y puede verse que son suaves como función de  $k$ .

En las figuras siguientes se representan los desfases y secciones eficaces parciales para  $l = 0, 1$ .

Dado que la fórmula que da a la sección eficaz depende de  $\sin^2(\delta_l)$ ,

$$\sigma = \sum_l \sigma_l, \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2(\delta_l(k)) \quad (17.63)$$

los desfases solo se determinan a menos de un múltiplo de  $\pi$ . Por ello, al afirmar que para  $k \rightarrow 0$   $\delta_l(k) \propto \lim_{k \rightarrow 0} k^{2l+1}$  hay que tener en cuenta esa indefinición en un múltiplo entero de  $\pi$ . Puede

verse que

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow 0} \delta_0(k) &= s\pi & k_0 a &\equiv \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} a \neq \pi/2 \\ & & s &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (17.64)$$

$$\lim_{k \rightarrow 0} \delta_0(k) = \frac{1}{2}(2s+1)\pi \quad k_0 a = \pi/2$$

donde

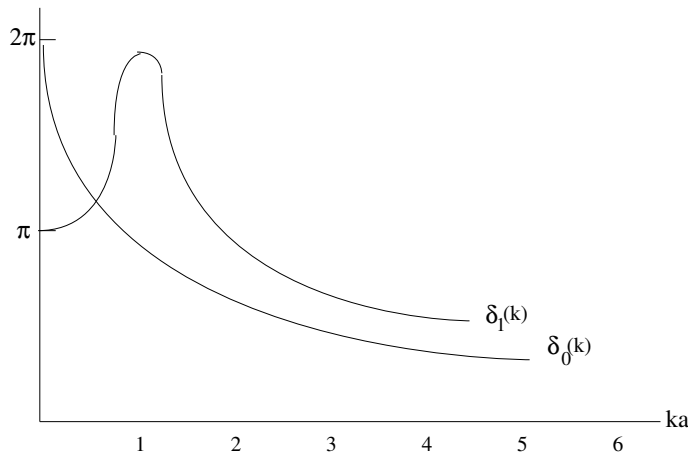
$$k_0 = \lim_{k \rightarrow 0} \bar{k}, \quad \bar{k} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - |E(k)|)} \quad (17.65)$$

Para grandes  $k$  (grandes energías)  $\delta_0(k)$  tiende a cero según

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \delta_0(k) \rightarrow \frac{k_0^2 a}{k} \quad (17.66)$$

Si se quiere que  $\delta_0(k)$  sea una función continua de  $k$ , en el origen tenderá al múltiplo más cercano debajo de  $k_0 a$ . Solo si  $k_0 a$  es un múltiplo de  $\pi/2$   $\delta_0$  tenderá a  $k_0 a$ .

En la figura de los desfases se los ha normalizado de manera que tiendan a 0 cuando la energía  $E \rightarrow \infty$  de manera continua y se ha elegido el radio  $a$  de manera que  $k_0 = \sqrt{2mV_0^2/\hbar^2} a = 6.2$ .



Aproximemos entonces la variación brusca de  $\beta$  ( que corresponde a la derivada logarítmica de la función de onda interior) según

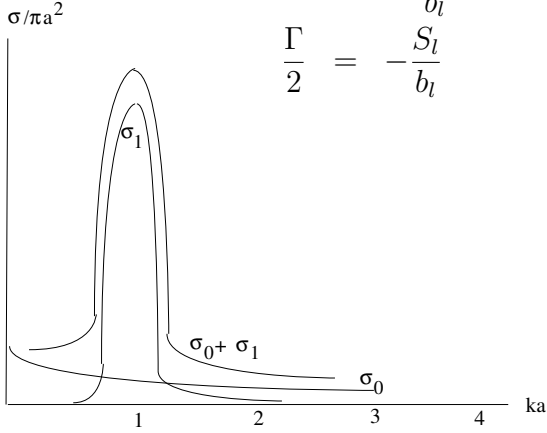
$$\beta_l \approx c_l + b_l E, \quad b_l \gg 1 \quad (17.67)$$

donde la condición sobre  $b_l$  da cuenta del cambio brusco requerido.

Si escribimos

$$\exp(2i(\delta_l - \xi_l)) = \frac{E - E_0 - i\Gamma/2}{E - E_0 + i\Gamma/2} \quad (17.68)$$

donde

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\Delta_l - c_l}{b_l} \\ \frac{\Gamma}{2} &= -\frac{S_l}{b_l} \end{aligned} \quad (17.69)$$


vemos que para grandes  $b$ ,  $\Gamma$  es pequeño, tanto más cuanto más violento sea el salto en  $\pi$  de  $\delta_l$ .

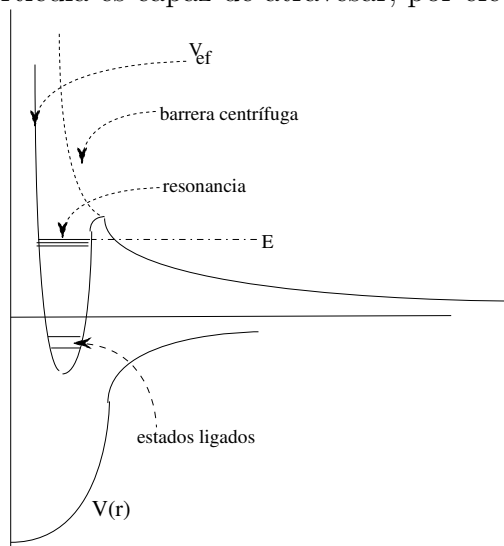
Luego de un poco de álgebra, se puede escribir  $f_l$  en términos de  $E_0$  y  $\Gamma$ . Luego, usando el teorema óptico que establece que  $\sigma_l = (4\pi/k)\text{Im}f_l(0)$  se obtiene:

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \frac{\Gamma^2}{4(E - E_0) + \Gamma^2} \quad (17.70)$$

Esta es la fórmula de Breit-Wigner. Se ve que el pico en la sección eficaz se produce en  $E \approx E_0$  tanto más cuanto  $\Gamma$  sea más pequeño. Justamente el ancho del pico es  $\Gamma$ . Si bien no se trata de un polo, es casi un polo de la sección eficaz, casi un estado ligado.

Se dice que tal estado, que no es exactamente un polo, es una resonancia.

El fenómeno tiene la interpretación siguiente: dado un potencial atractivo de corto alcance, existe además una barrera centrífuga de largo alcance, repulsiva (cuando  $l \neq 0$ ). Para valores de energía positiva, la partícula es capaz de atravesar, por efecto túnel, la barrera.



En la figura, la partícula de energía  $E$  viaja de derecha a izquierda. Queda atrapada en el pozo un tiempo relativamente largo  $\tau$  para luego escapar. Podemos pensar a  $\tau$  como la vida media del estado metaestable que se genera cuando la partícula queda atrapada. Puede demostrarse que  $\tau \sim 1/\Gamma$ , cuanto más pequeño es el ancho mayor es la vida media del estado. En el límite de  $\Gamma \rightarrow 0$  se tiene que  $\tau \rightarrow \infty$  y se trata de un verdadero estado ligado.



# Clase 18

## Segunda Cuantificación

El formalismo de la segunda cuantificación se desarrolló a partir de un trabajo de Dirac en 1927<sup>34</sup> en el que se plantea una teoría cuántica de la absorción y emisión de radiación, que marca el nacimiento de la teoría cuántica de campos. Por su lado Pascual Jordan, en el mismo año extendió la propuesta de Dirac al caso de partículas masivas (fermiones)<sup>35</sup> y en poco tiempo el método se volvió una manera alternativa muy popular de describir sistemas cuánticos de partículas idénticas.

Pero además, y allí reside su interés básico, esta “segunda cuantificación” permite analizar los casos en que las partículas pueden transformarse unas en otras o sea que es posible la creación de partículas o su aniquilación. En un sentido amplio constituye el puente de unión entre la mecánica cuántica que describe los fenómenos en términos de partículas y la teoría cuántica de campos que lo hace en términos de campos.

Un aspecto fundamental del método es entonces que trata sistemas cuánticos (relativistas y no relativistas) en los que el número de partículas no es una constante (de movimiento). Eso lleva a la necesidad de que los coeficientes de los desarrollos de funciones de onda en términos de autofunciones que habitualmente se utilizan en mecánica cuántica ya no sean meros números complejos sino que adquieren el carácter de ope-

---

<sup>34</sup>P.A.M. Dirac, *The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation*, Proceedings of the Royal Society of London **A 114** (1927) 243.

<sup>35</sup>P. Jordan, *Über eine neue Begründung der Quantenmechanik II*, Zeitschr. für Physik 41, (1927) 797; *Zur Quantenmechanik der Gasentartung*, Zeitschr. für Physik 44, (1927) 473

radores de creación o destrucción de partículas. Este procedimiento es interpretado como una **segunda cuantificación**, considerando como “primera” a la que llevó a describir la dinámica de los sistemas cuánticos a través de funciones de onda.

Como señalamos arriba, este método se fue desarrollando a partir de 1927 con contribuciones de Dirac, P. Jordan, O. Klein [18], W. Pauli [19] y E. Wigner [20]. En particular, basándose en trabajos de L. Landau y R. Peierls [21], V. Fock [3] generalizó el método al caso relativista.

Dijo Pauli a Klein en 1949 hablando de este método: “La segunda cuantificación es el pecado al cuadrado” (Hay quienes le atribuyen la frase a Einstein), refiriéndose que el primero había sido la mecánica cuántica de Schrödinger y Heisenberg.

## Bosones

Vamos a comenzar por estudiar un sistema formado por  $N$  bosones idénticos. Recordemos para comenzar la manera en que describíamos las funciones de onda de sistemas de bosones idénticos.

Llamaremos  $|\lambda_n\rangle$  al vector de estado que describe una de las partículas en el “estado”  $\lambda_n$  (es decir, con el conjunto de números cuánticos representados por  $\lambda_n$ ). En la representación de coordenadas a este estado le corresponderá una función de onda  $\varphi_n(\vec{r})$ ,

$$\varphi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \lambda_n \rangle \quad (18.1)$$

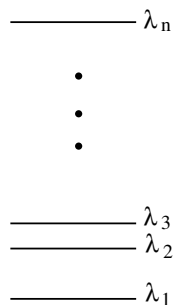
donde  $\vec{r}$  es el vector posición de la partícula. Como siempre tomaremos a los kets normalizados:

$$\langle \lambda_n | \lambda_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad (18.2)$$

de manera que también lo estarán las funciones de onda:

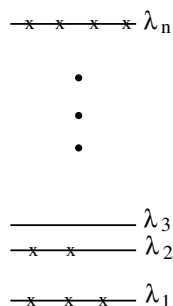
$$\delta_{nn'} = \int d^3r \langle \lambda_n | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \lambda_{n'} \rangle = \int d^3r \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_{n'}(\vec{r}) \quad (18.3)$$

Representemos a los estados según el esquema siguiente:



Las líneas horizontales no representan solamente niveles de energía sino, como ya señalamos, un dado conjunto de números cuánticos que llamamos  $\lambda_n$  que incluye, entre otros a la energía y que caracterizan de manera completa a los estados en los que se puede encontrar a cada partícula del sistema. Tratándose de bosones, varias de ellas pueden ocupar el mismo estado.

Como ejemplo, un posible estado del sistema puede ser entonces el siguiente



Hemos indicado con cruces a cada una de las partículas que ocupan diferentes estados. En el caso de la figura tenemos entonces 3 partículas en el estado  $\lambda_1$ , 2 en el estado  $\lambda_2$ , ninguna en el estado  $\lambda_3$ , etc. En el estado  $\lambda_n$  hay 4 partículas.

Si llamamos  $n_i$  al número de ocupación correspondiente a  $\lambda_i$ , es decir, al número de partículas que ocupan el estado  $\lambda_i$ , tenemos para el caso representado arriba

$$n_1 = 3, \quad n_2 = 2, \quad n_3 = 0, \quad \dots \quad n_n = 4, \quad \dots \quad (18.4)$$



con

$$\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N \quad (18.5)$$

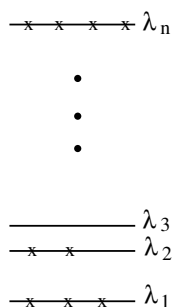
con  $N$  el número total de partículas que forman el sistema.

Conocidos el conjunto de estados  $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_i, \dots\}$ , basta indicar cuántas partículas se encuentran en cada  $\lambda_k$  para especificar el estado del sistema como un todo. O sea, puedo describir al estado dando el conjunto de números de ocupación  $n_i$  que corresponden a las partículas que están en el estado caracterizado por los números cuánticos  $\lambda_i$ :

$$\{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\} \quad (18.6)$$

No se especifica cuál partícula ocupa un dado  $\lambda_i$  pues, tratándose de partículas idénticas, esto no interesa a nivel cuántico (debe recordarse que por tratarse de bosones se requiere la simetrización de la función de onda).

**No hay que confundir el subíndice  $i$  del número de partículas en cada estado con el de los autovalores que llamamos  $\lambda_i$**  Para entender esto, repitamos la figura anterior el siguiente



vemos que en el estado con conjunto de autovalores  $\lambda_1$  has  $n = 3$  partículas, en el del conjunto  $\lambda_2$  hay  $n = 2$ , en el del conjunto  $\lambda_3$  no hay ninguna,  $n = 0$ .

En la aproximación de partícula independiente, que corresponde a una primera etapa del método en la que no se tienen en cuenta posibles interacciones entre las partículas, se escribe en un primer paso a la función de onda del sistema como un producto de las funciones de

onda de cada partícula:

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_{n_1, n_2, \dots, n_k}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_k, \dots \vec{x}_N) &= \varphi_{\lambda_1}(\vec{x}_1) \varphi_{\lambda_2}(\vec{x}_2) \dots \varphi_{\lambda_k}(\vec{x}_k) \dots \\ &= \langle \vec{x}_1 | \lambda_1 \rangle \langle \vec{x}_2 | \lambda_2 \rangle \dots \langle \vec{x}_k | \lambda_k \rangle \dots\end{aligned}\quad (18.7)$$

Para especificar de manera compacta cuántas partículas están en cada estado  $|\lambda_i\rangle$  escribiremos, en la representación de coordenadas

$$\tilde{\Phi}_{n_1, n_2, \dots, n_k}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots \vec{x}_N) = \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N | n_1 n_2 \dots n_k \dots \rangle \quad (18.8)$$

que implica que hay  $n_1$  partículas en el estado  $|\lambda\rangle$ ,  $n_2$  partículas en otro de los estados  $|\lambda\rangle$  y así siguiendo. Si ahora simetrizamos y normalizamos adecuadamente, tendremos para la función de onda del sistema de  $N$  bosones:

$$\begin{aligned}\Phi_{n_1, n_2, \dots, n_k}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots \vec{x}_N) &= \mathcal{N} \sum_{\mathcal{P}} \tilde{\Phi}_{n_1, n_2, \dots, n_k}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots \vec{x}_N) \\ &= \mathcal{N} \sum_{\mathcal{P}} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N | n_1 n_2 \dots \rangle\end{aligned}\quad (18.9)$$

donde  $\mathcal{P}$  indica que debe sumarse sobre todas las posibles permutaciones y el factor de normalización  $\mathcal{N}$  surge de contar el número de permutaciones de  $N$  partículas de las cuales  $n_1$  están en uno de los estados  $\lambda_1$ ,  $n_2$  en otro de los estados  $\lambda_2$ , etc. Si todas estuvieran en estados diferentes el número sería  $N!$ . Pero si un estado  $\lambda$  está ocupado  $n_i$  veces la suma incluye las permutaciones que intercambian partículas en ese estado y entonces hay que dividir por cada uno de los  $n_i!$ . La normalización resulta entonces

$$\mathcal{N}^2 = \frac{1}{N! n_1! n_2! \dots} \quad (18.10)$$

El espacio de Hilbert de estados de  $N$  partículas estará generado en este caso por los kets

$$|n_1 n_2 \dots n_k \dots\rangle \quad \text{con} \quad \sum_{i=1}^{\infty} n_i = N \quad (18.11)$$

Estos kets forman una base del espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_N$ . La relación de clausura de tal base se escribe como

$$\sum_{\{n_i\}} |n_1 n_2 \dots n_k \dots\rangle \langle n_1 n_2 \dots n_k \dots| = I \quad (18.12)$$

Con  $\{n_i\}$  indicamos todas las posibles secuencias. En cuanto a la ortogonalidad, tendremos

$$\langle n'_1 n'_2 \dots n'_k \dots | n_1 n_2 \dots n_k \dots \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_k n_k} \dots \quad (18.13)$$

$\mathcal{H}_N$  es un espacio de Hilbert con un número definido ( $N$  en este caso) de partículas. A partir de él podemos construir un espacio “más grande” como suma directa de espacios en que  $N = 0, 1, \dots$ . Este espacio, que no tiene un número definido de partículas se llama **espacio de Fock** y lo denotaremos como  $\mathcal{H}_F$ :

$$\mathcal{H}_F = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_N \dots \quad (18.14)$$

Sea  $|\psi\rangle$  un vector de tal espacio. Para especificarlo debemos decir cuál es su componente en el subespacio  $\mathcal{H}_0$ , cuál en  $\mathcal{H}_1$ , etc. Podemos representar entonces a  $|\psi\rangle$  de la siguiente manera

$$\langle |\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle 0|\psi\rangle \\ \langle \vec{x}_1; 1|\psi\rangle \\ \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2; 2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N; N|\psi\rangle \end{pmatrix} \quad (18.15)$$

Esta es una manera muy útil de visualizar a los vectores del espacio de Fock.

## Operadores de creación y aniquilación

Sea un operador  $\hat{a}_i$  que produce el siguiente efecto sobre un estado de  $N$  partículas del subespacio  $\mathcal{H}_N$ :

$$\hat{a}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle \quad (18.16)$$

El estado de la derecha corresponde al subespacio  $\mathcal{H}_{N-1}$ . En él hay una partícula menos en el estado  $\lambda_i$ . El operador  $\hat{a}_i$  destruye una partícula en el estado  $\lambda_i$ . Se lo llama por ello operador de aniquilación o de destrucción. En cuanto a  $\sqrt{n_i}$  es un factor que, como veremos más adelante, resultará conveniente.

El orden en que se realicen dos operaciones de aniquilación que correspondan a **dos  $\lambda$ 's diferentes carece de importancia**. Esto se puede expresar a través de la siguiente relación de conmutación

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad \forall i, j \quad (18.17)$$

Para definir el operador adjunto de  $\hat{a}_i$  calculemos el elemento de matriz  $\langle n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots | \hat{a}_i | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle$ . Podemos escribir

$$\begin{aligned} \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots | \hat{a}_i | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle &= \sqrt{n_i} \langle n'_1 n'_2 \dots | n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots \rangle \\ &= \sqrt{n_i} \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_i n_i - 1} \dots \\ &= \sqrt{n'_i + 1} \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_i + 1 n_i} \dots \end{aligned} \quad (18.18)$$

Queremos interpretar al  $\hat{a}_i$  actuando sobre el bra  $\langle n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots |$  por lo que escribimos en la última línea del lado derecho de la ecuación anterior introduciendo paréntesis para remarcar esto

$$\left( \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots | \hat{a}_i \right) | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle = \sqrt{n'_i + 1} \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_i + 1 n_i} \dots$$

y ahora reemplazamos el conjunto de deltas de Kronecker por un bracket

$$\left( \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots | \hat{a}_i \right) | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle = \sqrt{n'_i + 1} \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i + 1 \dots | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle \quad (18.19)$$

que nos permite identificar

$$\langle n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots | \hat{a}_i = \sqrt{n'_i + 1} \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i + 1 \dots | \quad (18.20)$$

Tomando el adjunto de la expresión anterior vemos que podemos definir la acción de  $\hat{a}_i^\dagger$  sobre un ket como

$$\hat{a}_i^\dagger | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle = \sqrt{n_i + 1} | n_1 n_2 \dots n_i + 1 \dots \rangle \quad (18.21)$$

O sea que  $\hat{a}_i^\dagger$ , el operador adjunto de  $\hat{a}_i$ , es un operador de creación de una partícula en el estado  $\lambda_i$ . Es fácil convencerse que también los operadores de creación conmutan:

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \quad (18.22)$$

Para completar el álgebra de estos operadores, falta analizar cuánto vale el conmutador de  $\hat{a}_i$  con  $\hat{a}_j^\dagger$ . Consideremos primero el caso en que  $i \neq j$ :

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger |n_1 n_2 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle &= \sqrt{n_i} \sqrt{n_j + 1} |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots n_j + 1 \dots\rangle \\ \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle &= \sqrt{n_j + 1} \sqrt{n_i} |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots n_j + 1 \dots\rangle \end{aligned} \quad (18.23)$$

Vemos entonces que

$$[a_i, a_j^\dagger] = 0 \quad \text{si } i \neq j \quad (18.24)$$

¿Qué sucede cuando  $i = j$  ? Recordando que

$$\begin{aligned} \hat{a}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle \\ \hat{a}_i^\dagger |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1 n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle \end{aligned}$$

vemos que

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |n_1 n_2 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle &= (n_i + 1) |n_1 n_2 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle \\ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle &= n_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots n_j \dots\rangle \end{aligned} \quad (18.25)$$

de manera que

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] = 1 \quad (18.26)$$

y, reuniendo (18.24) y (18.26), escribiremos

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (18.27)$$

Las **regla de conmutación básica** para operadores de creación y aniquilación bosónicos son entonces:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0; \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (18.28)$$

Un operador importante que se puede construir a partir de  $\hat{a}_i$  y  $\hat{a}_i^\dagger$  es el operador hermítico  $\hat{N}$  definido como

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i \equiv \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (18.29)$$

Este operador “cuenta” el número de partículas del sistema. En efecto, si lo aplicamos a un dado ket tenemos

$$\begin{aligned} \hat{N}|n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= \sum_i \hat{n}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle \\ &= \sum_i n_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle \\ &= N |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle \end{aligned} \quad (18.30)$$

Es decir que el ket  $|n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle$  que describe un dado estado de un sistema de  $N$  bosones es autofunción del operador  $\hat{N}$  con autovalor  $N$ . A este operador se lo llama “número de partículas”.

Es necesario incluir entre los posibles kets del espacio de Fock que describen estados de un sistema aquel que corresponde a la ausencia de partículas y que corresponde al subespacio  $\mathcal{H}_0$  de  $\mathcal{H}_F$ . A tal estado se lo conoce como “estado de vacío” y se lo anota así:

$$|0\rangle = |00 \dots 0 \dots\rangle \quad (18.31)$$

Queda caracterizado a partir de la acción de los operadores de aniquilación:

$$\hat{a}_i |0\rangle = \hat{a}_i |00 \dots 0 \dots\rangle = 0, \quad \forall i \quad (18.32)$$

Aplicando un operador de creación sobre este estado de vacío, se obtiene un ket que describe el estado de una partícula. En efecto, por definición, el ket

$$\hat{a}_j^\dagger |0\rangle = |00 \dots 010 \dots 0\rangle \quad (18.33)$$

corresponde a un estado del subespacio  $\mathcal{H}_1$  de  $\mathcal{H}_F$ , es decir, es un estado de una partícula en el estado  $\lambda_j$  (ya que el operador de creación tenía índice  $j$ ).

En general, un estado de  $N$  partículas puede escribirse siempre a partir del estado de vacío por aplicación de un número adecuado de

operadores de creación incluyendo una normalización apropiada se tiene

$$|n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = \dots \frac{1}{\sqrt{n_i!}} \dots \frac{1}{\sqrt{n_2!}} \frac{1}{\sqrt{n_1!}} \dots (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} \dots (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} |0\rangle \quad (18.34)$$

Tomemos como ejemplo un estado de dos partículas, una en el estado  $\lambda_1$ , otra en el estado  $\lambda_2$ . Podemos escribir

$$|n_1 = 1, n_2 = 1\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle \quad (18.35)$$

o, dado que los operadores de creación conmutan entre sí:

$$|n_1 = 1, n_2 = 1\rangle = a_2^\dagger a_1^\dagger |0\rangle \quad (18.36)$$

De esta manera, podemos escribir a este estado de dos partículas de manera simétrica

$$|11\rangle = \frac{1}{2} (a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle + a_2^\dagger a_1^\dagger |0\rangle) \quad (18.37)$$

Es evidente que la función de onda construida a partir de este ket será simétrica, como corresponde a un sistema de bosones. Y ello sin necesidad de imponerlo *manu militari*. Es el hecho de que las relaciones básicas entre operadores bosónicos sean de conmutación el que garantiza la simetría. Veremos que en el caso de fermiones, las relaciones entre operadores de creación y aniquilación corresponderán a condiciones de anticonmutación y, con ello, las funciones de onda resultarán antisimétricas.

## Clase 19

Definimos en la clase pasada operadores de destrucción  $\hat{a}_i$  y de creación  $\hat{a}_i^\dagger$  que actúan sobre los kets que representan los estados de un sistema de  $N$  bosones idénticos caracterizados por el conjunto de números cuánticos  $\lambda_i$ ,

$$\begin{aligned}\hat{a}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle \\ \hat{a}_i^\dagger |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1 n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle\end{aligned}$$

Estos operadores satisfacen las relaciones de conmutación:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0; \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

Consideremos ahora las siguientes combinaciones lineales de operadores de creación y aniquilación:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\vec{x}) &= \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \hat{a}_i \\ \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) &= \sum_i \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle \hat{a}_i^\dagger\end{aligned}\tag{19.1}$$

que podríamos también anotar de manera más sugerente así

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\vec{x}) &= \sum_i \hat{a}_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle = \sum_i \hat{a}_i \varphi_{\lambda_i}(x) \\ \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) &= \sum_i \hat{a}_i^\dagger \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \varphi_{\lambda_i}^*(x)\end{aligned}\tag{19.2}$$

De esta manera queda claro lo que adelantamos al comenzar el tema de “segunda cuantificación”: construimos operadores dependientes de



las coordenadas,  $\hat{\psi}(\vec{x})$  y  $\hat{\psi}^\dagger(\vec{x})$ , en términos de un desarrollo cuyos coeficientes son operadores, utilizando una dada base de autofunciones  $\{\varphi_{\lambda_i}(x)\}$ .

Por simplicidad notacional de ahora en más no indicaremos con el “sombrero” el hecho de  $\hat{\psi}$  y  $\hat{\psi}^\dagger$  son operadores dependientes de las coordenadas, no funciones de onda en el sentido de la mecánica cuántica de Schrödinger.

Como base para este desarrollo aparecen funciones de onda de partícula independiente. Los operadores  $\hat{a}_i$  y  $\hat{a}_i^\dagger$  actúan sobre vectores del espacio de Fock  $\mathcal{H}_F$  por lo que también sobre ese espacio es que él actúan  $\psi$  y  $\psi^\dagger$ .

Dadas las reglas de conmutación de  $a_i$  y  $a_j^\dagger$  establecidas en la ec.(18.28),

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0; \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

podemos calcular fácilmente los conmutadores de  $\psi(\vec{x})$  y  $\psi^\dagger(\vec{y})$ . Se tiene, por un lado

$$[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{y})] = [\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})] = 0 \quad (19.3)$$

El conmutador entre  $\psi(\vec{x})$  y  $\psi^\dagger(\vec{y})$  da en cambio un resultado no trivial:

$$\begin{aligned} [\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})] &= \sum_{ij} \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \langle \lambda_j | \vec{y} \rangle [a_i, a_j^\dagger] = \sum_{ij} \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \langle \lambda_j | \vec{y} \rangle \delta_{ij} \\ &= \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \langle \lambda_i | \vec{y} \rangle = \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \end{aligned} \quad (19.4)$$

O sea que (19.3) se completa con la tercera regla de conmutación básica

$$[\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})] = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \quad (19.5)$$

que es evidentemente independiente de la base  $\{|\lambda_i\rangle\}$  utilizada en los desarrollos de la ec.(19.1). Muchas veces conviene tomar como base una de ondas planas,

$$\langle \vec{x} | \lambda_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{x}) \quad (19.6)$$

Es fácil ver que, independientemente de la base elegida se tiene que

$$\begin{aligned} \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{x}) &= \sum_{ij} \int d^3x \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \lambda_j \rangle a_i^\dagger a_j = \sum_{ij} \langle \lambda_i | \lambda_j \rangle a_i^\dagger a_j \\ &= \sum_i a_i^\dagger a_i = \hat{N} \end{aligned} \quad (19.7)$$

Podemos entonces interpretar a  $\psi^\dagger(\vec{x})\psi(\vec{x})$  como un operador densidad de partículas de la misma forma que lo hacíamos con el módulo cuadrado de la función de onda de una partícula en la “primera cuantificación”. Pero debemos insistir en que en esta “segunda cuantificación” lo que antes eran funciones de onda ahora son operadores.

Calculemos el conmutador de  $\hat{N}$  con  $\psi^\dagger(\vec{x})$ :

$$[\hat{N}, \psi^\dagger(\vec{x})] = \int d^3y [\psi^\dagger(\vec{y})\psi(\vec{y}), \psi^\dagger(\vec{x})] = \int d^3y \psi^\dagger(\vec{y})\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) = \psi^\dagger(\vec{x}) \quad (19.8)$$

Este resultado nos permitirá una interpretación clara de  $\psi^\dagger(\vec{x})$ . En efecto, consideremos la acción del operador  $\psi^\dagger(\vec{x})$  sobre el vacío del espacio de Fock:

$$\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle = \sum_i \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle a_i^\dagger |0\rangle = \sum_i \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle |00 \dots 0 (n_i = 1) 0 \dots\rangle \quad (19.9)$$

Si calculamos la acción de  $\hat{N}$  sobre este objeto tendremos:

$$\hat{N}(\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle) = (\hat{N}\psi^\dagger(\vec{x}) - \psi^\dagger(\vec{x})\hat{N})|0\rangle = [\hat{N}, \psi^\dagger(\vec{x})]|0\rangle \quad (19.10)$$

El término que aparece restando y que hemos agregado en el paréntesis es idénticamente nulo dado que  $\hat{N}|0\rangle = 0$ . Usando (19.8),

$$\hat{N}(\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle) = (\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle) \quad (19.11)$$

O sea que el operador  $\hat{N}$  tiene a  $\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle$  como autofunción, con autovalor 1. Podemos entonces interpretar a  $\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle$  como un estado de una partícula, localizada en el punto  $\vec{x}$ .

Podemos aclarar esta interpretación observando que la suma  $i$  sobre estados “borró” la especificación de los números cuánticos del estado  $|\lambda_i\rangle$  en que  $a_i^\dagger$  creaba una partícula y en lugar de eso, en  $\psi^\dagger(\vec{x})$  aparece ahora el punto  $\vec{x}$ . Esto se puede entender visualizar escribiendo explícitamente el desarrollo en (19.9) explícitamente

$$\begin{aligned}
\psi^\dagger(\vec{x})|0\rangle &= \sum_i \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle a_i^\dagger |0\rangle = \varphi_{\lambda_1}^*(\vec{x}) |n_1 = 1 \ 00 \dots 0\rangle + \\
&\quad \varphi_{\lambda_2}^*(\vec{x}) |0 \ (n_2 = 1) 0 \dots 0\rangle + \\
&\quad \cdot \\
&\quad \cdot \\
&\quad \cdot \\
&\quad \varphi_{\lambda_k}^*(\vec{x}) |00 \dots 0 \ (n_k = 1)\rangle
\end{aligned} \tag{19.12}$$

Consideremos ahora el siguiente elemento de matriz adecuadamente simetrizado en el que separaremos una de las funciones de onda del resto:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N; N | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle \\
&= \sum_i \sqrt{\frac{n_i}{N}} \langle \vec{x}_1 | \lambda_i \rangle \langle \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N; N-1 | n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i \langle \vec{x}_1 | \lambda_i \rangle \langle \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N; N-1 | \hat{a}_i | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle
\end{aligned} \tag{19.13}$$

La razón de la presencia del factor  $\sqrt{n_i/N}$  en la segunda línea de esta ecuación es la siguiente: hemos considerado que el bracket del lado izquierdo de las igualdades está formado por productos de brackets de cada una de las partículas que aparecen en las sumas del lado derecho. Luego, si hay  $n_i$  partículas en el estado  $|\lambda_i\rangle$ , al separarlo aparecerá un factor  $\sqrt{n_i}$  multiplicando y un  $1/\sqrt{N}$  para mantener la normalización adecuada.

Finalmente, en la última línea de la igualdad (19.13) hemos escrito el ket  $|n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle = a_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle$  aprovechando el factor  $\sqrt{n_i}$ . Con todo esto podemos escribir, incluyendo las autofunciones  $\langle \vec{x}_1 | \lambda_i \rangle$

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N; N | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \langle \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N; N-1 | \psi(\vec{x}_1) | n_1 n_2 \dots n_i \dots \rangle \tag{19.14}$$

Tomemos en esta ecuación el caso más simple en que  $N = 1$ . Obtenemos

$$\langle \vec{x}_1; 1|1 \rangle = \langle 0|\psi(\vec{x}_1)|1 \rangle \quad (19.15)$$

por lo que, obviando que se trata de  $N = 1$

$$\langle \vec{x}_1| = \langle 0|\psi(\vec{x}_1) \quad (19.16)$$

o

$$\psi^\dagger(\vec{x}_1)|0 \rangle = |\vec{x}_1 \rangle \quad (19.17)$$

que hace la interpretación de  $\psi^\dagger(\vec{x})$  transparente:

- $\psi^\dagger(\vec{x})$  es un operador que crea una partícula localizada en el punto  $\vec{x}$ .

Análogamente,  $\psi(\vec{x})$  aniquila una partícula en el punto  $\vec{x}$ .

Dado que tenemos

$$\psi^\dagger(\vec{y})|0 \rangle = |\vec{y} \rangle$$

vale que

$$\langle \vec{x}|\psi^\dagger(\vec{y})|0 \rangle = \langle \vec{x}|\vec{y} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \quad (19.18)$$

por lo que la norma del estado de una partícula no ha quedado bien definido,

$$\langle 0|\psi(\vec{x})\psi^\dagger(\vec{x})|0 \rangle = \delta^{(3)}(0) \quad (19.19)$$

Pero esto se puede resolver utilizando el recurso análogo a la construcción de paquetes de onda para partículas libres en la mecánica cuántica ordinaria. Es decir, construyendo el objeto

$$|\psi(\vec{x}_0) \rangle = \int d^3x f(\vec{x} - \vec{x}_0)\psi^\dagger(\vec{x})|0 \rangle \quad (19.20)$$

donde  $f(\vec{x} - \vec{x}_0)$  es una función de cuadrado integrable no nula en una región centrada en  $\vec{x}_0$ , de manera que

$$\begin{aligned} \langle \psi(\vec{x}_0)|\psi(\vec{x}_0) \rangle &= \int d^3x d^3y f^*(\vec{x} - \vec{x}_0)f(\vec{y} - \vec{x}_0)\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \\ &= \int d^3x |f(\vec{x} - \vec{x}_0)|^2 < \infty \end{aligned} \quad (19.21)$$

Consideremos ahora un vector  $|\psi\rangle$  del espacio de Fock  $\mathcal{H}_F$ ,

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_F = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_N \dots \quad (19.22)$$

La acción de los operadores  $\psi(\vec{x})$

$$\psi(\vec{x})|\psi\rangle = \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \hat{a}_i |\psi\rangle \quad (19.23)$$

sobre tal estado puede calcularse fácilmente. Enefecto, el bra asociado está dado por

$$\langle \psi | \psi^\dagger(\vec{x}) = \sum_i \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle \langle \psi | \hat{a}_i^\dagger \quad (19.24)$$

Si introducimos la clausura de la base  $\{|n_1 n_2 \dots n_i\rangle; N\}$  en el lado derecho de la ec.(19.23) tendremos

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x})|\psi\rangle &= \sum_{i, \{N\}} \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle a_i |n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots; N\rangle \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots; N | \psi\rangle \\ &= \sum_{i, \{N\}} \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \sqrt{n'_i} |n'_1 n'_2 \dots n'_i - 1 \dots; N - 1\rangle \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots; N | \psi\rangle \end{aligned} \quad (19.25)$$

Multiplicando a izquierda por  $\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} |$  llegamos a la igualdad siguiente

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} | \psi(\vec{x}) | \psi\rangle &= \sum_{i, \{N\}} \sqrt{n'_i} \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \times \\ &\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} | n'_1 n'_2 \dots n'_i - 1 \dots; N - 1\rangle \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots; N | \psi\rangle \end{aligned} \quad (19.26)$$

En este punto, se puede usar la identidad siguiente para el primer bracket de la segunda línea incluyendo el factor  $\sqrt{n'_i}$  de la primera

$$\begin{aligned} &\sqrt{n'_i} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} | n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots; N - 1\rangle \\ &= \sqrt{N} \int d^3x \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} | n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots \rangle \end{aligned} \quad (19.27)$$

Insertando esta igualdad en (19.26), y utilizando las clausuras de la bases  $|n'_1 n'_2 \dots n'_i \dots; N\rangle$  y  $|\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} \dots\rangle$  se tiene

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} | \psi(\vec{x}) | \psi\rangle = \sqrt{N} \langle \vec{x} \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} | \psi\rangle \quad (19.28)$$

Se puede entonces igualar los bras a ambos lados de la igualdad

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} | \psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} | \sqrt{N} \quad (19.29)$$

o, lo que es lo mismo

$$\psi^\dagger(\vec{x}) | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} \rangle = \sqrt{N} | \vec{x} \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N-1} \rangle \quad (19.30)$$

Confirmamos entonces que el operador  $\psi^\dagger(\vec{x})$  actúa como operador de creación de una partícula, en la representación del espacio de configuración, en el punto  $\vec{x}$ .

Todo esto nos permite, asociando estado  $|\psi\rangle$  como el vector columna que introducimos al discutir el espacio de Fock (ver (18.15))

$$\langle | \psi \rangle = \begin{bmatrix} \langle 0 | \psi \rangle \\ \langle \vec{x}_1 | \psi \rangle \\ \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N | \psi \rangle \end{bmatrix} \quad (19.31)$$

interpretar a  $\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N | \psi \rangle$  como la amplitud de probabilidad de encontrar al sistema descrito por el vector  $|\psi\rangle$  en un estado de  $N$  partículas ubicadas en los puntos  $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N$ . A esta descripción se la conoce como la del espacio de Fock o del espacio de configuración.

De la misma manera que se encontró la ec.(19.30) se puede demostrar que cuando sobre un estado de  $N + 1$  partículas actúa  $\psi(\vec{x})$  se pasa a un estado de  $N$  partículas de la forma

$$\psi(\vec{x}) | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{N+1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_{l=1}^N \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_l) | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_{l-1} \vec{x}_{l+1} \dots \vec{x}_{N+1} \rangle \quad (19.32)$$



# Clase 20

## Segunda cuantificación para el caso de fermiones

La segunda cuantificación de sistemas fermiónicos sigue un camino similar al de los bosones pero, como es de esperar, el principio de exclusión de Pauli juega un rol central responsable de un cambio mayor.

Sabemos que un dado estado fermiónico  $|\lambda_i\rangle$ , caracterizado por el conjunto de números cuánticos  $\{\lambda_i\}$ , puede estar ocupado a lo sumo por un fermión. Luego, los números de ocupación  $n_i$  que en el caso de bosones podían tomar valores arbitrariamente grandes, en este caso pueden ser solo  $n_i = 0, 1$ .

Escribiremos a la función de onda en la representación de coordenadas que describe el estado de un fermión, en la forma

$$\varphi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \lambda_n \rangle \quad (20.1)$$

donde  $\vec{r}$  es el vector posición de la partícula (recordemos que estamos tratando el caso no-relativista) y  $\lambda_n$  el conjunto completo de autovalores que determinan un dado estado  $|\lambda\rangle$ . Como siempre, tomaremos a los estados apropiadamente normalizados:

$$\langle \lambda_n | \lambda_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad (20.2)$$

de manera que las funciones de onda lo sean,

$$\delta_{nn'} = \int d^3r \langle \lambda_n | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \lambda_{n'} \rangle = \int d^3r \varphi_n(\vec{r}) \varphi_{n'}(\vec{r}) \quad (20.3)$$

Como en el caso ya estudiado de bosones, consideraremos la aproximación de partícula independiente y comenzaremos entonces por escribir a la función de onda para el sistema de  $N$  partículas como un producto de las funciones de onda de cada partícula:



$$\begin{aligned}
\tilde{\Phi}_{n_1, n_2, \dots, n_k}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_k, \dots, \vec{x}_N) &= \varphi_{\lambda_1}(\vec{x}_1) \varphi_{\lambda_2}(\vec{x}_2) \dots \varphi_{\lambda_k}(\vec{x}_k) \dots \\
&= \langle \vec{x}_1 | \lambda_1 \rangle \langle \vec{x}_2 | \lambda_2 \rangle \dots \langle \vec{x}_k | \lambda_k \rangle \dots
\end{aligned} \tag{20.4}$$

Indicaremos cuántas partículas están en cada estado  $|\lambda_i\rangle$  utilizando la notación compacta

$$\tilde{\Phi}_{n_1, n_2, \dots, n_k}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) = \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N | n_1 n_2 \dots n_k \dots \rangle_{no \text{ ant}} \tag{20.5}$$

que implica que hay  $n_1 = 1$  partícula en uno de los estados  $|\lambda\rangle$ ,  $n_2 = 1$  partícula ( $n_2 = 0, 1$ ) en otro de los estado  $|\lambda\rangle$  y así siguiendo. Por supuesto, habrá estados no ocupados por ninguna partícula.

La indicación *no ant* se refiere a que esta función no ha sido aun antisimetrizada.

Para antisimetrizar la función de onda debemos considerar todas las posibles permutaciones con sus signos adecuados incluyendo el signo de cada una que, como siempre anotamos como  $\epsilon_P$ ,

$$\begin{aligned}
\Phi_{n_1, n_2, \dots, n_k}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) &= \mathcal{N} \sum_{\mathcal{P}} \epsilon_P \tilde{\Phi}_{n_1, n_2, \dots, n_k}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) \\
&= \mathcal{N} \sum_{\mathcal{P}} \epsilon_P \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N | n_1 n_2 \dots \rangle_{no \text{ ant}} \\
&\equiv \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N | n_1 n_2 \dots \rangle
\end{aligned} \tag{20.6}$$

Como siempre,  $\mathcal{N} = 1/\sqrt{N!}$  es la normalización apropiada. Notar que la suma debe ser tomada sobre todos los estados ocupados.

Los operadores de aniquilación  $a_i$  y creación  $a_i^\dagger$  actuando sobre los kets  $|n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle$  se definen en este caso así:

$$\begin{aligned}
a_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= (-1)^{s_i} n_i |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle \\
a_i^\dagger |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= (-1)^{s_i} (1 - n_i) |n_1 n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle
\end{aligned} \tag{20.7}$$

$$\begin{aligned}
a_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= (-1)^{s_i} n_i |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle \\
a_i^\dagger |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= (-1)^{s_i} (1 - n_i) |n_1 n_2 \dots n_i + 1 \dots\rangle
\end{aligned}$$

Los cambios que han sido introducidos respecto de las definiciones para bosones son los siguientes:

- Hay un signo determinado por el factor  $(-1)^{s_i}$ . Este signo se encarga de tener en cuenta la antisimetría de las funciones de onda. En efecto, el número  $s_i$  representa el número de estados ocupados hasta el nivel anterior a aquel en el cual se crea o destruye un fermión. Esto se debe a que para llegar a actuar sobre la función de onda asociada a  $|n_i\rangle$  el operador ha tenido que atravesar todos los estados ocupados a la izquierda de ese estado. Veremos que esto introduce un signo análogo al de las permutaciones en el determinante de Slater cuando éste se desarrolla por una fila o una columna.
- En el caso del operador de aniquilación, en lugar del factor  $\sqrt{n_i}$  que aparece en el caso bosónico, hemos puesto directamente  $n_i$  ya que la raíz cuadrada es innecesaria siendo que los dos únicos valores posibles del número de ocupación son  $n_i = 0, 1$ .
- En el caso del operador de creación aparece un factor  $1 - n_i$ . Esto garantiza que si el estado ya está ocupado, es decir si  $n_i = 1$ , la acción de  $a_i^\dagger$  sobre el estado consiste en multiplicar por 0 lo que evita crear un segundo fermión en ese estado, lo que violaría el principio de Pauli. Si se tratara de un estado originalmente “vacío”  $n_i = 0$  el factor al actuar con  $a_i^\dagger$  será, correctamente,  $n_i = 1$ .

Para analizar el efecto del signo determinado por  $s_i$ , tomemos la función de onda  $\Phi_{n_1, n_2, \dots, n_k}(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)$  tal como fue escrita en la ec.(20.6) y consideremos el desarrollo del determinante de Slater por una fila o columna:

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N; N | n_1 n_2 \dots n_i; N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^N (-1)^{m-1} \langle \vec{x}_1 | \lambda_m \rangle \times \\ \langle \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N; N-1 | n_2 \dots n_i; N-1 \rangle \quad (20.8)$$

Se puede extender la suma sobre los  $N$  estados ocupados a una suma sobre todos los estados posibles del sistema, es decir, incluyendo los desocupados simplemente agregando un factor  $n_i$  que anule los términos correspondientes a estados no ocupados. En tal caso el signo de la fila o columna  $m$  en (20.8) (que provenía del desarrollo de un determinante) ahora debe ser reemplazado por el que determine  $s_i$ , el número de estados ocupados entre todos los posibles, hasta aquel en que está la fila o columna  $m$ . Se tiene entonces:

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N; N | n_1 n_2 \dots n_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{s_i n_i} \langle \vec{x}_1 | \lambda_i \rangle \times \\ \langle \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N; N-1 | n_2 \dots n_i - 1; N-1 \rangle \quad (20.9)$$

Es importante notar que debe cumplirse que, a diferencia del caso bosónico, para fermiones es necesario que

$$a_i^2 = a_i^{\dagger 2} = 0 \quad (20.10)$$

En efecto, dado un estado  $|\lambda_i\rangle$ , en el caso de fermiones la acción de dos operadores destrucción sobre el mismo estado da necesariamente cero ya que cada estado puede estar ocupado a lo sumo por una partícula; lo mismo sucede para el cuadrado del operador de creación: una vez creado un estado al aplicar  $a_i^{\dagger}$ , si se pretende volver a actuar con el mismo operador el resultado debiese ser nulo pues no puede haber más que un fermión en cada estado. A partir de esta observación se tiene que

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_i &= 0 \Rightarrow [\hat{a}_i, \hat{a}_i]_+ = 0 \\ \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i^{\dagger} &= 0 \Rightarrow [\hat{a}_i^{\dagger}, \hat{a}_i^{\dagger}]_+ = 0 \end{aligned}$$

donde  $[\ , \ ]_+$  es un anti-conmutador,  $[a, b]_+ = ab + ba$ .

Es fácil extender este resultado al caso en que  $i \neq j$  de manera que se verifican las siguientes reglas de anticonmutación notando que al invertirse el orden de los dos terminos en el caso del anticonmutador, en uno de ellos el factor  $(-1)^{s_i}$  introduce un signo  $-$  por lo que el resultado es nulo,

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j]_+ = 0 = [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ \quad (20.11)$$

Como ejemplo para ver esto tomemos el eestado  $|n_1 n_2 \dots n_i \dots n_j \dots; N\rangle$ , en que tanto  $n_i$  como  $n_j$  están ocupados

$$\hat{a}_i \hat{a}_j |n_1 n_2 \dots n_i \dots n_j \dots; N\rangle = (-1)^{s_i} (-1)^{s_j} |n_1 n_2 \dots 0 \dots 0 \dots; N\rangle$$

mientras que en el orden cambiado

$$\hat{a}_j \hat{a}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots n_j \dots; N\rangle = (-1)^{s_j-1} (-1)^{s_i} |n_1 n_2 \dots 0 \dots 0 \dots; N\rangle$$

de manera que la suma se anula,  $[\hat{a}_i, \hat{a}_j]_+ = 0$

Nos resta calcular el anticonmutador de  $\hat{a}_i$  con  $\hat{a}_j^\dagger$ . Consideremos primero el caso en que  $i = j$

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= (-1)^{s_i} (1 - n_i) a_i |n_1 n_2 \dots n_i + 1\rangle \\ &= (1 - n_i) (n_i + 1) |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle \\ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= (-1)^{s_i} n_i a_i^\dagger |n_1 n_2 \dots n_i - 1 \dots\rangle \\ &= n_i (2 - n_i) |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle \end{aligned} \quad (20.12)$$

El factor  $(2 - n_i)$  see genera porque recordemos que sobre un estado  $|n_i\rangle$  la acción de  $\hat{a}_i^\dagger$  genera un  $(1 - n_i)$  y en el caso presente la acción de  $\hat{a}_i^\dagger$  se efectúa sobre  $|n_i - 1\rangle$ .

Sumando las dos igualdades se tiene se

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger]_+ = 1 - n_i^2 + 2n_i - n_i^2 = 1 \quad (20.13)$$

dado que  $n_i^2 = n_i = 0, 1$ . Es fácil ver que en el caso en que  $i \neq j$ , el anticonmutador se anula por lo que podemos poner en general

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_+ = \delta_{ij} \quad (20.14)$$

Tenemos entonces como conjunto de anti-conmutadores

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j]_+ = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_+ = 0, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_+ = \delta_{ij} \quad (20.15)$$

Como en el caso de bosones, el número de ocupación de un estado  $\lambda_i$  está dado por

$$\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (20.16)$$

y puede verse fácilmente que se trata de un proyector (con autovalores 0, 1)

$$\hat{N}_i^2 = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \hat{a}_i^\dagger (1 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) \hat{a}_i = \hat{N}_i \quad (20.17)$$

Para pasar del espacio de números de ocupación al de configuración procedemos como en el caso de los bosones introduciendo funciones de estado en la representación de coordenadas y considerando un desarrollo en que los coeficientes con que aparecen en el desarrollo son los operadores  $\hat{a}_i$  y  $\hat{a}_j^\dagger$ . Como en el caso de bosones, por simplicidad notacional no indicaremos con un “sombrero” que  $\psi(\vec{x})$  y  $\psi^\dagger(\vec{x})$  son operadores ya que  $\hat{a}_i$  y  $\hat{a}_j^\dagger$  lo son

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}) &= \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \hat{a}_i \\ \psi^\dagger(\vec{x}) &= \sum_i \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle \hat{a}_i^\dagger \end{aligned} \quad (20.18)$$

Con estas definiciones, es fácil comprobar, usando las reglas (20.15) que

$$\begin{aligned} [\psi(\vec{x}), \psi(\vec{y})]_+ &= [\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})]_+ = 0 \\ [\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})]_+ &= \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \end{aligned} \quad (20.19)$$

## Representación de operadores

En esta segunda cuantificación, lo que aparecían como funciones de onda en mecánica cuántica es ahora un conjunto de operadores. En la mecánica cuántica quienes eran operadores eran aquellos que, vía las reglas de cuantificación canónica, eran asociados a las cantidades física de la mecánica clásica (energía, impulso, momento angular, ...).

Vamos ahora a mostrar cómo definir en la segunda cuantificación a tales operadores asociados a la medida de cantidades físicas. Para

comenzar, veremos entonces cómo definirlos actuando sobre estados de números de ocupación. Es decir, cuando actúan sobre los kets  $|n_1 n_2 \dots n_i\rangle \in \mathcal{H}_N$ .

Supongamos conocer los elementos de matriz de un operador asociado a alguna cantidad física definido en el espacio de configuración, que llamaremos  $\hat{F}(\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N)$ , que actúa sobre  $N$  partículas y que **que no cambia el número de partículas**,

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}'_1 \vec{x}'_2 \dots \vec{x}'_{N'} | \hat{F} | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N \rangle &= \delta_{N,N'} F(\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N) \times \\ &\delta^{(3)}(\vec{x}'_1 - \vec{x}_1) \delta^{(3)}(\vec{x}'_2 - \vec{x}_2) \dots \delta^{(3)}(\vec{x}'_N - \vec{x}_N) \end{aligned} \quad (20.20)$$

Por ejemplo, puede tratarse de un potencial  $\hat{V}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ , o de una suma de operadores de energía cinética o de un potencial

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \hat{p}_i^2 \quad (20.21)$$

Insertando adecuadamente dos relaciones de clausura en la base  $|\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N\rangle$  en (20.20) que incluyen sus respectivas integrales se tiene,

$$\begin{aligned} \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \hat{F} | n_1 n_2 \dots n_i \rangle &= \int d^3 x_1 d^3 x_2 \dots d^3 x_N d^3 x'_1 d^3 x'_2 \dots d^3 x'_N \\ &\langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \vec{x}'_1 \vec{x}'_2 \dots \vec{x}'_N \rangle \langle \vec{x}'_1 \vec{x}'_2 \dots \vec{x}'_N | \hat{F} | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N \rangle \\ &\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N | n_1 n_2 \dots n_i \rangle \end{aligned} \quad (20.22)$$

Usando (20.20) y que  $\psi^\dagger$  cuando actúa sobre el vacío crea una partícula

$$\psi^\dagger(\vec{x}_1) |0\rangle = |\vec{x}_1\rangle \Rightarrow \psi^\dagger(\vec{x}_1) |\vec{x}_2 \dots \vec{x}_N\rangle = \sqrt{N} |\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N\rangle \quad (20.23)$$

podemos escribir para el caso total de  $N$  partículas

$$\langle n_1 n_2 \dots n_i | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle n_1 n_2 \dots n_i | \psi^\dagger(\vec{x}_1) \psi^\dagger(\vec{x}_2) \dots \psi^\dagger(\vec{x}_N) |0\rangle \quad (20.24)$$

tendremos

$$\begin{aligned} \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \hat{F} | n_1 n_2 \dots n_i \rangle &= \frac{1}{N!} \int d^3 x_1 d^3 x_2 \dots d^3 x_N \times \\ &\langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \psi^\dagger(\vec{x}_1) \psi^\dagger(\vec{x}_2) \dots \psi^\dagger(\vec{x}_N) |0\rangle F(\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N) \times \\ &\langle 0 | \psi(\vec{x}_1) \psi(\vec{x}_2) \dots \psi(\vec{x}_N) | n_1 n_2 \dots n_i \rangle \end{aligned} \quad (20.25)$$

En este punto, queremos, en lugar de trabajar en el espacio de Hilbert de  $N$  partículas, trabajar en el espacio de Fock que lo contiene como subespacio junto a todos los otros subespacios de  $0, 1, \dots$ , partículas.

Ahora bien, en la fórmula anterior, el producto de operadores  $\psi^\dagger$  aniquilarían cualquier estado que no sea  $|0\rangle$  pues si actuara sobre cualquier otro, el resultado daría un ket en  $\mathcal{H}_M$  con  $M > N$  partículas mientras que el bra correspondiente pertenecería a  $\mathcal{H}_N$ . Lo mismo sucede con el producto de los  $\psi$  sobre  $\langle 0|$ . Podemos entonces agregar todos los otros kets  $|n_1 n_2 \dots\rangle$  con un número total de partículas arbitrario pues solo contribuiría el de  $N$  partículas. De esta manera queda armada la clausura en el espacio  $\mathcal{H}_F$  total y se puede reducir la fórmula anterior

$$\begin{aligned} \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \hat{F} | n_1 n_2 \dots n_i \rangle &= \frac{1}{N!} \int d^3 x_1 d^3 x_2 \dots d^3 x_N \times \\ &\langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \psi^\dagger(\vec{x}_1) \psi^\dagger(\vec{x}_2) \dots \psi^\dagger(\vec{x}_N) | 0 \rangle F(\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N) \times \\ &\langle 0 | \psi(\vec{x}_1) \psi(\vec{x}_2) \dots \psi(\vec{x}_N) | n_1 n_2 \dots n_i \rangle \end{aligned} \quad (20.26)$$

a la forma

$$\begin{aligned} \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \hat{F} | n_1 n_2 \dots n_i \rangle &= \frac{1}{N!} \int d^3 x_1 d^3 x_2 \dots d^3 x_N \times \\ &\langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \psi^\dagger(\vec{x}_1) \psi^\dagger(\vec{x}_2) \dots \psi^\dagger(\vec{x}_N) F(\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N) \times \\ &\psi(\vec{x}_1) \psi(\vec{x}_2) \dots \psi(\vec{x}_N) | n_1 n_2 \dots n_i \rangle \end{aligned} \quad (20.27)$$

Tomemos el caso en que se tiene (como por ejemplo cuando se trata de la suma de las energías cinéticas de cada partícula)

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^N \hat{f}(\vec{x}_i) \quad (20.28)$$

Para cada  $i$ , habrá solo un par de operadores  $\psi$  que importan, aquellos que se encuentran evaluados en  $\vec{x}_i$ . Los otros operadores “atraviesan” a  $\hat{f}$  sin alterarlo. Consideremos el caso  $i = 1$ . Se puede llevar  $\psi^\dagger(\vec{x}_1)$  a la derecha atravesando los otros  $\psi^\dagger$  con los que conmuta si se trata de bosones (para el caso de fermiones anticonmuta). Cuando queda justo a la izquierda de  $\psi(\vec{x}_1)$  se forma  $\hat{N}_1$  y a su derecha habrá  $N - 1$  operadores de destrucción actuando sobre un estado de  $N$  partículas,

lo cual lo reduce a un estado de  $n_1 = 1$  partícula. Podemos entonces reemplazar a  $\hat{N}$  por el número 1,

$$\begin{aligned} & \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \psi^\dagger(\vec{x}_2) \dots \psi^\dagger(\vec{x}_N) \hat{f}(\vec{x}_N) \int d^3 x_1 \psi^\dagger(\vec{x}_1) \psi(\vec{x}_1) \times \\ & \psi(\vec{x}_2) \dots \psi(\vec{x}_N) | n_1 n_2 \dots n_i \rangle = \\ & \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \psi^\dagger(\vec{x}_2) \dots \psi^\dagger(\vec{x}_N) \hat{f}(\vec{x}_N) \hat{N}_1 \psi(\vec{x}_2) \dots \psi(\vec{x}_N) | n_1 n_2 \dots n_i \rangle = \\ & \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \psi^\dagger(\vec{x}_2) \dots \psi^\dagger(\vec{x}_N) \hat{f}(\vec{x}_N) \psi(\vec{x}_2) \dots \psi(\vec{x}_N) | n_1 n_2 \dots n_i \rangle \end{aligned}$$

Si se repite el procedimiento con  $\psi^\dagger(\vec{x}_2)$  sucederá lo mismo salvo que  $\hat{N}_2$  se encontrará actuando sobre un estado de  $|n_2\rangle$  partículas, por lo que podremos reemplazarlo por el número 2. Lo mismo sucederá con  $\psi^\dagger(\vec{x}_3)$  y aparecerá un 3 y así siguiendo hasta generarse un  $(N-1)!$ . Lo mismo se puede hacer para los otros términos  $f(\vec{x}_i)$  de la suma de operadores por lo que se termina con (en el caso de fermiones aparecerá un signo que tendré en cuenta cada una de las anti-conmutaciones).

$$\begin{aligned} & \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \hat{F} | n_1 n_2 \dots n_i \rangle = \\ & \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \int d^3 x_i \psi^\dagger(\vec{x}_i) f(\vec{x}_i) \psi(\vec{x}_i) | n_1 n_2 \dots n_i \rangle \quad (20.29) \end{aligned}$$

Todos los términos de la suma son idénticos por lo que finalmente se tiene

$$\begin{aligned} & \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \hat{F} | n_1 n_2 \dots n_i \rangle = \\ & \langle n'_1 n'_2 \dots n'_i | \int d^3 x \psi^\dagger(\vec{x}) \hat{f}(\vec{x}) \psi(\vec{x}) | n_1 n_2 \dots n_i \rangle \quad (20.30) \end{aligned}$$

Luego vemos que la representación de  $\sum_i \hat{f}(\vec{x})$  es

$$\sum_i \hat{f}(\vec{x}_i) \rightarrow \int d^3 x \psi^\dagger(\vec{x}) \hat{f}(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \quad (20.31)$$

Por ejemplo si se trata de operadores de energía cinética,

$$\hat{H}_0 = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \rightarrow H_0 = - \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 x \psi^\dagger(\vec{x}) \nabla_x^2 \psi(\vec{x}) \quad (20.32)$$

Análogamente veremos en la práctica que para operadores que involucran dos partículas se tiene:

$$\hat{F} = \sum_{i < j} V(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \rightarrow \frac{1}{2} \int d^3 x d^3 x' \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{x}') \hat{V}(\vec{x}, \vec{x}') \psi(\vec{x}) \psi(\vec{x}') \quad (20.33)$$





# Clase 21

## Dependencia temporal (Esquema de Heisenberg)

Siguiendo el abordaje de Heisenberg a la física cuántica, hemos comenzado por desarrollar la segunda cuantificación de la mecánica trabajando a tiempo fijo para partículas que no interactúan. En lo que sigue discutiremos la evolución temporal de tales sistemas de  $N$  partículas. Recién entonces consideraremos el caso en que hay interacciones entre las partículas.

Consideremos primero el caso de bosones. Se trata de escribir en este marco algo equivalente a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en el formalismo de la segunda cuantificación de manera de describir la evolución temporal del sistema.

Hasta ahora habíamos trabajado con operadores a tiempo fijo. Para introducir la evolución temporal podemos guiarnos por lo que se hace en la “primera” cuantificación de la mecánica clásica cuando se establece una relación entre los esquemas llamados de Schrödinger, en el que las funciones de onda evolucionan en el tiempo según una ecuación diferencial) y el de Heisenberg en el que son los operadores los que dependen del tiempo y obedecen ecuaciones.

En la segunda cuantificación las funciones de onda han sido reemplazadas por operadores por lo que es evidente que lo natural es utilizar el esquema de Heisenberg para describir la evolución temporal. Recordemos que en este esquema, en la “primera cuantización” la evolución temporal es regida por una ecuación de evolución de los operadores

$$[\hat{A}_H, \hat{H}] = \hbar i \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} \quad (21.1)$$

La relación entre ambos esquemas para un cierto operador  $\hat{A}$  fue deter-

minada como

$$\hat{A}_H(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \hat{A}_S(\vec{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \quad (21.2)$$

Entonces, en el caso de los operadores de aniquilación y creación que definimos para un sistema de bosones,

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\vec{x}) &= \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \hat{a}_i \\ \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) &= \sum_i \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle \hat{a}_i^\dagger \end{aligned} \quad (21.3)$$

es natural escribir

$$\hat{\psi}_H(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \hat{\psi}(\vec{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \quad (21.4)$$

y análogamente para  $\hat{\psi}^\dagger$ .

A partir de esta fórmula, es fácil construir en el esquema de Heisenberg los siempree que se trata de conmutadores a tiempos iguales: Para ello, ya que en la eq. anterior tenemos del lado derecho operadores  $A_S(\vec{x})$  y para ellos conocemos las reglas de conmutación de la segund cuantización, (eq.(20.19))

$$[\psi(\vec{x}), \psi(\vec{y})] = [\psi^\dagger(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})] = 0, \quad [\psi(\vec{x}), \psi^\dagger(\vec{y})] = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y})$$

a su vez obtenida a partir de las reglas de conmutación de los operadores de creación y destruccion, eq.(18.28)

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0; \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

podemos reemplazar en estas reglas los  $\hat{\psi}(\vec{x})$  y  $\hat{\psi}^\dagger(\vec{x})$  usando la ec.(21.2) de laa siguiente manera

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_H(\vec{x}, t), \hat{\psi}_H(\vec{x}', t)] &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) [\hat{\psi}(\vec{x}), \hat{\psi}(\vec{x}')] \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = 0 \\ [\hat{\psi}_H^\dagger(\vec{x}, t), \hat{\psi}_H^\dagger(\vec{x}', t)] &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) [\hat{\psi}^\dagger(\vec{x}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}')] \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = 0 \\ [\hat{\psi}_H(\vec{x}, t), \hat{\psi}_H^\dagger(\vec{x}', t)] &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) [\hat{\psi}(\vec{x}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}')] \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \\ &= \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \end{aligned} \quad (21.5)$$

Como veremos más adelante, el cálculo de conmutadores a tiempos distintos se complica y puede efectuarse de manera cerrada solo en algunos casos.

De ahora en mas trabajaremos entonces en el esquema de Heisenberg y para simplificar la notación no indicaremos explícitamente el subíndice  $H$  con el que identificábamos a tal esquema.

De las ecuaciones (21.1) y (21.4)

$$[\hat{A}_H, \hat{H}] = \hbar i \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}$$

$$\hat{\psi}_H(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \hat{\psi}(\vec{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right)$$

es fácil ver que  $\hat{\psi}_H(\vec{x}, t)$  satisface la ecuación

$$[\hat{\psi}(\vec{x}, t), \hat{H}] = i\hbar \partial_t \hat{\psi}(\vec{x}, t) \quad (21.6)$$

Nos resta ahora escribir el hamiltoniano  $\hat{H}$  en términos de operadores de creación y destrucción. Guindonos del casos en que trabajábamos a tiempo fijo y los operadores eran del tipo  $\hat{F} = \sum_i f_i(\vec{x}_i)$  escribíamos

$$\hat{H} = \int d^3y \hat{\psi}^\dagger(\vec{y}) \hat{F}(\vec{y}) \hat{\psi}(\vec{y}) \quad (21.7)$$

Como estudiaremos el caso de un hamiltoniano independiente del tiempo, escribiremos hora una fórmula análoga solo que agregaremos la dependencia del tiempo para los operadores  $\hat{\psi}$

$$\hat{H} = \int d^3y \hat{\psi}^\dagger(\vec{y}, t) \mathcal{H} \hat{\psi}(\vec{y}, t) \quad (21.8)$$

(Aquí  $\mathcal{H}$  es simplemente el hamiltoniano que se obtiene de la cuantificación canónica. Por ejemplo, en el caso libre  $\mathcal{H} = p^2/2m$ .)

Reemplazando (21.8) en (21.6) tendremos

$$i\hbar \partial_t \hat{\psi}(\vec{x}, t) = [\hat{\psi}(\vec{x}, t), \int d^3y \hat{\psi}^\dagger(\vec{y}, t) \mathcal{H} \hat{\psi}(\vec{y}, t)] \quad (21.9)$$

Usando las relaciones de conmutación tenemos finalmente

$$i\hbar \partial_t \hat{\psi}(\vec{x}, t) = \mathcal{H} \hat{\psi}(\vec{x}, t) \quad (21.10)$$

que puede ser naturalmente tomada como una ecuación de Schrödinger para el operador  $\hat{\psi}(\vec{x}, t)$ .

En el caso en que las partículas no interactúan entre sí pero sí lo pueden hacer con un potencial externo  $V(\vec{x})$  podemos poner en la ec. (21.8)  $\mathcal{H}$  como

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x}) \quad (21.11)$$

Es decir que tendremos un operador que llamaremos  $\hat{H}$  que, a partir de (21.8) y (21.11) toma la forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) \nabla^2 \hat{\psi}(\vec{x}, t) + \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) V(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}, t) \quad (21.12)$$

Consideremos el caso de un sistema de  $N$  partículas libres, es decir, con  $V(x) = 0$ . A partir de la ec. (21.12) en este caso podemos escribir

$$\hat{H}_N = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) \nabla^2 \hat{\psi}(\vec{x}, t) \quad (21.13)$$

De acuerdo a lo que obtuvimos en el caso de operadores independientes del tiempo, es fácil ver que ahora el operador número de partículas toma la forma

$$\hat{N} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) \hat{\psi}(\vec{x}, t) \quad (21.14)$$

En cuanto al operador impulso  $\hat{P}_N$ , es natural tomarlo como

$$\hat{P}_N = \frac{\hbar}{2i} \int d^3x \left( \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \hat{\psi}(\vec{x}, t) - (\vec{\nabla} \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}, t)) \hat{\psi}(\vec{x}, t) \right) \quad (21.15)$$

siendo fácil comprobar que

$$[\hat{H}_N, \hat{P}_N] = 0 \quad (21.16)$$

Analizaremos en lo que sigue lo que sucede si queremos trabajar con conmutadores a tiempos distintos en el caso de partículas libres. Partimos del desarrollo

$$\hat{\psi}(\vec{x}, t) = \sum_k \varphi(\vec{x}, t) \hat{a}_k \quad (21.17)$$

y su análogo para  $\hat{\psi}^\dagger$ . Es natural (aunque no necesario) elegir para para la base de autofunciones  $\varphi(\vec{x}, t)$  a una onda plana

$$\varphi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega_k t) \quad (21.18)$$

donde  $V = L^3$  es el volumen de una caja en que hemos ubicado al sistema, tal que cuando  $V \rightarrow \infty$  se cumple que  $(1/V) \sum \rightarrow \int d^3x$ . Además  $\omega_k = \hbar k^2 / 2m$ . Por estar el espacio limitado a una caja de lado  $L$  los impulsos  $\hbar k$  están cuantificados según

$$k = \frac{2\pi}{L} n_i, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (21.19)$$

Todo lo que hemos hecho para el caso de bosones se puede repetir para el de fermiones, salvo que en lugar de aparecer conmutadores, aparecen anti-conmutadores.

En el caso de partícula libre, es fácil calcular conmutadores y anti-conmutadores aún si los tiempos no son iguales. Se tiene en particular (tanto para bosones como para fermiones no-relativistas):

$$[\hat{\psi}(\vec{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}', t')]_{\pm} = \frac{1}{2\pi^3} \int d^3k \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') - \omega_k(t - t')) \quad (21.20)$$

Vemos que solo si  $t = t'$  se comprueba la regla de conmutación que habíamos escrito en que la integral resultaba ser la delta de Dirac. Pero a tiempos distintos el resultado se aleja de la forma canónica del conmutador entre un operador de creación y uno de destrucción.

En términos de  $\hat{a}_k$  y  $\hat{a}_k^\dagger$ , los observables, trabajando con los estados de número de partícula, se escriben

$$\begin{aligned} \hat{H}_N &= \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \\ \hat{N} &= \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \\ \hat{P}_N &= \sum_k \hbar k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \end{aligned} \quad (21.21)$$

## El nivel de Fermi

Consideremos el caso de  $N$  fermiones (no relativistas) de spin  $1/2$ , libres. Podemos calcular el valor máximo posible de  $k$ , que llamaremos  $k_F$ , para el sistema de  $N$  partículas en el estado fundamental. O sea, aquel que tiene todos los niveles más bajos ocupados, hasta el  $N$ -ésimo. Tenemos

$$\hat{N} = \sum_{k < k_F} a_k^\dagger a_k \quad (21.22)$$

Dijimos que utilizando

$$\frac{1}{V} \sum \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \quad (21.23)$$

podemos reemplazar la suma por  $V$  veces la integral del lado derecho. Es importante notar que como cada fermión puede ocupar estados con todos los números cuánticos idénticos salvo por la proyección del spin que puede valer  $\pm 1/2$ , para contar el número total de estados posibles debemos agregar a la fórmula un factor 2.

Luego, al actuar sobre un estado de  $N$  partículas tendremos, en lugar de (21.22) al pasar de una suma a una integral

$$N = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{V}{4\pi^3} \int d\Omega \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} \frac{k_F^3}{3} \quad (21.24)$$

de donde se deduce que el valor  $\hbar k_F$  máximo que puede tener el impulso en el estado fundamental de un sistema de  $N$  fermiones de spin  $1/2$  será tal que

$$k_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} \quad (21.25)$$

Tal impulso corresponde al “último nivel ocupado” en el estado fundamental y es llamado nivel de Fermi. La correspondiente energía será:

$$E_f = 2 \sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} n_k = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\Omega \int_0^{k_F} k^2 dk \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{V \hbar^2}{2\pi^2 m} \frac{k_F^5}{5} \quad (21.26)$$

Tomando a esta energía como la del estado fundamental del sistema de  $N$  fermiones libres, los estados excitados corresponderán a

Para el caso de bosones, el estado fundamental, no habiendo principio de exclusión, corresponderá al caso en que todas las partículas tienen  $\vec{k} = 0$ .

## Teoría cuántica de la radiación

Como ya señalamos previamente y en el curso en que aprendimos la mecánica cuántica de Schrödinger y Heisenberg, el tratamiento cuántico de sistemas de partículas cargadas en interacción con un campo electromagnético habíamos considerado a este último como un “fondo” (“background”) clásico. En efecto, se tomó para el campo electromagnético una solución clásica de las ecuaciones de Maxwell (por ejemplo la de un campo coulombiano) y se la “sumergió”, como potencial externo, en la ecuación cuántica para una o varias partículas cuánticas cargadas.

Así se analizó el átomo de Hidrógeno: se estudió la ecuación de Schrödinger o la de Dirac para un electrón cuántico sometido al campo eléctrico coulombiano clásico producido por el núcleo. En el caso del átomo de helio, también el potencial de repulsión entre los electrones fue tomado como un potencial coulombiano clásico mientras que los electrones eran considerados como partículas cuánticas.

También estudiamos lo que llamamos la teoría semiclásica de la radiación. Pero ahora aprendimos el método de segunda cuantificación y podremos considerar al electromagnetismo también de manera cuántica (recordemos que los campos de gauge son bosones de spin 1) y así tener una manera más precisa de la descripción de la radiación electromagnética en términos de cuantos (fotones).

Las ecuaciones clásicas del electromagnetismo, en el vacío y en presencia de cargas eléctricas son:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{E} &= \rho & \operatorname{rot} \vec{B} &= \frac{1}{c} \vec{j} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ \operatorname{div} \vec{B} &= 0 & \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \end{aligned} \quad (21.27)$$

donde  $\rho$  es la densidad de carga eléctrica y  $\vec{j}$  la correspondiente densidad de corriente.

Para dar una formulación relativista se define el tensor de campo  $F_{\mu\nu}$  de manera que  $(\operatorname{diag} g_{\mu\nu} = (1, -1, -1, -1) ; \mu, \nu = 0, 1, 2, 3, x^0 = ct)$

$$F_{0i} = -E_i, \quad \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} F^{jk} = B_i \quad (21.28)$$



y se acomodan densidad de carga y corriente en un tetravector

$$j_\mu = (c\rho(x), \vec{j}(x)) \quad (21.29)$$

de manera que las ecuaciones de Maxwell (21.27) devienen

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = j^\nu \quad (21.30)$$

$$\partial_\mu {}^*F^{\mu\nu} = 0 \quad (21.31)$$

donde hemos llamado  ${}^*F^{\mu\nu}$  al dual de  $F^{\mu\nu}$ , definido como

$${}^*F_{\mu\nu} = \frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta}F^{\alpha\beta} \quad (21.32)$$

A un punto  $(ct, \vec{x}) = (x^0, \vec{x})$  del espacio-tiempo lo escribiremos en lo que sigue  $x$ .

Si introducimos un campo de gauge  $A_\mu$  en la forma del tetravector

$$A_\mu(x) = (\phi(x), \vec{A}(x)) \quad (21.33)$$

con  $\phi$  el potencial escalar y  $\vec{A}$  el potencial vector, se puede escribir al tensor de campo como

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (21.34)$$

con lo que las ecuaciones (21.31) pasan a ser simplemente la identidad de Bianchi quedando solo (21.30) como una ecuación que tiene que ver con el contenido físico del sistema que estudiemos.

La definición (21.34) permite descubrir una invarianza fundamental del electromagnetismo, llamada invarianza de gauge: ante una transformación

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) + \partial_\mu \Lambda(x) \quad (21.35)$$

con  $\Lambda(x)$  una función real arbitraria (regular, acotada), las ecuaciones de Maxwell permanecen invariantes. En particular, los campos eléctrico y magnético, que son las cantidades medibles en la teoría, no cambian ante estas transformaciones. Se puede entonces elegir a la función  $\Lambda$  de manera de simplificar el problema particular que se desea resolver. Una

elección conveniente es la llamada “condición de Lorenz”<sup>36</sup>

$$\partial_\mu A^\mu(x) = 0 \quad (21.36)$$

En este gauge, las ecuaciones (21.30) devienen

$$\square A_\mu(x) = -\frac{1}{c} j_\mu \quad (21.37)$$

En ausencia de cargas y corrientes, esta ecuación se simplifica a

$$\square A_\mu(x) = 0 \quad (21.38)$$

La condición de Lorenz no termina de fijar el gauge. En efecto, dado un campo de gauge  $A_\mu$  que satisface la condición (21.36) y la ecuación (21.38), existe otro, que llamaremos  $A'_\mu$ , transformado de gauge de  $A_\mu$ , que también las satisface:

$$A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \Lambda \quad (21.39)$$

Ambos campos satisfarán la condición de Lorenz si se cumple que  $\square \Lambda = 0$ . De todas las funciones  $\Lambda$  que obedecen tal condición, podemos considerar una tal que

$$\Lambda(\vec{x}, t) = -\frac{1}{c} \int_0^t A_0(\vec{x}, \tau) d\tau \quad (21.40)$$

Es fácil comprobar que tal  $\Lambda$  cumple que  $\square \Lambda = 0$  siempre que  $\partial^i A_i = 0$ .  $\Lambda$  ha sido elegida de manera que el campo de gauge transformado satisfaga  $A'_0 = 0$ . Ya no queda libertad para hacer cambios de gauge y mantenerse al mismo tiempo en el gauge de Lorenz. La condición de gauge puede entonces especificarse escribiendo

$$\begin{aligned} \partial_i A^i(x) &= 0 & (\text{gauge de Coulomb}) \\ A_0 &= 0 \end{aligned} \quad (21.41)$$

---

<sup>36</sup>Que fue introducida en 1867 por Ludvig Valentin Lorenz [25], un físico y matemático dinamarqués que no debe ser confundido con Hendrik Lorentz, el premio Nobel holandés que propuso las transformaciones de coordenadas utilizadas por Einstein en su teoría de la relatividad restringida.

Ahora bien, la ecuación  $\square A_\mu(x) = 0$  tiene soluciones no triviales a pesar de corresponder a un caso sin fuentes; por sus propiedades se las llama como ondas electromagnéticas. En particular, si consideramos un volumen  $V = L^3$  finito, existen soluciones no triviales de la forma

$$\vec{u}_{\vec{k},\alpha}(x) = \vec{\epsilon}_\alpha \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)) \quad (21.42)$$

con

$$\begin{aligned} (k_x, k_y, k_z) &= \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \\ \omega &= |\vec{k}|c \end{aligned} \quad (21.43)$$

En cuanto a  $\vec{\epsilon}_\alpha$ , llamado vector de polarización, satisface  $|\vec{\epsilon}_\alpha| = 1$ . En este gauge en que  $A_0 = 0$ , el índice  $\alpha = 1, 2$  corresponde a dos de los tres vectores unitarios que serían espaciales necesarios para describir las 3 restantes componentes del campo de gauge. Sin embargo, siendo que en el gauge de Coulomb via transformada de Fourier  $\partial_i A_i = 0 \Rightarrow k_i A_i = 0$ ,  $\alpha$  se reduce a  $\alpha = 1, 2$  si elegimos como tercer versor a la dirección de propagación  $\vec{k}/|k|$ . Estas dos direcciones, como ya vimos al estudiar la cuantización semiclásica, están asociadas con las proyecciones de la proyección del spin  $s_z = \pm 1$  del spin del fotón, que es  $s = 1$ .

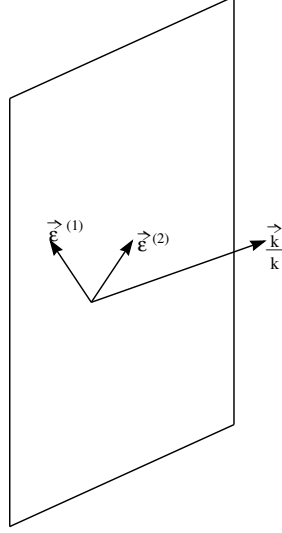
O sea que la base de versores que usaremos para escribir al campo de gauge es  $(\vec{\epsilon}^{(1)}, \vec{\epsilon}^{(2)}, \vec{k})$  (ver figura)).

Utilizando las ondas planas (21.42) como base para desarrollar un campo de gauge arbitrario la relación de ortonormalidad

$$\frac{1}{V} \int d^3x \vec{u}_{\vec{k},\alpha}^*(\vec{x}, 0) \cdot \vec{u}_{\vec{k}',\alpha'}(\vec{x}, 0) = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \quad (21.44)$$

se tiene el siguiente desarrollo para un campo de gauge general

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \sum_{\alpha=1}^2 \left( c_{\vec{k},\alpha}(t) \vec{u}_{\vec{k},\alpha}(\vec{x}, 0) + c_{\vec{k},\alpha}^*(t) \vec{u}_{\vec{k},\alpha}^*(\vec{x}, 0) \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \sum_{\alpha=1}^2 \left( c_{\vec{k},\alpha}(t) \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) + c_{\vec{k},\alpha}^*(t) \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \right) \end{aligned} \quad (21.45)$$



En la fórmula (21.45) los coeficientes de Bessel-Fourier pueden escribirse como

$$c_{\vec{k},\alpha}(t) = c_{\vec{k},\alpha}(0) \exp(-i\omega t) \quad (21.46)$$

y la combinación de los coeficientes y de sus conjugados ha sido elegida para que se cumpla  $A_\mu = A_\mu^*$ .

Es fácil ver que el hamiltoniano clásico asociado a las ecuaciones de Maxwell en ausencia de fuentes,

$$H = \frac{1}{2} \int d^3x (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) \quad (21.47)$$

toma, en términos del desarrollo (21.45) y de la relación (21.46) entre los  $c_{\vec{k},\alpha}(t)$  y los  $c_{\vec{k},\alpha}(0)$  la forma

$$H = 2 \sum_{\vec{k},\alpha} \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 c_{\vec{k},\alpha}^*(t) c_{\vec{k},\alpha}(t) = 2 \sum_{\vec{k},\alpha} \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 c_{\vec{k},\alpha}^*(0) c_{\vec{k},\alpha}(0) \quad (21.48)$$

A partir de ahora por simplicidad en la notación escribiremos a los coeficientes independientes del tiempo sin aclarar que  $t = 0$ ,  $c_{\vec{k},\alpha}^*(0) = c_{\vec{k},\alpha}^*$  y  $c_{\vec{k},\alpha}(0) = c_{\vec{k},\alpha}$ .

Vemos que podemos interpretar a estos coeficientes  $c_{\vec{k},\alpha}$  y  $c_{\vec{k},\alpha}^*$  como “coordenadas” con las que se determina al campo de gauge: dando un

determinado conjunto (infinito) de valores de  $c_{\vec{k},\alpha}$  y  $c_{\vec{k},\alpha}^*$  queda determinado un campo de gauge  $A_\mu$ . Dando otro conjunto, se tiene otro  $A_\mu$ . Esto se manifiesta más claramente si se escribe

$$\begin{aligned} Q_{\vec{k},\alpha} &= \frac{1}{c}(c_{\vec{k},\alpha} + c_{\vec{k},\alpha}^*) \\ P_{\vec{k},\alpha} &= -\frac{i\omega}{c}(c_{\vec{k},\alpha} - c_{\vec{k},\alpha}^*) \end{aligned} \quad (21.49)$$

de manera que el hamiltoniano puede escribirse

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\alpha} (P_{\vec{k},\alpha}^2 + \omega^2 Q_{\vec{k},\alpha}^2) \quad (21.50)$$

lo que corresponde claramente a una superposición de infinitos osciladores.

Las ecuaciones de Maxwell para el campo  $A_\mu$  pasan a ser las ecuaciones de Hamilton:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial Q_{\vec{k},\alpha}} &= -\dot{P}_{\vec{k},\alpha} \\ \frac{\partial H}{\partial P_{\vec{k},\alpha}} &= \dot{Q}_{\vec{k},\alpha} \end{aligned} \quad (21.51)$$

Con estos  $P$  y  $Q$  se puede definir a los corchetes de Poisson del problema clásico

$$\begin{aligned} \{P_{\vec{k},\alpha}, Q_{\vec{k}',\alpha'}\} &= \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\alpha,\alpha'} \\ \{P_{\vec{k},\alpha}, P_{\vec{k}',\alpha'}\} &= 0, \quad \{Q_{\vec{k},\alpha}, Q_{\vec{k}',\alpha'}\} = 0 \end{aligned} \quad (21.52)$$

En este punto, podemos atacar el problema de la cuantificación del campo electromagnético, siguiendo los pasos de la cuantificación canónica. Es decir, imponemos relaciones de conmutación inferidas de las relaciones clásicas (21.52) en la

$$\begin{aligned} [\hat{P}_{\vec{k},\alpha}, \hat{Q}_{\vec{k}',\alpha'}] &= -i\hbar \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\alpha,\alpha'} \\ [\hat{P}_{\vec{k},\alpha}, \hat{P}_{\vec{k}',\alpha'}] &= 0, \quad [\hat{Q}_{\vec{k},\alpha}, \hat{Q}_{\vec{k}',\alpha'}] = 0 \end{aligned} \quad (21.53)$$

De estas reglas es facil deducir las reglas de conmutación las que obedecen  $\hat{c}$  y  $\hat{c}^*$ . Conviene antes adimensionalizar estos operadores definiendo

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\vec{k},\alpha} &= \sqrt{\frac{2\omega}{c^2\hbar}} \hat{c}_{\vec{k},\alpha} \\ \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^\dagger &= \sqrt{\frac{2\omega}{c^2\hbar}} \hat{c}_{\vec{k},\alpha}^*\end{aligned}\quad (21.54)$$

Usando el análogo a (21.49)

$$\begin{aligned}Q_{\vec{k},\alpha} &= \frac{1}{c}(c_{\vec{k},\alpha} + c_{\vec{k},\alpha}^*) \\ P_{\vec{k},\alpha} &= -\frac{i\omega}{c}(c_{\vec{k},\alpha} - c_{\vec{k},\alpha}^*)\end{aligned}\quad (21.55)$$

para el caso de operadores, se tiene, invirtiendo esta ecuación

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\vec{k},\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega\hat{Q}_{\vec{k},\alpha} + i\hat{P}_{\vec{k},\alpha}) \\ \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega\hat{Q}_{\vec{k},\alpha} - i\hat{P}_{\vec{k},\alpha})\end{aligned}\quad (21.56)$$

con lo que las reglas de conmutación para  $\hat{a}$  y  $\hat{a}^\dagger$  resultan

$$\begin{aligned}[\hat{a}_{\vec{k},\alpha}, \hat{a}_{\vec{k}',\alpha'}^\dagger] &= \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\delta_{\alpha,\alpha'} \\ [\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^\dagger, \hat{a}_{\vec{k}',\alpha'}^\dagger] &= 0, \quad [\hat{a}_{\vec{k},\alpha}, \hat{a}_{\vec{k}',\alpha'}] = 0\end{aligned}\quad (21.57)$$

Vemos entonces que con este procedimiento, el campo de gauge  $\vec{A}$  pasa a ser un objeto que tiene un desarrollo en términos de operadores  $\hat{a}$  y  $\hat{a}^\dagger$  que obedecen un álgebra de operadores de aniquilación y creación,

$$\begin{aligned}\hat{A}(\vec{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \sum_{\alpha=1}^2 c \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left( \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \exp(-i\omega_k t) \hat{a}_{\vec{k},\alpha} + \right. \\ &\quad \left. \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \exp(i\omega_k t) \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^\dagger \right)\end{aligned}\quad (21.58)$$

Las ondas planas de la teoría clásica que representan el campo de radiación juegan aquí el rol de las funciones de onda cuando tomábamos

un sistema cuántico de partículas, bosones o fermiones, que obedecían la ecuación de Schrödinger y procedíamos a la segunda cuantificación del mismo.

Es importante notar que aquí el campo de radiación no obedece una ecuación cuántica (como era el caso de las funciones  $\varphi_n(\vec{x})$  que obedecían la ecuación de Schrödinger), como vimos para el caso que ya discutimos para los bosones de spin cero y los fermiones. En este caso son directamente soluciones de las ecuaciones clásicas de Maxwell.

Pero, como en los casos anteriores, los coeficientes del desarrollo son operadores de segunda cuantificación, en este caso en el esquema de Heisenberg puesto que el campo de gauge  $\hat{A}(\vec{x}, t)$  ha pasado a ser un operador dependiente del tiempo.

A partir de las expresiones de los campos eléctricos y magnético en términos de los campos de gauge,  $\vec{E} = -(1/c)\partial\vec{A}/\partial t$  y  $\vec{B} = \nabla \wedge \vec{A}$  fácil ver que el hamiltoniano del sistema puede escribirse como

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar \omega_k (\hat{N}_{\vec{k}, \alpha} + \frac{1}{2}) \quad (21.59)$$

donde, como antes, hemos definido el operador número de partícula como

$$\hat{N}_{\vec{k}, \alpha} = \hat{a}_{\vec{k}, \alpha}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, \alpha} \quad (21.60)$$

El hamiltoniano cuántico (21.59) corresponde a un sistema de infinitos osciladores de frecuencia  $\omega_k = ck$ .

## Un análisis cuidadoso de la segunda cuantización para el caso de electrones

La formulación anterior para la cuantificación del campo de radiación fue desarrollada por Bohr, Heisenberg y Jordan en 1926. Si se aplicara ciegamente al caso de electrones plantearía un problema: por tratarse de partículas cargadas incluir operadores de creación y destrucción en un único desarrollo del “campo” asociado al electrón sería inconsistente. Veamos por qué.

La fórmula que utilizamos para escribir el operador hamiltoniano de electrones libres en términos de operadores de creación y aniquilación

es la siguiente (ver. eq.(20.31))

$$\sum_i \hat{f}(\vec{x}_i) \rightarrow \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{f}(\vec{x}) \hat{\psi}(\vec{x}) \quad (20.31)$$

En cuanto hamiltoniano  $\mathcal{H}$  de Dirac, vimos que toma la forma

$$\mathcal{H} = -i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta mc^2$$

(no usamos el “sombbrero” para indicar que  $\mathcal{H}$  es un operador en el sentido de la primera cuantificación para evitar posibles confusiones)

En cuanto a los los operadores de creación y aniquilación  $\hat{\psi}^\dagger(x)$  y  $\hat{\psi}(x)$ , sus desarrollos en serie son (ver la ec.(20.18))

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\vec{x}) &= \sum_i \langle \vec{x} | \lambda_i \rangle \hat{a}_i \\ \hat{\psi}^\dagger(\vec{x}) &= \sum_i \langle \lambda_i | \vec{x} \rangle \hat{a}_i^\dagger \end{aligned}$$

donde  $\langle \vec{x} | \lambda_i \rangle = \varphi(x)$  son las soluciones de la ecuación de Dirac. Insertando estos desarrollos en la ec.(20.31) y usando la ortonormalidad de la base  $\{\varphi(x)\}$  se tiene

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger \mathcal{H} \hat{\psi} = \sum_k \hbar \omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad (21.61)$$

Pero sucede que, como vimos  $\mathcal{H}$  y por lo tanto  $H$  noson definido positivos: dado que la mitad de los  $w_k$  son negativos ( $w_k = \pm ck$ ) y  $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$  tiene como autovalores 0 y 1. Tendríamos emtonces estados con infinita energía suma de las frecuencias negativas y se nos plantearía el mismo problema que discutimos para la ecuación de Dirac.

Para resolver este problema Wendel Furry y Julius Oppenheimer<sup>37</sup> tomaron la idea de Dirac de que el positrón es equivalente a la ausencia de un electrón de energía negativa e identificaron a los operadores de creación y destrucción de positrones con los correspondientes a destrucción y creación de electrones de energías negativas:

$$b_k^\dagger = a_k, \quad b_k = a_k^\dagger \quad \omega_k < 0 \quad (21.62)$$

---

<sup>37</sup>W. H. Furry and J. R. Oppenheimer Phys. Rev. **45** (1934) 245, *On the Theory of the Electron and Positive.*



con lo que el desarrollo en operadores de creación y aniquilación puede escribirse, reemplazando los operadores de destrucción  $\hat{a}_k$  por los de creación de positrones  $\hat{b}_k^\dagger$ , lo que resulta en

$$\hat{\psi}(x) = \sum u_{k,\omega_k>0} u_k(\vec{x}) \exp(-i\omega_k t) \hat{a}_k + \sum u_{k,\omega_k<0} u_k(\vec{x})^* \exp(-i\omega_k t) \hat{b}_k^\dagger \quad (21.63)$$

En el producto de  $\hat{\psi}^\dagger$  con  $\hat{\psi}$  aparecerán productos de  $\hat{b}$  con  $\hat{a}$  y de  $\hat{a}$  con  $\hat{b}$ , generándose el conmutador  $[a_k, b_k]_+ = [a_k, a_k^\dagger] = 1$ . Teniendo en cuenta este hecho el hamiltoniano puede escribirse como

$$H = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger \mathcal{H} \hat{\psi} = \sum u_{k,w_k>0} \hbar \omega_k \hat{a}_k^\dagger a_k + \sum u_{k,w_k<0} \hbar |\omega_k| \hat{b}_k^\dagger b_k + E_0 \quad (21.64)$$

donde  $E_0$  es un término que proviene del anticonmutador

$$E_0 = - \sum_{k,w_k<0} \hbar |\omega_k| \quad (21.65)$$

En cuanto al vacío, queda definido como

$$\begin{aligned} a_k |0\rangle &= 0 \\ b_k |0\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (21.66)$$

con lo que

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle \quad (21.67)$$

Midiendo las energías respecto de la de este vacío el operador asociado a la energía del sistema pasa a ser  $H - E_0$ , que es definido positivo.

# Clase 22

## Fotones

Al estudiar la segunda cuantificación de la electrodinámica hemos escrito el campo  $\vec{A}$ , campo de radiación, como un desarrollo en términos de operadores  $a$  y  $a^\dagger$  que obedecen un álgebra de operadores bosónicos de aniquilación y creación,

$$\begin{aligned}\hat{A}(\vec{x}, t) = & \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \sum_{\alpha=1}^2 c \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left( \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \exp(-i\omega_k t) \hat{a}_{\vec{k}, \alpha} + \right. \\ & \left. \vec{\epsilon}^{(\alpha)} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x}) \exp(i\omega_k t) \hat{a}_{\vec{k}, \alpha}^\dagger \right)\end{aligned}\quad (22.1)$$

Como señalamos, el campo de radiación representado por las ondas planas no obedece una ecuación cuántica (como era el caso de las funciones  $\varphi_n(\vec{x})$  en los casos anteriores, que eran solución de la ecuación de Schrödinger) sino que son soluciones de las ecuaciones clásicas de Maxwell.

De los desarrollos que hemos expuesto concluimos que la cuantificación de la electrodinámica puede encararse partiendo de la mecánica cuántica de un sistema de bosones idénticos que ocupan estados de partícula independiente. Para ello hemos utilizado para los campos de gauge un desarrollo en serie cuyos coeficientes son operadores de creación ( $a_{\vec{k}\alpha}^\dagger$ ) y destrucción ( $a_{\vec{k}\alpha}$ ) de fotones y la base de funciones es la de ondas planas  $\vec{u}_{\vec{k}\alpha} = (1/\sqrt{V}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \exp(-i\omega_k t)$ . O sea que hemos pasado de la electrodinámica clásica a la de la segunda cuantificación sin escalas.

Por otro lado, como en el caso de fermiones y bosones que vimos antes, los coeficientes del desarrollo (22.1) son operadores de segunda

cuantificación, en este caso en el esquema de Heisenberg puesto los operadores  $\hat{A}(\vec{x}, t)$  dependend del tiempo.

En términos de estos operadores pudimos ver que el hamiltoniano del sistema toma la forma

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar \omega (\hat{N}_{\vec{k}, \alpha} + \frac{1}{2}) \quad (22.2)$$

con  $\hat{N}_{\vec{k}, \alpha}$ , operador número de partículas, dado por

$$\hat{N}_{\vec{k}, \alpha} = \hat{a}_{\vec{k}, \alpha}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, \alpha} \quad (22.3)$$

Este hamiltoniano cuántico (21.59) puede asociarse al de un sistema de infinitos osciladores de frecuencia  $\omega = \omega_k = \hbar k$  lo que estudiamos en la mecánica cuántica.

Debe observarse que cuando no hay fotones la energía, que debería corresponder al estado fundametal es

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar \omega_k = \sum_{\vec{k}} \hbar \omega \quad (22.4)$$

y aun en una caja de volumen  $V = L^3$  diverge pues los  $n_i$  pueden crecen sin límite,

$$w_k = ck = c \sqrt{\frac{2\pi}{L}} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2} \quad (22.5)$$

A este fenómeno se lo conoce como “catástrofe infrarroja” y su origen es el hecho de que los estados de partícula independiente pueden tener energías asociadas a longitudes de onda muy pequeñas ( $\lambda = 2\pi/k$ ) presentes en la caja de volumen  $L^3$  en que hemos cuantizado a las ondas electromatgnéticas. Como normalmente las energías se miden respecto de una elegida como referencia, se podría arguir que esto resuelve el problema sustrayendo el valor infinito como se hace habitualmente.

Sin embargo, estas fluctuaciones del vacío que corresponden a la llamada “energía del punto cero” producen efectos medibles, como por ejemplo la fuerza atractiva que aparece entre dos placas conductoras

descargadas. Este efecto llamado “efecto Casimir” fue descubierto por el físico holandés H. Casimir<sup>38</sup>.

Se puede obtener un resultado para la fuerza entre los conductores descargados utilizando la teoría cuántica de campos ya que en el marco de esta teoría puede “regularizarse” el valor en principio infinito y obtener un resultado finito. Pero en el contexto de la teoría de Einstein para la gravitación, la interpretación de la energía dada por la ec.(22.4) se hace problemática porque hace necesario introducir el concepto de constante cosmológica ( $\Lambda$ ) en las ecuaciones de la gravitación y el valor de  $\Lambda$  necesario resulta ser demasiado grande para las cotas actuales. Como no se tiene una versión consistente de la gravitación cuántica, nada se puede concluir<sup>39</sup>.

Es interesante calcular el vector de Poynting  $\vec{S}$ ,

$$\vec{S} = \int d^3x \vec{E} \wedge \vec{B} = \sum_{\vec{k}, \alpha} \vec{k} \omega_k \left( a_{\vec{k}\alpha}^\dagger a_{\vec{k}\alpha} + a_{\vec{k}\alpha} a_{\vec{k}\alpha}^\dagger \right) = \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar \vec{k} \left( \hat{N}_{\vec{k}\alpha} + \frac{1}{2} \right) \quad (22.6)$$

La suma del término  $1/2$  para cada valor de  $k$  da cero (las contribuciones de cada  $\vec{k}$  y  $-\vec{k}$  se anulan dos a dos), de manera que el resultado es

$$\vec{S} = \sum_{\vec{k}, \alpha} \hbar \vec{k} \hat{N}_{\vec{k}} \quad (22.7)$$

En cuanto a la evolución temporal, podemos escribir la ecuación de Heisenberg en la forma

$$\dot{\hat{a}}_{\vec{k}\alpha} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}_{\vec{k}\alpha}] = i\omega \left[ \sum_{\vec{k}', \alpha'} \hat{N}_{\vec{k}', \alpha'} \hat{a}_{\vec{k}\alpha} \right] = -i\omega \hat{a}_{\vec{k}\alpha}$$

<sup>38</sup>H. Casimir, Proc. Kon. Nederl. Akad. Wetensch, B51 (1948) 793, “On the attraction between two perfectly conducting plates”

<sup>39</sup>La constante cosmológica es la densidad de energía del espacio, o energía de vacío. Es una constante introducida originalmente por Einstein en sus ecuaciones de la gravitación para lograr una solución que correspondiera a un universo estático. Pero a partir de la década de 1930 se comprobó que el Universo se expande a cierta velocidad y la idea de una constante cosmológica no nula fue abandonada. Pero hoy sabemos que el Universo se expande aceleradamente. Y sucede que la inclusión de una constante cosmológica en las ecuaciones de Einstein podría explicar tal aceleración y, además la posible existencia de la llamada materia oscura (80% de la materia del Universo).

$$(22.8)$$

de manera que integrando esta ecuación diferencial se obtiene

$$\hat{a}_{\vec{k}\alpha}(t) = \hat{a}_{\vec{k}\alpha}(0) \exp(-i\omega t) \quad (22.9)$$

y análogamente

$$\hat{a}_{\vec{k}\alpha}^\dagger(t) = \hat{a}_{\vec{k}\alpha}^\dagger(0) \exp(i\omega t) \quad (22.10)$$

Estos son los operadores dependientes del tiempo que podemos identificar en el en el desarrollo de  $\vec{A}(\vec{x}, t)$ . A partir de operadores de aniquilación y creación, pudimos antes escribir, para bosones en general, reglas de conmutación entre los operadores  $\hat{\psi}(\vec{x})$  y  $\hat{\psi}^\dagger(\vec{x})$  que destruían y creaban partículas en un punto  $\vec{x}$ . Podemos ahora interpretar de la misma este caso particular de bosones de spin 1/2 para el caso de radiación y asociar en el contexto de la radiación a las partículas con los fotones introducidos por Einstein para explicar el efecto fotoeléctrico.

En principio, como análogo de los operadores  $\hat{\psi}(\vec{x})$  en el caso general de los bosones tenemos para la radiación relectromagnética al campo de gauge  $\vec{A}(\vec{x}, t)$  y, a través de éste, a los campos físicos  $\vec{E}(\vec{x}, t)$  y  $\vec{B}(\vec{x}, t)$ . Dado que son estos últimos los campos físicamente relevantes, podemos calcular las reglas de conmutación entre ellos. Usando las relaciones

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}, \quad \vec{E} = -\frac{\partial A_0}{\partial \vec{x}} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (22.11)$$

y las relaciones de conmutación de los operadores (22.9)-(22.10) se obtiene:

$$[E_i(\vec{x}, t), B_j(\vec{y}, t)] = i\hbar c \varepsilon_{ijk} \partial_k \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \quad (22.12)$$

Vemos que en lugar de aparecer la típica delta de las relaciones de conmutación estudiadas antes, aparece una derivada. Si en cambio calculamos el conmutador entre  $A_i$  y  $E_j$ , se tiene

$$\begin{aligned} [E_i(\vec{x}, t), A_j(\vec{y}, t)] &= i\hbar c \delta_{ij} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \\ [A_i(\vec{x}, t), A_j(\vec{y}, t)] &= [E_i(\vec{x}, t), E_j(\vec{y}, t)] = 0 \end{aligned} \quad (22.13)$$

Este resultado, que coincide con el canónico discutido en general para bosones, hace natural que aceptemos que la cuantificación correcta en el

espacio de configuración debe hacerse tomando a  $\vec{A}$  como “coordenada” y a  $\vec{E}$  como impulso conjugado. En tal caso, se considera a  $\vec{B}$  una funcional de  $A$  y en base a las reglas dadas, es fácil deducir (22.12).

Vamos ahora a conectar todo esto con los fotones que introdujo Einstein para explicar el efecto fotoeléctrico. Dado el operador de creación  $\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^\dagger$ , podemos definir el estado de un fotón de manera análoga a lo que hicimos previamente cuando construimos el espacio de Fock, i.e. definiendo un estado de vacío al que llamaremos  $|0\rangle$ , caracterizado por

$$\hat{a}_{\vec{k}\alpha}|0\rangle = 0 \quad (22.14)$$

Entonces, para el estado de un fotón de impulso  $\hbar k$  y polarización  $\alpha$ , es natural proponer

$$|\vec{k}, \alpha; 1\rangle = \hat{a}_{\vec{k}\alpha}^\dagger |0\rangle \quad (22.15)$$

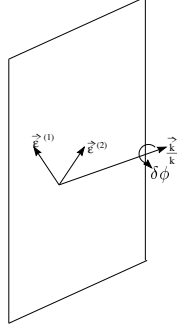
El lado izquierdo de esta ecuación corresponde, en el espacio de configuración, a

$$\langle \vec{x} | \vec{k}, \alpha; 1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \vec{e}^{(\alpha)} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) \quad (22.16)$$

Esta “función de onda” tenga el carácter de un vector, lo que hace razonable asignarle al fotón un spin 1 ya que los vectores son espinores de segundo orden. Esto está de acuerdo también con el hecho de que el álgebra de operadores de creación y destrucción que resultó natural definir corresponde a un álgebra de conmutadores (de bosones).

Lo anterior debe, sin embargo, hacerse con cierta reserva: nuestra construcción es válida en el gauge en que  $\partial_i A^i = 0$ , esto implica que en el espacio de momentos debe cumplirse  $\vec{k} \cdot \vec{A}(\vec{k}) = 0$ . Recordemos en este punto que no se pueden fijar de manera arbitraria las 3 componentes del vector que representa la función de onda como si fuera un vector cualquiera. Además, no se puede separar momento cinético de spin. Como el fotón se mueve con la velocidad de la luz, no existe un sistema en reposo en el que pueda identificarse al spin como el momento angular total. Vimos que el vector de polarización  $\vec{e}$  representa la “parte espinorial” de la función de onda y en ese sentido hablamos de spin 1 del fotón.

En la figura siguiente mostramos nuevamente la base habitual que se elige para el vector de polarización,



También se ha representado en la figura una rotación infinitesimal  $\delta\phi$  alrededor de  $\vec{k}$ . Consideremos las componentes levógira y dextrógira de la polarización (componentes de polarización circular), definidos según

$$\vec{\epsilon}^{(\pm)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{\epsilon}^{(1)} \pm i\vec{\epsilon}^{(2)}) \quad (22.17)$$

La normalización de  $\vec{\epsilon}^{(\pm)}$  asegura que  $|\vec{\epsilon}^{(\pm)}|^2 = 1$ . Una rotación alrededor del eje  $\vec{k}$  deja invariante esta condición por lo que podemos escribir, para el caso de una tal rotación con ángulo infinitesimal  $\delta\phi$ ,

$$\vec{\epsilon}^{(\pm)r} = \exp(i\delta\phi)\vec{\epsilon}^{(\pm)} \approx \vec{\epsilon}^{(\pm)} \mp i\delta\phi\vec{\epsilon}^{(\pm)} \quad (22.18)$$

Ahora bien, recordando que el generador de rotaciones alrededor del eje  $z$  es  $J_z$ , podemos escribir

$$\epsilon^{(\pm)r} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\delta\phi\right)\epsilon^{(\pm)} = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\delta\phi\right)\epsilon^{(\pm)} \quad (22.19)$$

De comparar (22.18) y (22.19) resulta que puedo interpretar al  $\pm$  como las proyecciones de momento angular  $\pm\hbar$  (no hay  $m_z = 0$ ). O sea que es razonable asignar spin 1 al fotón.

Basados en lo anterior, podemos escribir operadores de creación en la forma

$$\hat{a}_{\vec{k}\pm}^\dagger = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_{\vec{k}1}^\dagger \mp i\hat{a}_{\vec{k}2}^\dagger) \quad (22.20)$$

## Emisión y absorción de fotones por un átomo

Estamos ahora en condiciones de tratar el problema de absorción y emisión de radiación por un átomo de manera verdaderamente cuántica. Es decir, tomando también al campo de radiación en el contexto de la segunda cuantificación.

Vamos a trabajar en la representación de Schrödinger en la que los operadores son independientes del tiempo. Es decir que  $\hat{A}_\mu = \hat{A}_\mu(\vec{x})$ . A diferencia de lo que hicimos en el caso libre, en que habíamos podido complementar la condición de Lorentz con la elección de  $A_0 = 0$  trabajando entonces en el gauge de Coulomb todose complica por una de las ecuaciones de Maxwell

$$\square A_\mu = j_\mu \quad (22.21)$$

que tiene un lado derecho no trivial por la existencia de la corriente  $j_\mu$  que representa la interacción de la materia (los electrones en el caso que discutiremos) con la radiación con una componente  $j_0$  en principio no nula. Y en particular, como  $j_0 \neq 0$  no podemos elegir  $A_0 = 0$  como habíamos hecho anteriormente. Para encarar esta situación procederemos de la siguiente manera:

- Todo vector puede descomponerse en una componente longitudinal  $\vec{V}_{//}$  (para el caso del campo de las ondas que tratamos, por ejemplo, esta componente fue tomada como la componente en la dirección  $\vec{k}$ ) y una perpendicular  $\vec{V}_\perp$  (que para las ondas de radiación es la del plano perpendicular a  $\vec{k}$ ).

El vector resultante puede escribirse como la suma del rotor de un vector  $V_\perp = \vec{\nabla} \wedge \vec{v}$  y el gradiente de un escalar  $\vec{V}_{//} = \vec{\nabla} \phi$ ,

$$V_\perp = \vec{\nabla} \wedge \vec{v}, \quad \vec{V}_{//} = \vec{\nabla} \phi \quad (22.22)$$

Vemos que dada esta definición, se tiene

$$\vec{\nabla} \cdot V_\perp = 0, \quad \vec{\nabla} \wedge \vec{V}_{//} = 0 \quad (22.23)$$



Luego, si descomponemos al potencial vector  $\vec{A}$  en sus partes transversa  $V_{\perp}$  de divergencia nula por ser un rotor y longitudinal  $A_{//}$  de rotor nulo por ser un gradiente, tendremos

$$\vec{A} = \vec{A}_{\perp} + \vec{A}_{//} \quad (22.24)$$

con

$$\vec{\nabla} \vec{A}_{\perp} = 0, \quad \vec{\nabla} \wedge \vec{A}_{//} = 0 \quad (22.25)$$

En tal caso el campo magnético solo dependerá de  $A_{\perp}$ ,

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}_{\perp} + 0 \Rightarrow \vec{B} = \vec{B}(\vec{A}_{\perp}) \quad (22.26)$$

O sea, que el campo magnético “no se entera” de la existencia de  $\vec{A}_{//}$ .

En cuanto al campo eléctrico, tenemos que en la ecuación de Maxwell  $\vec{\nabla} \vec{E} = \rho$  solo aparecerá la su componente paralela

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 + \vec{\nabla} \vec{E}_{//} = 4\pi\rho \Rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho \quad (22.27)$$

Las ecuaciones de Maxwell que ligán a  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$  y con  $\vec{j} = \vec{j}_{\perp} + \vec{j}_{//}$  toman la forma

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \wedge \vec{B}(\vec{A}_{\perp}) + \frac{\partial \vec{E}_{\perp}}{\partial t} &= 4\pi\vec{j}_{\perp} \\ \frac{\partial \vec{E}_{//}}{\partial t} &= 4\pi j_{//} \end{aligned} \quad (22.28)$$

De aquí concluimos que el campo  $E_{//}$  es creado por las cargas y corrientes mientras que el campo magnético solo depende de  $A_{\perp}$  y  $E_{//}$ . Es decir que para  $\vec{B}$  en ningún momento necesitamos hacer referencia a  $A_{//}$  para determinar cantidades físicas. Es por ello que, si se elige desde un principio el gauge de Coulomb,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \quad (22.29)$$

resulta que  $\vec{A}_{//}$  tiene rotor y divergencia nulos. Es decir, es idénticamente nulo (o una constante irrelevante). Lo tomaremos entonces como nulo. O sea que este caso  $\vec{A}_{//} = 0$  reemplaza a la condición  $A_0 = 0$  cuando discutimos la ecuación de ondas homogénea.

El hamiltoniano clásico de nuestro sistema completo (átomo y radiación) es

$$H = \sum_j \frac{1}{2m} \left( \vec{p}_j - \frac{e}{c} \vec{A}_\perp(\vec{x}_j) \right)^2 + \sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi} \frac{1}{|x_i - x_j|} - \sum_i \frac{Ze^2}{4\pi} \frac{1}{r_i} + H_{rad} \quad (22.30)$$

con

$$H_{rad} = \frac{1}{2} \int d^3x \left( (\vec{\nabla} \wedge \vec{A}_\perp)^2 + \frac{1}{c^2} \left( \frac{\partial \vec{A}_\perp}{\partial t} \right)^2 \right) \quad (22.31)$$

Proceder a la segunda cuantificación de este hamiltoniano implica promover  $\vec{p}_j, \vec{x}_j$  y  $\vec{A}_\perp$  a la categoría de operadores, dejando solamente a los potenciales coulombianos de repulsión entre los electrones y de atracción del núcleo (segundo y tercer términos en (22.30) como objetos clásicos. Podemos entonces reescribir (22.30) en la forma cuántica

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{rad} + \hat{H}_{int} \quad (22.32)$$

con

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_j \frac{1}{2m} (\hat{p}_j)^2 + \sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi} \frac{1}{|x_i - x_j|} - \sum_i \frac{Ze^2}{4\pi} \frac{1}{r_i} \\ \hat{H}_{rad} &= \frac{1}{2} \int d^3x \left( (\vec{\nabla} \wedge \hat{A}_\perp)^2 + \frac{1}{c^2} \left( \frac{\partial \hat{A}_\perp}{\partial t} \right)^2 \right) \\ \hat{H}_{int} &= \sum_j \left( \frac{e^2}{2mc^2} \hat{A}_\perp^2 - \frac{e}{2mc} \sum_j (\hat{p}_j \cdot \hat{A}_{\perp j} + \hat{A}_{\perp j} \cdot \hat{p}_j) \right) \end{aligned} \quad (22.33)$$

Si  $\hat{H}_{int}$  fuera nulo, las autofunciones del hamiltoniano podrían escribirse como

$$|\text{Atomo}\rangle \otimes |\text{radiación}\rangle \quad (22.34)$$

Aquí es natural identificar  $|\text{radiación}\rangle$  con un ket en el espacio de los números de ocupación de fotones,

$$|\text{radiación}\rangle = |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle \quad (22.35)$$

Podemos ahora pensar que  $\hat{H}_{int}$  produce, como perturbación, transiciones entre los niveles no perturbados descriptos por (22.34). Como

trabajaremos en la representación de Schrödinger en la que los operadores no dependen del tiempo, se trata de una perturbación constante pero como ya lo discutimos, puede ser tratada en el marco de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Dado que la perturbación corresponde a una constante de acoplamiento suficientemente pequeña,  $e^2/(\hbar c) \approx 1/137$ , calcular la primera corrección al problema libre es una buena aproximación por lo que trabajaremos al primer orden.

En términos de operadores de creación y aniquilación  $\hat{a}^\dagger$  y  $\hat{a}$  tendremos entonces una perturbación lineal en la que se crearán o destruirán fotones. Para obtener la probabilidad de transición entre un estado inicial  $i$  y uno final  $f$  utilizaremos la fórmula dada por la regla de oro que obtuvimos oportunamente,

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{H}_{int} | i \rangle|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i) \quad (22.36)$$

Supongamos estudiar un proceso de absorción de un fotón de impulso  $\hbar \vec{k}$  y polarización  $\alpha$ . En tal caso

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |\text{Atomo } A + n_{\vec{k}\alpha} \text{ fotones}\rangle \\ |f\rangle &= |\text{Atomo } B + (n_{\vec{k}\alpha} - 1) \text{ fotones}\rangle \end{aligned} \quad (22.37)$$

donde  $A$  indican el estado inicial del átomo y  $B$  el estado final luego de absorber un fotón. Es fácil entonces calcular

$$\begin{aligned} \langle B; n_{\vec{k}\alpha} - 1 | \hat{H}_{int} | A; n_{\vec{k}\alpha} \rangle &= \\ -\frac{e}{mc} \langle B; n_{\vec{k}\alpha} - 1 | \sum_{j=1}^N c \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega V}} a_{\vec{k}\alpha} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}_j) \vec{p}_j \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} | A; n_{\vec{k}\alpha} \rangle \end{aligned} \quad (22.38)$$

No aparece en esta fórmula el término del desarrollo que contiene el operador de creación  $\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^\dagger$  ya que su acción implicaría crear un estado con  $n_{\vec{k},\alpha} + 1$  fotones mientras que el bra que aparecería a la izquierda corresponde a  $n_{\vec{k},\alpha} - 1$  fotones. En contraste, el  $a_{\vec{k},\alpha}$  que sí debe ser incluido, actúa sobre el bra como uno de creación por lo que el producto en el espacio de número de fotones resulta ser 1 quedando

por calcular solamente el elemento de matriz atómico

$$\langle B; n_{\vec{k}\alpha} - 1 | \hat{H}_{int} | A; n_{\vec{k}\alpha} \rangle = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar n_{\vec{k}\alpha}}{2\omega V}} \sum_j \langle B | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}_j) \vec{p}_j \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} | A \rangle \quad (22.39)$$

El factor que multiplica el elemento de matriz atómico corresponde a la contribución de la radiación. El factor que aparecía multiplicando a la delta de Dirac en (22.36)

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{H}_{int} | i \rangle|^2 \delta(\epsilon_f - \epsilon_i)$$

Coincide con el que habíamos calculado de manera semiclásica en el que cuando elevábamos al cuadrado el elemento de matriz era en el caso semiclásico

$$\frac{4\pi^2 c}{\hbar \omega^2} I \quad (22.40)$$

con

$$I = \frac{\omega^2}{2\pi c} |\vec{\mathcal{A}}_0|^2 \quad (22.41)$$

Basta identificar a la amplitud clásica de la onda  $\vec{\mathcal{A}}_0$

$$\vec{\mathcal{A}}_0 \rightarrow \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar n_{\vec{k}\alpha}}{2\omega V}} \vec{\epsilon} \quad (22.42)$$

para que la fórmula que habíamos obtenido (14.30)

$$\mathcal{W}_{fi}^A = \frac{4\pi^2 c}{\hbar \omega^2} I |v_{fi}^\dagger|^2 \delta(E_i + \hbar\omega - E_f) \quad \text{Absorción} \quad (22.43)$$

coincida con la actual, en que la intensidad de la radiación es ahora proporcional al número  $n_k$  de fotones.

El cálculo para el caso de emisión de fotones se trata de manera análoga. Podemos representar el proceso para un átomo en el estado  $A$  de la siguiente manera

$$A + n_{\vec{k}\alpha} \longrightarrow B + (n_{\vec{k}\alpha} + 1) \quad (22.44)$$

En este caso, es el operador  $\hat{a}_{\vec{k}\alpha}^\dagger$  el que contribuye en la expansión pues actuando sobre el ket  $|A; n_{k\alpha}\rangle$  lo transformaría en  $|A; n_{k\alpha}+1\rangle$  *angle*. Se obtiene entonces

$$\langle B; n_{\vec{k}\alpha}+1 | \hat{H}_{int} | A; n_{\vec{k}\alpha} \rangle = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar(n_{\vec{k}\alpha}+1)}{2\omega V}} \sum_j \langle B | \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{x}_j) \vec{p}_j \cdot \vec{\epsilon}^{(\alpha)} | A \rangle \quad (22.45)$$

Notemos que en este caso, aún si  $n_{\vec{k}\alpha} = 0$  (es decir, cuando no hay fotones en el estado inicial) el átomo puede emitir un fotón. Se trata en tal caso de una emisión espontánea que es observable experimentalmente y que no puede obtenerse cuando se trata a la radiación de manera clásica. Cuando  $n_{\vec{k}\alpha} \neq 0$  habrá emisión inducida por los fotones de la radiación incidente.

La contribución de emisión espontánea corresponde a un fenómeno puramente cuántico que se obtiene limpiamente al tratar a la radiación de manera cuántica.

Los cálculos previos fueron hechos en 1916 por Einstein<sup>40</sup>. Estos resultados, que Einstein obtuvo en su incansable búsqueda de contradicciones de la mecánica cuántica tuvieron una confirmación trascendental a principios la década de 1950 cuando Charles Townes pudo generar experimentalmente luz amplificada por emisión de radiación estimulada con un aparato precursor de lo que hoy llamamos Laser. No pudo hacer este experimento en los laboratorios de llamados por entonces “Bell Laboratories” donde trabajaba porque los directivos no vieron una posible utilidad en su propuesta. Logró construir el aparato cuando pasó a trabajar en la academia (la Universidad de Columbia en New York) y por ello compartió el premio Nobel con los por entonces soviéticos Nikolay Basov and Alexander Prokhorov, que también trabajaban en instituciones académicas.

---

<sup>40</sup>Einstein, A., **18** (1916) 318 *Strahlungs-emission und -absorption nach der Quantentheorie*. Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft.  
Einstein, A., *Physikalische Zeitschrift*. **18** (1917) 121. “Zur Quantentheorie der Strahlung”

## Clase 22

### El principio de mínima acción en mecánica cuántica

Hace más de ochenta años Paul Dirac planteó la idea fundacional de lo que hoy llamamos el método de la integral funcional [26]-[27] para tratar la física cuántica.

La motivación original de Dirac fue la de entender el rol del principio de mínima acción en la mecánica cuántica. Quince años después Feynman [28] le puso caradura a la propuesta de Dirac haciendo que se volviera operativa y deviniera una herramienta fundamental para la teoría cuántica de campos.

Para entender el planteo de Dirac conviene señalar que habitualmente, en los cursos de mecánica cuántica, no se hace referencia al principio de mínima acción. Ciertamente se discuten principios variacionales a tiempo fijo, ligados a la formulación hamiltoniana, pero no aquellos en que se tiene en cuenta la dependencia temporal. En contraste, al estudiar la mecánica clásica sí se discute la evolución temporal y ello se hace a partir de la formulación lagrangiana.

En relación a las dos alternativas mencionadas arriba, es evidente que la formulación hamiltoniana es más apropiada para el caso estático. En efecto, las ecuaciones de Hamilton tienen la forma:

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \quad (22.1)$$

donde  $q_i$  ( $i = 1, 2, \dots, d$ ) son las coordenadas generalizadas en  $d = 3$  dimensiones espaciales,  $p_i$  los correspondientes impulsos generalizados

y  $H = H(p_i, q_i)$  es el hamiltoniano del sistema físico a estudiar. En el caso estático en que  $\dot{q}_i = \dot{p}_i = 0$  estas ecuaciones devienen

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial H}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, d \quad (22.2)$$

que no son otra cosa que las ecuaciones que determinan los extremos de  $H$  como funcional de  $p_i$  y  $q_i$ .

Para obtener ecuaciones de movimiento dependientes del tiempo (ecuaciones de Euler-Lagrange) en un marco variacional es necesario resolver las ecuaciones que extremen la acción como funcional de  $q_i$  y  $\dot{q}_i$  donde  $\dot{q}_i = dq/dt$  son velocidades generalizadas

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q_i, \dot{q}_i; t) \quad (22.3)$$

$$\delta S = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, d \quad (22.4)$$

Debe notarse que en el caso estático las variaciones no requieren, por razones obvias, condiciones en los instantes inicial y final mientras que en el caso dependientes del tiempo hay que imponer condiciones sobre  $\delta q(t)$  (habitualmente que  $\delta q(t)$  se anule en los extremos del intervalo temporal,  $t = t_1$  y  $t = t_2$ ).

Ambos principios variacionales, el estático y el dependiente del tiempo, tienen sus análogos cuánticos. El primero se traduce en el requerimiento de que los valores de expectación del hamiltoniano sean estacionarios. Esto lleva a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. En breve, se minimiza  $\hat{H}$  de la siguiente manera:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \int dV \psi^* \hat{H} \psi \quad (22.5)$$

con un vínculo sobre la norma de las funciones de onda

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int dV \psi^* \psi = 1 \quad (22.6)$$

El resultado de la variación es

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (22.7)$$

En lo que concierne al caso dependiente del tiempo una propuesta de Dirac parte de la siguiente funcional

$$S = \int dt \langle \psi; t | \left( i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H} \right) | \psi; t \rangle \quad (22.8)$$

para exigir que su variación se anule,  $\delta S = 0$ . Esto lleva a la tan honrada ecuación

$$i\hbar \frac{d|\psi; t\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi; t\rangle \quad (22.9)$$

Puede sentirse en la funcional  $S$  un vago “perfume” de la acción, en el sentido de que la acción clásica está ligada al hamiltoniano según la fórmula  $\int dt(p\dot{q} - H)$ .

La observación fundamental de Dirac es sin embargo otra. La función de onda que describe el estado de un sistema cuántico en el esquema de Schrödinger y en la representación de coordenadas se escribe como

$$\psi(q, t) = \langle q | \psi; t \rangle_S \quad (22.10)$$

(Por simplificación notacional hemos considerado una única coordenada espacial  $q$  pero todo lo que sigue vale en un número arbitrario de coordenadas,  $q_i = 1, 2, \dots$ ). Esta función de onda puede escribirse como

$$\psi(q, t) = A(q, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Phi(q, t)\right) \quad (22.11)$$

donde la amplitud  $A$  y la fase  $\Phi$  son funciones con valores en los reales, a las que pedimos que cambien “suavemente” al variar  $q$  y  $t$ .

Como  $\psi$  obedece la ecuación de Schrödinger, a partir de (22.9) la escribimos como

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(q, t) \quad (22.12)$$

se tiene de la ec. (22.11)

$$i\hbar \frac{\partial A(q, t)}{\partial t} - A(q, t) \frac{\partial \Phi(q, t)}{\partial t} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Phi\right) \hat{H} A \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Phi\right) \quad (22.13)$$

Ahora bien, dado  $\hat{H} = \hat{H}(\hat{p}, \hat{q})$  se tiene que como operadores  $\hat{q}$  y  $(\hbar/i)(d/dq)$  actuando sobre funciones  $f$  satisfacen

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Phi\right) \hat{q} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Phi\right) f &= \hat{q} f \\ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Phi\right) \hat{p} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Phi\right) f &= \left(\hat{p} + \frac{\partial \Phi}{\partial q}\right) f \end{aligned} \quad (22.14)$$



De este resultado vemos que podemos ver que los exponenciales del lado izquierdo del lado izquierdo de la igualdad hacen que  $\hat{p} \rightarrow \hat{p} + \partial\Phi/\partial q$  así que extendiendo (22.14) al caso de un desarrollo de  $\hat{H}(p, q)$  en potencias de  $\hat{p}$ , se tiene

$$\exp(-\frac{i}{\hbar}\Phi)\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})\exp(\frac{i}{\hbar}\Phi) = H(\hat{p} + \frac{\partial\Phi}{\partial q}, \hat{q}) \quad (22.15)$$

y entonces la igualdad (22.13) se puede escribir en la forma

$$i\hbar \frac{\partial A(q, t)}{\partial t} - A(q, t) \frac{\partial\Phi(q, t)}{\partial t} = \hat{H}(\hat{p} + \frac{\partial\Phi}{\partial q}, \hat{q})A \quad (22.16)$$

(notar que como  $A(q, t)$  no depende de  $p$  puede pasar a la derecha de  $\hat{H}$ )

En el límite clásico  $\hbar \rightarrow 0$ , el primer término en el lado izquierdo y el  $\hat{p} = \hbar i(d/dq)$  en el argumento de  $\hat{H}$  pueden ser despreciados y en tal caso la ecuación (22.16) se reduce a

$$-A(q, t) \frac{\partial\Phi(q, t)}{\partial t} = \hat{H}(\frac{\partial\Phi}{\partial q}, q)A(q, t) \quad (22.17)$$

o, teniendo en cuenta que ya no hay derivadas actuando sobre  $A(q, t)$  se las puede simplificar resultando

$$-\frac{\partial\Phi(q, t)}{\partial t} = H(\frac{\partial\Phi}{\partial q}, q) \quad (22.18)$$

que no es otra cosa que la ecuación de Hamilton-Jacobi siempre que identifiquemos a  $\Phi$  como la acción clásica  $S = S(q, t)$  tomada como función de las coordenadas y el tiempo<sup>41</sup> y que identifiquemos al momento  $p$  con  $\partial S/\partial q$ , como corresponde en la formulación de Hamilton-Jacobi de la mecánica clásica.

En conclusión. se puede escribir a la ec.(22.11) en la forma

$$\psi(q, t) = A \exp(\frac{i}{\hbar}S) \quad (22.19)$$

---

<sup>41</sup>Por ejemplo, haciendo que  $q(t_2) = q$  sea la coordenada de un punto arbitrario y llamando  $t_2 = t$ .

y a la ecuación (22.18) como

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H\left(\frac{\partial S}{\partial q}, q\right) \quad (22.20)$$

Esta es la derivación que planteó Dirac en la década de 1930. Luego indicó que dado que a nivel clásico la trayectoria que tiene la partícula corresponde a un extremo de la acción  $S$  y que el concepto de trayectoria deja de tener sentido a nivel cuántico, la dinámica cuántica debería poder describirse con un objeto relacionado con la expresión (22.19)

$$\psi(q, t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$$

siempre que se tuviera en cuenta algo así como una suma que incluyera no solo el (o los) extremos de  $S$  sino también otras soluciones, otros “caminos” (*paths* en inglés) entre los puntos inicial y final de la trayectoria extremal. Si bien estas otras trayectorias posibles no extreman la acción clásica, a nivel cuántico deberían contribuir.

La propuesta de Dirac fue entonces que la función de onda cuántica (no solo en el límite clásico) debería ser descrita por una “suma sobre todas las trayectorias

$$\psi(q, t) \sim \sum_{\text{caminos}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \quad (22.21)$$

Como señalamos *ut supra* fue Feynman quien transformó esta presunción en una herramienta operativa dando una “receta” precisa de cómo realizar de manera explícita la suma sobre posibles caminos bajo la forma de una integral (integral de caminos o, como él la bautizó en inglés, una “path integral”).

Puede considerarse que el paso que dieron Dirac y Feynman es equivalente al de Arquímedes en el siglo 3 AC cuando calculó el área bajo una parábola inscribiendo un número muy grande de polígonos muy pequeños dentro y fuera de las curvas con lo cual se adelantó al cálculo diferencial que desarrollaron Leibniz y Newton 20 siglos después.

## La construcción de Feynman

Por simplicidad continuaremos considerando un sistema cuántico con una única coordenada  $q$  por lo que los grados de libertad del espacio

de fases serán solo 2 pero al final de esta sección veremos que la generalización a ms dimensiones espaciales es trivial.

Recordemos que en el esquema de Schrödinger los estados físicos de un sistema cuántico están descriptos por funciones de onda que son vectores (en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ ) que dependen del tiempo al estudiar la evolución (la dinámica) del sistema,

$$|\psi(t)\rangle_S \quad (22.22)$$

En cuanto a los operadores relacionados con las cantidades observables son independientes del tiempo,

$$\hat{O}_S(t) = \hat{O}_S(t_0) = \hat{O}_S \quad (22.23)$$

De hecho el conjunto completo de operadores que conmutan y que usamos para identificar un estado dado del sistema son “constantes de movimiento”.

En lo que respecta al esquema de Heisenberg, los estados físicos no evolucionan en el tiempo

$$|\psi; t\rangle_H = |\psi; t_0\rangle_H \quad (22.24)$$

y son los operadores quienes dan cuenta de la evolución temporal del sistema,

$$\hat{O}_H = \hat{O}_H(t) \quad (22.25)$$

La equivalencia de ambos esquemas se originan en el hecho de que las cantidades de interés a nivel cuántico corresponden a valores de expectación y justamente estos valores coinciden bajo ciertas condiciones que relacionan a los dos esquemas

$${}_H\langle\psi|\hat{O}_H|\psi\rangle_H = {}_S\langle\psi|\hat{O}_S|\psi\rangle_S \quad (22.26)$$

Esto asegura que, desde un punto de vista físico, la predicción para la medida de un observable asociado con el operador  $\hat{O}$  es independiente de la elección de esquema, lo que es coherente con el hecho de que los autovalores (único resultado posible de una medida experimental) son

independientes del esquema utilizado. Todo lo anterior se vuelve consistente al construir la transformación unitaria que relaciona funciones de onda y operadores en ambos esquemas.

Sea  $|q\rangle$  una autofunción del autovalor posición  $\hat{Q}$ . En el esquema de Heisenberg se tiene

$$\hat{Q}_H(t)|q;t\rangle_H = q|q;t\rangle_H \quad (22.27)$$

Como los operadores en este esquema son dependientes del tiempo, las correspondientes autofunciones lo serán. En cuanto al esquema de Schrödinger, ocurre justamente lo contrario: como los operadores son independientes del tiempo, las correspondientes autofunciones también lo serán. Por supuesto, la dependencia temporal de la combinación lineal de autofunciones que describe un estado dado del sistema viene dada por los coeficientes del desarrollo en serie de ese estado.

El Hamiltonian  $\hat{H}$  (para un sistema aislado), generador de traslaciones en el tiempo, es independiente del tiempo en ambos esquemas, ( $\hat{H}_H = \hat{H}_S$ ) y la ecuación de Heisenberg para  $\hat{Q}_H$  será

$$[\hat{H}, \hat{Q}_H(t)] = -i\hbar \dot{\hat{Q}}_H(t) \quad (22.28)$$

Esta ecuación se vuelve, en el esquema Schrödinger una ecuación de evolución temporal para la función de onda

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |q(t)\rangle_S = \hat{H} |q(t)\rangle_S \quad (22.29)$$

Finalmente, consignemos la relación que existe entre vectores de estado y entre operadores en uno y otro esquema.

$$\begin{aligned} |q;t\rangle_H &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) |q(t)\rangle_S \\ \hat{Q}_H(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \hat{Q}_S \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \end{aligned} \quad (22.30)$$

Consideremos ahora un sistema cuántico que en el instante  $t = t_1$  está descrito en el esquema de Heisenberg por un cierto vector de estado

$|q_1; t_1\rangle_H$ <sup>42</sup>. La amplitud de probabilidad de encontrar al sistema en un instante posterior  $t = t_2$  en otro estado  $|q_2; t_2\rangle_H$  está dada por

$$Z_{1\rightarrow 2} = {}_H \langle q_2; t_2 | q_1; t_1 \rangle_H \quad (22.31)$$

Usando (22.30) podemos escribir esta misma amplitud en el esquema de Schrödinger

$$Z_{1\rightarrow 2} = {}_S \langle q(t_2) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_2 - t_1)\right) | q(t_1) \rangle_S \quad (22.32)$$

Consideremos un intervalo  $t_2 - t_1 = \epsilon$  muy pequeño y escribamos para simplificar la notación  $q(t_1) = q_1$  y  $q(t_2) = q_2$ . Además, dejaremos de incluir la letra  $S$  que usábamos hasta aquí para remarcar que se trataba del esquema de Schrödinger. Tenemos entonces

$$Z_{1\rightarrow 2} = \langle q_2 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon | q_1 \right) = \langle q_2 | q_1 \rangle - \frac{i}{\hbar} \epsilon \langle q_2 | \hat{H} | q_1 \rangle + O(\epsilon^2) \quad (22.33)$$

Ahora bien, se tiene que

$$\begin{aligned} [\hat{q}, \hat{p}] &= \hbar i \\ \hat{p} | p \rangle &= p | p \rangle \\ \langle q | p \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p q\right) \\ \int | q \rangle \langle q | d q &= 1 = \int | p \rangle \langle p | d p \end{aligned} \quad (22.34)$$

de manera que podemos escribir

$$Z_{1\rightarrow 2}^\epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \langle q_2 | p_1 \rangle \langle p_1 | q_1 \rangle d p_1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon \int_{-\infty}^{\infty} \langle q_2 | p_1 \rangle \langle p_1 | \hat{H} | q_1 \rangle d p_1 \quad (22.35)$$

o

$$\begin{aligned} Z_{1\rightarrow 2}^\epsilon &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (q_2 - q_1) p_1\right) \frac{d p_1}{2\pi\hbar} - \\ &\quad \frac{i}{\hbar} \epsilon \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (q_2 - q_1) p_1\right) h(p_1, q_1) \frac{d p_1}{2\pi\hbar} \end{aligned} \quad (22.36)$$

---

<sup>42</sup>El uso del “;” que antecede al tiempo  $t_1$  indica que un dado vector de estado “1” es el mismo durante todo el tiempo

donde hemos anotado

$$h(p_1, q_1) = \sqrt{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_1 q_1\right) \langle p_1 | \hat{H} | q_1 \rangle \quad (22.37)$$

Puede verse muy fácilmente que  $h(p, q)$  no es otra cosa que el hamiltoniano clásico. En efecto, para una partícula de masa  $m$  sometida a un potencial  $V(q)$ , el hamiltoniano cuántico es  $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{q})$  y de allí resulta que  $h(p, q)$  toma la forma

$$h(p, q) = \sqrt{2\pi\hbar} \left( \frac{p^2}{2m} + V(q) \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p q\right) \langle p | q \rangle = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (22.38)$$

Al orden  $\epsilon$  en que trabajamos podemos escribir en lugar de (22.36)

$$Z_{1 \rightarrow 2}^\epsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} ((q_2 - q_1)p_1 - \epsilon h(p_1, q_1))\right) \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \quad (22.39)$$

Para el caso de un intervalo finito  $(t_i, t_f)$  podemos usar el resultado anterior como sigue. Consideramos

$$t_0 = t_i < t_1 < t_2 < \dots < t_{N-1} < t_N = t_f \quad (22.40)$$

y hacemos

$$t_n - t_{n-1} = \epsilon \quad \forall n \quad (22.41)$$

Tendremos luego

$$\begin{aligned} Z_{i \rightarrow f}^N &= \langle q_f | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i)\right) | q_i \rangle = \\ &\int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} \langle q_f | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_{N-1})\right) | q_{N-1} \rangle \times \\ &\langle q_{N-1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_{N-1} - t_{N-2})\right) | q_{N-2} \rangle \dots \langle q_1 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_1 - t_i)\right) | q_i \rangle \end{aligned} \quad (22.42)$$

o

$$\begin{aligned} Z_{i \rightarrow f}^N &= \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \frac{dp_2}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \\ &\exp\left(\frac{i}{\hbar} ((q_f - q_{N-1})p_N + (q_{N-1} - q_{N-2})p_{N-1} + \dots + (q_1 - q_i)p_1)\right) \\ &\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon (h(p_N, q_{N-1}) + h(p_{N-1}, q_{N-2}) + \dots + h(p_1, q_i))\right) \end{aligned} \quad (22.43)$$

Definimos entonces

$$Z_{i \rightarrow f} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} Z_{i \rightarrow f}^N \quad (22.44)$$

El argumento en la primera exponencial de la ec.(22.52) puede ser escrito, en los límites  $N \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$  en la forma

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \left( \frac{q_f - q_{N-1}}{\epsilon} p_N + \frac{q_{N-1} - q_{N-2}}{\epsilon} p_{N-1} + \dots + \frac{q_1 - q_i}{\epsilon} p_1 \right) = \int_{t_i}^{t_f} \dot{q} p dt \quad (22.45)$$

En lo que respecta a la segunda exponencial, su argumento puede escribirse como  $\int h(p, q) dt$  de manera que resulta natural escribir de manera compacta

$$Z_{i \rightarrow f} = \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p \dot{q} - h(p, q)) dt \right) \quad (22.46)$$

donde  $\mathcal{D}p \mathcal{D}q$  es una manera abreviada de anotar

$$\mathcal{D}p \mathcal{D}q = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \right) \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \quad (22.47)$$

Definida de esta manera,  $\mathcal{D}p \mathcal{D}q$  es lo que en matemática se conoce como medida de Liouville sobre  $t$ .

Nótese que las integrales en (22.45) o (22.53) tienen que hacerse respetando que  $q(t_i) = q_i$  and  $q(t_f) = q_f$ . En contraste, no hay condiciones sobre los impulsos  $p$  que deben ser integrados en el intervalo  $(-\infty, \infty)$ . Note también que hay una integral más en  $p$  que en  $q$ .

No debe olvidarse que para calcular explícitamente  $Z_{i \rightarrow f}$  usando la ec.(22.53),

$$Z_{i \rightarrow f} = \langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p \dot{q} - h(p, q)) dt \right) \quad (22.48)$$

debemos por ahora hacer un número infinito de integrales en el espacio de las fases  $(p, q)$ . En otras palabras, debemos integrar sobre todas las trayectorias que satisfagan que  $q(t_i) = q_i$  and  $q(t_f) = q_f$ . Como  $h(p, q)$  no es otra cosa que el hamiltoniano clásico, vemos que el argumento en

el exponencial (22.48) está ligado al Lagrangiano de la manera habitual  $L = p\dot{q} - h$ . Discutiremos este punto en detalle más adelante.

Cada integral incluida en (22.48) puede ser interpretada como sigue: el argumento en el exponencial, que llamamos  $S$ , es en realidad una suma,

$$S = S_{N,N-1} + S_{N-1,N-2} + \dots + S_{1,i} \quad (22.49)$$

donde cada término está dado por

$$S_{n,n-1} = \epsilon \left( p_n \frac{q_n - q_{n-1}}{\epsilon} - h(p_n, q_n) \right) \quad (22.50)$$

Luego  $S$  incluye una suma sobre los caminos quebrados indicados en la figura 1. Integrar sobre todos los valores posibles de  $q$  implica tener en cuenta todos los caminos posibles compatibles con las condiciones inicial y final fijadas. En cuanto a las integrales en  $p$ , damos una representación de cómo se organizan en la figure 2.

Una formulación más rigurosa desde el punto de vista matemático implica restringir las funciones  $q(t)$  que contribuyen a la “integral de caminos” (22.48) a funciones Lipschitzianas de orden  $1/2$ , lo que implica que

$$|q(t') - q(t)| < K(t' - t)^{\frac{1}{2}}, \quad t' > t \quad (22.51)$$

con  $K$  una constante positiva

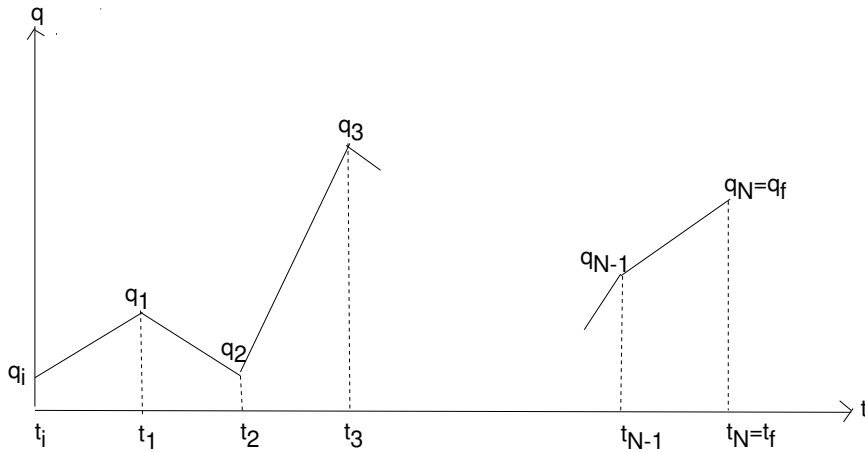




Fig. 1

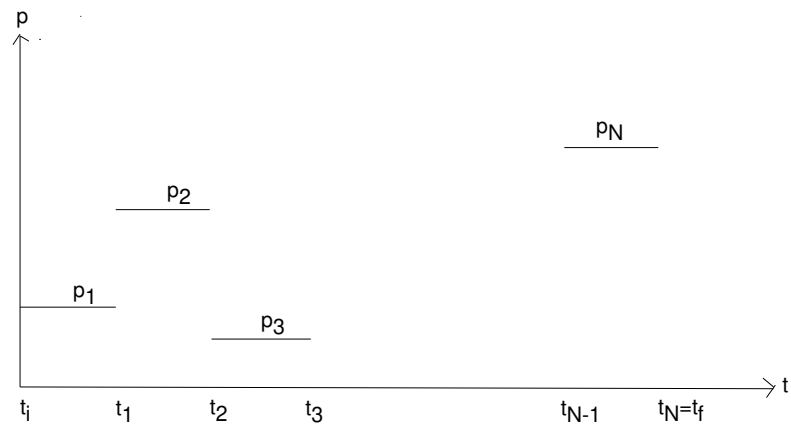


Fig. 2

## Repaso

En la clase pasada vimos que la amplitud de probabilidad de transición entre un estado cuántico inicial  $|q(t_i)\rangle$  y uno final  $|q(t_f)\rangle$  podía escribirse como un producto infinito de integrales,

$$\begin{aligned} Z_{i \rightarrow f} \equiv & \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \frac{dp_2}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \\ & \exp\left(\frac{i}{\hbar} ((q_f - q_{N-1})p_N + (q_{N-1} - q_{N-2})p_{N-1} + \dots + (q_1 - q_i)p_1)\right) \\ & \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon (h(p_N, q_{N-1}) + h(p_{N-1}, q_{N-2}) + \dots + h(p_1, q_i))\right) \end{aligned} \quad (22.52)$$

Multiplicando y dividiendo por el intervalo de tiempo  $\epsilon$  pudimos escribir argumento en la primera exponencial de la ec.(22.52) puede ser escrito, en los límites  $N \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$  como la integral de derivadas temporales  $\dot{q}$  y en lo que respecta a la segunda exponencial, su argumento puede escribirse como  $\int h(p, q) dt$  de manera que, simplifícadamente terminamos escribiendo

$$Z_{i \rightarrow f} = \langle q_f; t_f | q_i; t_i \rangle = \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - h(p, q)) dt\right) \quad (22.53)$$

donde  $\mathcal{D}p \mathcal{D}q$  es una manera abreviada de anotar

$$\mathcal{D}p \mathcal{D}q = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \right) \frac{dp_N}{2\pi\hbar} \quad (22.54)$$

Definida de esta manera,  $\mathcal{D}p \mathcal{D}q$  es lo que en matemática se conoce como medida de Liouville sobre  $t$ .

Definimos entonces

$$Z_{i \rightarrow f} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} Z_{i \rightarrow f}^N \quad (22.55)$$

Definida de esta manera,  $\mathcal{D}p \mathcal{D}q$  es lo que en matemática se conoce como medida de Liouville sobre  $t$ .

## Integrales Gaussianas

Ahora veremos como se pueden hacer cambios de variable sin necesidad de comenzar con el producto de infinitas integrales. Partiremos de una

integral funcional de la forma

$$I[\hat{A}, \hat{B}] = \int \mathcal{D}q \exp \left( -\frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} \left( q(t) \hat{A}(t) q(t) - 2\hat{B}(t) q(t) \right) d\tau \right) \quad (22.56)$$

Aquí  $\hat{A}(t)$  y  $\hat{B}(t)$  pueden ser funciones (o matriciales si las dimensiones espaciales son  $d > 1$ ) pero también pueden ser operadores como por ejemplo

$$\hat{A} = -m \frac{d^2}{dt^2} \quad (22.57)$$

En lo que sigue, y por razones que se aclararán más adelante, restringiremos a  $B$  al caso de funciones (o matrices) y solo  $A$  podrá tener el carácter de operador. Nótese que en términos de este operador, el término cuadrático en el argumento del exponencial coincide, si se integra por partes, con la energía cinética de una acción euclídea.

$$\frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} q \hat{A}(t) q dt = \int_{t_i}^{t_f} \frac{m \dot{q}^2}{2} dt \quad (22.58)$$

siempre que  $q$  y  $\dot{q}$  satisfagan condiciones inicial y final adecuadas.

Consideremos ahora la siguiente identidad

$$\int_{t_i}^{t_f} (q \hat{A}(t) q - 2B(t) q) dt = \int_{t_i}^{t_f} (q - \bar{q}) \hat{A}(q - \bar{q}) dt + \int_{t_i}^{t_f} C dt \quad (22.59)$$

que es válida si elegimos  $\bar{q}$  and  $C$  como

$$B = -\hat{A} \bar{q} = -\bar{q} \hat{A} \quad (22.60)$$

$$C = -\bar{q} \hat{A} \bar{q} \quad (22.61)$$

De la ec.(23.54) se tiene

$$\bar{q} = \bar{q}(t) = \int_{t_i}^{t_f} A^{-1}(t, t') B(t') dt' \quad (22.62)$$

donde  $A^{-1}$  es la inversa de  $\hat{A}$ ,

$$\hat{A}(\tau) A^{-1}(t, t') = \delta(t - t') \quad (22.63)$$

Cuando  $\hat{A}(t) = A(t)$  es simplemente una función se tiene

$$A^{-1}(t, t') = \frac{1}{A(t)} \delta(t - t') \quad (22.64)$$

Cuando  $\hat{A}(t)$  es un operador como por ejemplo (23.51),  $A^{-1}(t, t')$  no será otra cosa que la función de Green asociada. Teniendo en cuenta esto, la manera explícita de escribir a la ec.(23.55) será

$$C = - \int_{\tau_i}^{\tau_f} B(t) A^{-1}(t, t') B(t') dt dt' \quad (22.65)$$

Luego, usando la identidad (23.53) y la relación (23.57) la integral funcional gaussiana (23.50) puede escribirse como

$$\begin{aligned} I[\hat{A}, \hat{B}] &= \exp \left( \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} B(t) A^{-1}(t, t') B(t') dt dt' \right) \\ &\times \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} \left( q(t) - \bar{q}(t) \right) \hat{A}(t) \left( q(t) - \bar{q}(t) \right) dt \right) \end{aligned} \quad (22.66)$$

Si procedemos al cambio de variables

$$q(t) \rightarrow q'(t) = q(t) - \bar{q}(t) \quad (22.67)$$

cuyo jacobiano es trivial

$$\mathcal{D}q = \mathcal{D}q' \quad (22.68)$$

la integración funcional en la segunda línea de la eq.(23.60) se puede escribir como una simple gaussiana y toda la dependencia en el término lineal  $B$  resulta factoreado,

$$\begin{aligned} I[\hat{A}, \hat{B}] &= \exp \left( \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} B(t) A^{-1}(t, t') B(t') dt dt' \right) \times I_0[\hat{A}] \\ I_0[\hat{A}] &= \int \mathcal{D}q' \exp \left( \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} q'(t) \hat{A}(t) q'(t) dt \right) \end{aligned} \quad (22.69)$$

## Ejemplos

1- Consideremos el caso más simple  $\hat{H} = \hat{H}(\hat{q})$  (i.e. sin término cinético en el hamiltoniano). Luego  $h = h(q)$  y se tiene

$$Z_{i \rightarrow f} = \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - h(q)) dt \right) \quad (22.70)$$

La integración sobre los  $p$  es trivial

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}p \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int p \dot{q} dt \right) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{i=1}^N \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \times \\ &\quad \exp \left( \frac{i}{\hbar} (p_1(q_1 - q_i) + \dots + p_N(q_f - q_{N-1})) \right) \\ &= \delta(q_1 - q_i) \delta(q_2 - q_1) \dots \delta(q_f - q_{N-1}) \end{aligned} \quad (22.71)$$

y de aquí se sigue que también la integración sobre los  $q$  se puede hacer trivialmente

$$\begin{aligned} Z_{i \rightarrow f} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int dq_1 dq_2 \dots dq_{N-1} \delta(q_1 - q_i) \delta(q_2 - q_1) \dots \\ &\quad \delta(q_f - q_{N-1}) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \epsilon (h(q_1) + h(q_2) + \dots + h(q_{N-1})) \right) = \\ &\quad \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} N \epsilon h(q_i) \right) \delta(q_i - q_f) \end{aligned} \quad (22.72)$$

Escribiendo

$$N\epsilon = N \frac{t_f - t_i}{N} = t_f - t_i \quad (22.73)$$

se tiene finalmente

$$Z_{i \rightarrow f} = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} (t_f - t_i) h(q_i) \right) \delta(q_i - q_f) \quad (22.74)$$

Este resultado fue obtenido a partir de  $Z_{i \rightarrow f}$  expresado como una integral sobre caminos. Pero si recordamos que como punto de partida definimos  $Z_{i \rightarrow f}$  como

$$Z_{i \rightarrow f} = \langle q_f | \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t_f - t_i) \right) | q_i \rangle \quad (22.75)$$

y lo aplicamos a  $\hat{H} = \hat{H}(\hat{q})$  se obtiene precisamente el mismo resultado as in (22.74),

$$Z_{i \rightarrow f} = \langle q_f | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_f - t_i) | q_i \rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (t_f - t_i) h(q_i)\right) \delta(q_i - q_f) \quad (22.76)$$

2- Un caso más interesante es el de una partícula de masa  $m$  con energía cinética sometida a un potencial  $V(q)$ ,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}) \quad (22.77)$$

En este caso, como el hamiltoniano depende de  $\hat{p}$  la función  $h$  depende de  $p$  además de  $q$ ,

$$h(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (22.78)$$

Como lo haremos de ahora en más, indicaremos los  $N$  cambios y las  $N$  diferenciales así

$$\begin{aligned} p' &= p - m\dot{q} \\ \mathcal{D}p' &= \mathcal{D}p \end{aligned} \quad (22.79)$$

con lo que el cambio completo se escribirá como

$$\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - \frac{p^2}{2m}) dt = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{p'^2}{2m} dt + \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m\dot{q}^2}{2} dt \quad (22.80)$$

Luego,

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}p \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - \frac{p^2}{2m}) dt\right) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m\dot{q}^2}{2} dt\right) \times \\ &\int \mathcal{D}p' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{p'^2}{2m} dt\right) \end{aligned} \quad (22.81)$$

Si llamamos  $\mathcal{N}^{-1}(t_1, t_2)$  a la integral en el lado derecho de la ec.(22.81), que produce un factor que depende de los instantes inicial y final pero no de las correspondientes condiciones  $q(t)$ ,

$$\mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) = \int \mathcal{D}p' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{p'^2}{2m} dt\right) \quad (22.82)$$

podemos escribir

$$Z_{i \rightarrow f} = \mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \left( \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q) \right) dt \right) \quad (22.83)$$

o

$$Z_{i \rightarrow f} = \mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} L(q, \dot{q}) dt \right) \quad (22.84)$$

donde  $L(q, \dot{q})$  es el Lagrangiano del sistema.

Hemos obtenido en este cálculo específico el resultado sugerido por Dirac (compárese con el de la ec.(22.21))

$$Z_{i \rightarrow f} = \mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q] \right) \quad (22.85)$$

si interpretamos que

$$\text{Dirac} : \sum_{\text{paths}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q] \right) \rightarrow \text{Feynman} : \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q] \right) \quad (22.86)$$

La amplitud de probabilidad es calculada entonces como una suma sobre todas las trayectorias (o *camino*s) compatibles con la condición inicial  $q(t_i) = q_i$  y la final  $q(t_f) = q_f$  para la coordenada  $q$ . Para ver el rol de la trayectoria clásica entre todas las trayectorias posibles incluidas en la integración debemos notar que en el límite (clásico)  $\hbar \rightarrow 0$  al variar  $q$  el exponencial oscila borrando todas las contribuciones salvo aquellas en la que  $S$  es prácticamente constante. Esta condición no es otra que  $\delta S / \delta q = 0$ . Es decir, en el límite  $\hbar \rightarrow 0$  la trayectoria clásica domina la integral de caminos.

De manera más precisa esto puede verse si se recuerda el método de la *fase estacionaria* para calcular de manera aproximada una integral como la escrita más abajo. Cuando el parámetro  $a$  en el argumento de la exponencial se hace muy pequeño este método establece que

$$\lim_{a \rightarrow 0} \int_A^B dx \exp \left( \frac{i}{a} f(x) \right) \simeq \lim_{a \rightarrow 0} \exp \left( \frac{i}{a} f(x_0) \right), \quad x_0 \in [A, B] \quad (22.87)$$

$$f'(x_0) = 0 \quad (22.88)$$

Suponiendo que este resultado vale para la integral de caminos (22.85) se tiene

$$\begin{aligned}\lim_{\hbar \rightarrow 0} Z_{i \rightarrow f} &= \mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) \lim_{\hbar \rightarrow 0} \int \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \\ &\simeq \mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) \lim_{\hbar \rightarrow 0} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q_0]\right),\end{aligned}\quad (22.89)$$

$$\frac{\delta S}{\delta q}(q_0) = 0 \quad (22.90)$$

Vemos que, en contraste con lo que sucede con la mecánica clásica, en la que solo el extremo de  $S$  determina el “estado físico” del sistema, en mecánica cuántica se necesita utilizar toda la información encerrado en  $S$ , no solo el de la función y su variación primera.

Dejamos como ejercicio el cálculo de la constante  $\mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i)$  pero a continuación adelantamos su resultado

$$\mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) = \int \mathcal{D}p' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{p'^2}{2m} dt\right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN \exp(-\frac{i\pi}{2})}{2\pi\hbar(t_f - t_i)}\right)^{N/2} \quad (22.91)$$





# Clase 23

## El Principio de Superposición

Dado un sistema cuántico con hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V[\hat{q}] \quad (23.1)$$

hemos probado que la amplitud de probabilidad para la transición de un estado  $|q_i\rangle$  en  $t = t_i$  a un estado  $|q_f\rangle$  en  $t = t_f$  puede escribirse como una integral funcional (22.85),

$$\begin{aligned} Z_{i \rightarrow f} &= \mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \left( \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q) \right) dt \right) \\ &= \mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q; t_i, t_f] \right) \end{aligned} \quad (23.2)$$

con  $\mathcal{N}$  dada por la ec.(22.91)

$$\mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) = \int \mathcal{D}p' \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{p'^2}{2m} dt \right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{mN \exp(-\frac{i\pi}{2})}{2\pi\hbar(t_f - t_i)} \right)^{N/2} \quad (23.3)$$

En términos de  $Z_{i \rightarrow f}$ , la expresión matemática del principio de superposición cuántico es

$$Z_{i \rightarrow f} = \int Z_{i \rightarrow t_0} Z_{t_0 \rightarrow f} dq_{j_0} \quad (23.4)$$

donde  $t_i < t_0 < t_f$  y  $q_{j_0} = q(t_0)$ .

Vamos ahora a probar esta importante identidad. Para ello hacemos una partición del intervalo temporal tal que  $t_0$  coincida con uno de los

puntos de la misma. Podemos entonces escribir la ec.(23.4) en la forma

$$\int \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q; t_i, t_f]\right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dq_j \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q_i, q_1, \dots, q_{j_0}, \dots, q_f]\right) \quad (23.5)$$

donde hemos utilizado una notación obvia para indicar los distintos términos que contribuyen a la acción cuando se la escribe en términos de la partición  $S[q_i, q_1, q_2, \dots, q_{j_0}, \dots, q_f]$ . Se hace así evidente que podemos separar las contribuciones de los términos correspondientes a  $(t_i, t_0)$  y  $(t_0, t_f)$ , con  $t_0$  jugando de instante final de una de las dos contribuciones e inicial de la otra

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q; t_i, t_f]\right) &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_{j_0} \left( \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{j=1}^{j_0-1} \int_{-\infty}^{\infty} dq_j \right. \\ &\quad \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q_i, q_1, q_2, \dots, q_{j_0}]\right) \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{j=j_0+1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dq_j \\ &\quad \left. \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q_{j_0}, \dots, q_f]\right) \right) \end{aligned} \quad (23.6)$$

Podemos escribir esta expresión en forma compacta como

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q; t_i, t_f]\right) &= \int_{-\infty}^{\infty} dq_{j_0} \left( \int \mathcal{D}q \frac{i}{\hbar} S[q; t_i, t_0] \right) \\ &\quad \int \mathcal{D}q \frac{i}{\hbar} S[q; t_0, t_f] \end{aligned} \quad (23.7)$$

Recordando que  $\mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i)$  estaba dada por una integral similar solo que de la energía cinética podemos aplicar el mismo procedimiento resultando

$$\mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) = \int \mathcal{D}p' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{p'^2}{2m} dt\right) = \mathcal{N}^{-1}(t_f, t_0) \mathcal{N}^{-1}(t_0, t_i) \quad (23.8)$$

de manera que finalmente tendremos la fórmula (23.4) que, como dijimos, representa la expresión matemática del principio de superposición de la mecánica cuántica.

$$Z_{i \rightarrow f} = \int_{-\infty}^{\infty} dq_{j_0} Z_{i \rightarrow t_0} Z_{t_0 \rightarrow f} \quad (23.9)$$

## Elementos de matriz

En el análisis de un sistema cuántico deben calcularse elementos de matriz de operadores asociados a observables. Describiremos a continuación cómo se calculan estos elementos en el marco de la integral de caminos.

Sea el operador posición  $\hat{q}$  (como antes, trabajaremos con una única coordenada pero la generalización es inmediata). En el esquema de Heisenberg se tiene, en un dado instante  $t_0$ ,  $\hat{q}_H(t_0)$ , donde nuevamente elegimos a  $t_0$  como uno de los puntos de la partición, ( $t_i < t_0 < t_f$ ). como primer ejemplo calcularemos el elemento de matriz

$$\langle \hat{q}_H(t_0) \rangle \equiv \langle q_f; t_f | \hat{q}_H(t_0) | q_i; t_i \rangle \quad (23.10)$$

Empezamos por escribir

$$\begin{aligned} \langle \hat{q}_H(t_0) \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{j=1}^{N-1} \int dq_j \langle q_f; t_f | q_{N-1}; t_{N-1} \rangle \dots \\ &\langle q_{j_0+1}; t_{j_0+1} | q_{j_0}; t_{j_0} \rangle \langle q_{j_0}; t_{j_0} | \hat{q}_H(t_0) | q_{j_0-1}; t_{j_0-1} \rangle \dots \langle q_1; t_1 | q_i; t_i \rangle \end{aligned} \quad (23.11)$$

Ahora bien,

$$\langle q_{j_0}; t_{j_0} | \hat{q}_H(t_0) | q_{j_0-1}; t_{j_0-1} \rangle = q_{j_0} \langle q_{j_0}; t_{j_0} | q_{j_0-1}; t_{j_0-1} \rangle \quad (23.12)$$

Luego, excepto por este factor, las integrales en la ec.(23.11) coinciden con las que definen  $Z_{i \rightarrow f}$ . Luego, sin que repitamos los argumentos que nos llevaron a expresar la amplitud de probabilidad como una integral de camino es fácil ver que

$$\langle \hat{q}_H(t_0) \rangle = \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - h(p, q)) dt \right) q(t_0) \quad (23.13)$$

o, en el caso en que el hamiltoniano tiene la forma  $\hat{H}(p, q) = \hat{p}^2/2m + V(\hat{q})$  podemos integrar sobre  $p$  para llevar a la integral funcional a su forma lagrangiana

$$\langle \hat{q}_H(t_0) \rangle = \mathcal{N}^{-1}(t_i, t_f) \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q; t_i, t_f] \right) q(t_0) \quad (23.14)$$

En el caso de elementos de matriz *normalizados* escribiremos

$$\langle \hat{q}_H(t_0) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q; t_i, t_f]\right) q(t_0)}{\int \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q; t_i, t_f]\right)} \quad (23.15)$$

Conviene insisistir que, salvo la medida de integración, todas las cantidades que aparecen bajo el signo integral en la derecha de estas igualdades son clásicas: la acción en el exponencial es la acción clásica y  $q(t_0)$  es la coordenada clásica. Sin embargo, del lado izquierdo de las igualdades se tiene la expresión de un valor de expectación cuántico. La pregunta natural es la de dónde es tenido en cuenta el carácter cuántico en este cálculo. La respuesta es clara: es la medida de integración con la que integramos los objetos clásicos la que da un carácter cuántico a este cálculo.

Si en lugar del valor de expectación de solo un operador queremos obtener el de un producto de operadores, por ejemplo

$$\langle q_f; t_f | \hat{q}(t_a) \hat{q}(t_b) | q_i; t_i \rangle \quad (23.16)$$

con

$$t_i < t_b = t_{i_b} < t_a = t_{i_a} < t_f \quad (23.17)$$

repetimos (duplicando) el procedimiento desarrollado para el caso de uno,

$$\begin{aligned} & \langle q_f; t_f | \hat{q}(t_a) \hat{q}(t_b) | q_i; t_i \rangle \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{j=1}^{N-1} \int dq_j \langle q_f; t_f | q_{N-1}; t_{N-1} \rangle \dots \\ & \langle q_{i_a}; t_{i_a} | \hat{q}(t_{i_a}) | q_{i_a-1}; t_{i_a-1} \rangle \dots \langle q_{i_b}; t_{i_b} | \hat{q}(t_{i_b}) | q_{i_b-1}; t_{i_b-1} \rangle \dots \\ & \langle q_1; t_1 | q_i; t_i \rangle \end{aligned} \quad (23.18)$$

obteniéndose en este caso

$$\langle q_f; t_f | \hat{q}(t_a) \hat{q}(t_b) | q_i; t_i \rangle = \frac{\int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - h(p, q)) dt\right)}{q(t_a) q(t_b)} \quad (23.19)$$

Ahora bien, si quisiéramos en cambio calcular el siguiente valor de expectación

$$\langle q_f; t_f | \hat{q}(t_b) \hat{q}(t_a) | q_i; t_i \rangle \quad (23.20)$$

enfrentaríamos un problema. Los operadores aparecen en un orden “equivocado” en lo que respecta a la partición del intervalo de tiempo y sería imposible repetir el cálculo que llevó a (23.19). Esto significa que de hecho, la integral de camino da siempre el valor de expectación del producto temporal ordenado. Para que esto quede más claro invirtamos la identidad (23.19)

$$\int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - h(p, q)) dt\right) q(t_a) q(t_b) = \langle q_f; t_f | \hat{T} \hat{q}(t_a) q(t_b) | q_i; t_i \rangle$$

$$t_a > t_b \quad (23.21)$$

donde  $T$  define un orden temporal para el producto de operadores

$$T \hat{q}(t_a) \hat{q}(t_b) = \begin{cases} \hat{q}(t_a) \hat{q}(t_b) & \text{if } t_a > t_b \\ \hat{q}(t_b) \hat{q}(t_a) & \text{if } t_b > t_a \end{cases} \quad (23.22)$$

Vemos entonces que la integral de caminos, a través de su receta de “reemplazar operadores por funciones”, automáticamente ordena los operadores de derecha a izquierda, del “pasado al futuro”. En general para productos de  $S$  operadores  $\hat{q}(t_a) \dots \hat{q}(t_S)$  se tendrá

$$\int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - h(p, q)) dt\right) q(t_a) \dots q(t_s) = \langle q_f; t_f | T \hat{q}(t_a) \dots \hat{q}(t_s) | q_i; t_i \rangle \quad (23.23)$$

## Agregando fuentes

Una manera práctica de calcular elementos de matriz como los descriptos más arriba es la siguiente. Se agrega en la acción un término que consiste en el producto de una función fija (i.e., que no se integra)  $j(t)$  que llamaremos fuente y  $q(t)$  de manera que, en lugar de  $Z_{i \rightarrow f}$  tendremos

$$Z[j(t)] = \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - h(p, q)) dt\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} j(t) q(t) dt\right) \quad (23.24)$$

La idea es la de que diferenciando  $Z[j]$ , conocida como “funcional generatriz”, respecto de  $j$  en el lado derecho se generará un factor  $q$

multiplicando al exponencial de la acción de manera que la integral de camino resultante corresponda a un elemento de matriz del operador  $\hat{q}$  calculado con la integral funcional correspondiente. Antes de ver esto en detalle, indiquemos brevemente cómo se define la derivación respecto de una función  $j(t)$ , es decir, cómo se calcula *una derivada funcional*.

### Una versión simple de derivación funcional

Consideremos una funcional lineal de  $j(t)$ , que llamaremos  $F[j(t)]$ , de la forma

$$F[j(t)] = \int_{t_i}^{t_f} K(t, t') j(t') dt' \quad (23.25)$$

En analogía con el cálculo diferencial habitual, en el que las derivadas parciales de una función  $f(x_i)$  pueden definirse a través de la igualdad

$$df = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dx^i \quad (23.26)$$

se puede definir la derivada de una funcional  $F[j(t)]$  respecto de  $j(t')$  como

$$\frac{\delta F[j(t)]}{\delta j(t')} \equiv K(t, t') \quad (23.27)$$

si a la identidad (23.25) la escribimos, en analogía con (23.26), en la forma

$$\delta F[j(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \frac{\delta F[j(t)]}{\delta j(t')} \delta j(t') dt' \quad (23.28)$$

Para una definición más cuidadosa de la derivada funcional, ver por ejemplo la ec. [29]. Por nuestra parte, las ecuaciones (23.25)-(23.27) (o alternativamente, la ecuación (23.28)) son todo lo que necesitamos para nuestros cálculos.

Esta definición otorga a la derivada funcional todas las propiedades de la derivada ordinaria (regla de la cadena, regla de Leibnitz, etc). En particular, ya que

$$j(t) = \int_{t_i}^{t_f} \delta(t - t') j(t') dt' \quad (23.29)$$

se tiene

$$\frac{\delta j(t)}{\delta j(t')} = \delta(t - t') \quad (23.30)$$

que es equivalente a la fórmula

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \delta_{ij} \quad (23.31)$$

válida para derivadas ordinarias.

A partir de (23.30) podemos ver que vale

$$\frac{\delta}{\delta j(t)} \int_{t_i}^{t_f} j(t') q(t') dt = \int_{t_i}^{t_f} \frac{\delta j(t')}{\delta j(t)} q(t') dt' = \int_{t_i}^{t_f} \delta(t' - t) q(t') dt' = q(t) \quad (23.32)$$

y con esto tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{\delta Z[j]}{\delta j(t_a)} &= \int \mathcal{D}p \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - h(p, q)) dt \right) \\ &\quad \frac{i}{\hbar} q(t_a) \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} j(t) q(t) dt \right) \end{aligned} \quad (23.33)$$

de manera que

$$\left. \frac{\hbar}{i} \frac{1}{Z} \frac{\delta Z[j]}{\delta j(t_a)} \right|_{j=0} = \langle q_f; t_f | \hat{q}(t_a) | q_i; t_i \rangle \quad (23.34)$$

Y en general, se tiene

$$\langle q_f; t_f | \hat{T} \hat{q}(t_a) \hat{q}(t_b) \dots \hat{q}(t_s) | q_i; t_i \rangle = \left( \frac{\hbar}{i} \right)^p \frac{1}{Z} \frac{\delta^p Z[j]}{\delta j(t_a) \delta j(t_b) \dots \delta j(t_s)} \Big|_{j=0} \quad (23.35)$$

## La acción euclídea

Vimos anteriormente que el cálculo de integrales de camino enfrenta el problema de integrar “gaussianas” pero con un coeficiente imaginario en lugar del real negativo habitual. Es decir, se trata de integrales no estrictamente gaussianas. Una manera de salvar este inconveniente es el de continuar analíticamente el tiempo

$$t \rightarrow \tau \equiv it \quad (23.36)$$



procedimiento que en física se conoce como rotación de Wick. En un contexto relativista, esta rotación nos hace pasar de un espacio con métrica de Minkowski en el que el intervalo está definido como

$$ds^2 = -dt^2 + (d\vec{x})^2 \quad (23.37)$$

a un espacio con métrica euclídea en la que el intervalo deviene

$$ds_E^2 = dt^2 + (d\vec{x})^2 \quad (23.38)$$

Consideremos la acción para una partícula de masa  $m$  sometida a un potencial, tal como aparece en el argumento de la exponencial de la integral de caminos que define  $Z$ ,  $V$ ,

$$\frac{i}{\hbar} S_M = \frac{i}{\hbar} \int dt \left( \frac{m\dot{q}^2}{2} - V(q) \right) \quad (23.39)$$

(aquí  $\dot{f} = df/dt$ ). Procedamos ahora a hacer la rotación de Wick (23.36) de la siguiente manera

$$\frac{i}{\hbar} S_M = \frac{1}{\hbar} \int d(it) \left( -\frac{m}{2} \left( \frac{dq}{d(it)} \right)^2 - V(q) \right) \rightarrow -\frac{1}{\hbar} S_E \quad (23.40)$$

donde hemos definido a la acción euclídea como

$$S_E = \int d\tau L_E = \int d\tau \left( \frac{m}{2} \left( \frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) \right) \quad (23.41)$$

Vemos que el lagrangiano euclídeo es idéntico a la energía en espacio de Minkowski, la suma de energías cinética y potencial.

La rotación de Wick de la integral funcional que define  $Z$  está dada entonces por

$$\int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} S_M \right) \xrightarrow{\text{rotación de Wick}} \int \mathcal{D}q \exp \left( -\frac{1}{\hbar} S_E \right) \quad (23.42)$$

Podemos resumir los resultados de pasar de espacio de Minkowski a euclídeo como sigue:

- $i/\hbar \rightarrow -1/\hbar$
- $S_M \rightarrow S_E$  ó  $L_M \rightarrow L_E$
- $d/dt \rightarrow d/d\tau$

Si quisiéramos escribir la acción euclídea como diferencia de términos cinético y potencias deberíamos definir

$$V_E(q) \equiv -V(q) \quad (23.43)$$

con este el Lagrangiano euclídeo se escribe

$$L_E = T_E - V_E \quad (23.44)$$

La relevancia de la acción euclídea va más allá de que nos permite tratar integrales gaussianas de manera rigurosa. Como fuera descubierto por los químicos en la década de 1970 [31] permite describir el efecto túnel usando la integral de caminos y desarrollar para teorías de campos el equivalente a la aproximación semiclásica WKB.

Volviendo a la amplitud de probabilidad de pasar del estado  $|q_i\rangle$  en  $t = t_i$  al estado  $|q_f\rangle$  en  $t = t_f$

$$\begin{aligned} Z_{M i \rightarrow f} &= {}_S\langle q(t_2) | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_2 - t_1)\right) | q(t_1) \rangle_S \\ &= \mathcal{N}^{-1}(t_f, t_i) \int \mathcal{D}q \exp \frac{i}{\hbar} S_M[q; t_i, t_f] \end{aligned} \quad (23.45)$$

vemos que en espacio euclídeo  $Z$  toma la forma

$$\begin{aligned} Z_{E i \rightarrow f} &= {}_S\langle q(\tau_2) | \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \hat{H} \mathcal{T}\right) | q(\tau_1) \rangle_S \\ &= \mathcal{N}^{-1}(\tau_f, \tau_i) \int \mathcal{D}q \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E[q; \tau_f, \tau_i]\right) \end{aligned} \quad (23.46)$$

con  $\mathcal{T} = \tau_2 - \tau_1$ . Si introducimos la sugestiva notación

$$\beta = \frac{\mathcal{T}}{\hbar} \quad (23.47)$$

e imponemos la periodicidad en el tiempo euclídeo en el intervalo  $\mathcal{T}$  expresada a través de  $q(\tau_i) = q(\tau_f) = q_i$  y sumamos sobre todas las condiciones periódicas posibles, podemos escribir

$$Z_E = \text{Tr}_i \langle q_i | \exp(-\beta \hat{H}) | q_i \rangle = \int_{q_i=q_f} \mathcal{D}q \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E[q; \beta \hbar]\right) \quad (23.48)$$

Aquí  $\text{Tr}_i$  indica la suma sobre trayectorias periódicas que empiezan y terminan en  $q(\tau_i) = q_i$ . De esta manera, vemos que  $Z_E$  puede identificarse con la función de partición de un sistema con hamiltoniano  $\hat{H}$  en el caso en que asociemos a  $\beta$  con la temperatura,

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (23.49)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura. Esta es la razón por la que, aún en espacio de Minkowski, nos referimos a  $Z$  como una función de partición.

Hemos identificado a la función de partición cuántica de una partícula con la integral de camino sobre todas las trayectorias periódicas en espacio euclídeo. La analogía surgió de manera técnica. Sin embargo, deberían existir razones más profundas para tal conexión. Aunque no existe a la fecha una explicación clara y rigurosa del asunto, pueden invocarse argumentos basados en la gravitación para darle sustento [33].

## Integrales gaussianas

Al pasar de variables de integración en el espacio de las fases  $(p, q)$  a una integral solo sobre las coordenadas  $q$  para el caso de hamiltonianos con dependencia exclusivamente cuadrática en  $p$  mostramos que la integral sobre esta última variable se factorizaba.

Ahora veremos como se pueden hacer cambios de variable similares para reducir integrales al caso gaussiano. Trabajaremos en la formulación euclídea y en el caso de una única coordenada pero todo lo que sigue es válido cuando el número de dimensiones espaciales es  $d > 1$ . Partiremos de una integral funcional de la forma

$$I[\hat{A}, \hat{B}] = \int \mathcal{D}q \exp\left(-\frac{1}{2} \int_{\tau_i}^{\tau_f} \left(q(\tau) \hat{A}(\tau) q(\tau) - 2\hat{B}(\tau) q(\tau)\right) d\tau\right) \quad (23.50)$$

Aquí  $\hat{A}(\tau)$  y  $\hat{B}(\tau)$  pueden ser funciones reales (o matriciales si  $d > 1$ ) pero también pueden ser operadores hermíticos como por ejemplo

$$\hat{A} = -\frac{m}{\hbar} \frac{d^2}{d\tau^2} \quad (23.51)$$

En lo que sigue, y por razones que se aclararán más adelante, restringiremos a  $B$  al caso de funciones (o matrices) reales y solo  $A$  podrá tener el carácter de operador. Nótese que en términos de este operador, el término cuadrático en el argumento del exponencial coincide, si se integra por partes, con la energía cinética de una acción euclídea.

$$\frac{1}{2} \int_{\tau_i}^{\tau_f} q \hat{A}(\tau) q d\tau = \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} \frac{m \dot{q}^2}{2} d\tau \quad (23.52)$$

siempre que  $q$  y  $\dot{q}$  satisfagan condiciones inicial y final adecuadas.

Consideremos ahora la siguiente identidad

$$\int_{\tau_i}^{\tau_f} (q \hat{A}(\tau) q - 2B(\tau) q) d\tau = \int_{\tau_i}^{\tau_f} (q - \bar{q}) \hat{A} (q - \bar{q}) d\tau + \int_{\tau_i}^{\tau_f} C d\tau \quad (23.53)$$

que es válida si elegimos  $\bar{q}$  and  $C$  como

$$B = -\hat{A} \bar{q} \quad (23.54)$$

$$C = -\bar{q} \hat{A} \bar{q} \quad (23.55)$$

De la ec.(23.54) se tiene

$$\bar{q} = \bar{q}(\tau) = \int_{\tau_i}^{\tau_f} A^{-1}(\tau, \tau') B(\tau') d\tau' \quad (23.56)$$

donde  $A^{-1}$  es la inversa de  $\hat{A}$ ,

$$\hat{A}(\tau) A^{-1}(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau') \quad (23.57)$$

Cuando  $\hat{A}(\tau) = A(\tau)$  es simplemente una función se tiene

$$A^{-1}(\tau, \tau') = \frac{1}{A(\tau)} \delta(\tau - \tau') \quad (23.58)$$

Cuando  $\hat{A}(\tau)$  es un operador como por ejemplo (23.51),  $A^{-1}(t, t')$  devendrá la función de Green asociada. Teniendo en cuenta esto, la manera explícita de escribir a la ec.(23.55) será

$$C = - \int_{\tau_i}^{\tau_f} B(\tau) A^{-1}(\tau, \tau') B(\tau') d\tau' \quad (23.59)$$

Luego, usando la identidad (23.53) y la relación (23.57) la integral funcional gaussiana (23.50) puede escribirse como

$$\begin{aligned} I[\hat{A}, \hat{B}] &= \exp \left( \frac{1}{2} \int_{\tau_i}^{\tau_f} B(\tau) A^{-1}(\tau, \tau') B(\tau') d\tau d\tau' \right) \\ &\int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{1}{2} \int_{\tau_i}^{\tau_f} \left( q(\tau) - \bar{q}(\tau) \right) \hat{A}(\tau) \left( q(\tau) - \bar{q}(\tau) \right) d\tau \right) \end{aligned} \quad (23.60)$$

Si procedemos al cambio de variables

$$q(\tau) \rightarrow q'(\tau) = q(\tau) - \bar{q}(\tau) \quad (23.61)$$

cuyo jacobiano, como ya discutimos, es trivial

$$\mathcal{D}q = \mathcal{D}q' \quad (23.62)$$

la integración funcional en la segunda línea de la eq.(23.60) se puede escribir como una simple gaussiana y toda la dependencia en el término lineal  $B$  resulta factoreado,

$$\begin{aligned} I[\hat{A}, \hat{B}] &= \exp \left( \frac{1}{2} \int_{\tau_i}^{\tau_f} B(\tau) A^{-1}(\tau, \tau') B(\tau') d\tau d\tau' \right) \times I_0[\hat{A}] \\ I_0[\hat{A}] &= \int \mathcal{D}q' \exp \left( \frac{1}{2} \int_{\tau_i}^{\tau_f} q'(\tau) \hat{A}(\tau) q'(\tau) d\tau \right) \end{aligned} \quad (23.63)$$

Veremos en lo que sigue la utilidad de este resultado.

## La partícula libre

La funcional generatriz para el caso de una partícula libre cuántica tiene, en espacio de Minkowski, la forma

$$Z[j] = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m\dot{q}^2}{2} dt \right) \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} j(t) q(t) dt \right) \quad (23.64)$$

Haciendo una rotación de Wick deviene

$$Z_E[j] = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}q \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} \frac{m \dot{q}^2}{2} d\tau \right) \exp \left( \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} j(\tau) q(\tau) d\tau \right) \quad (23.65)$$

Utilizando la ecuación (23.52) podemos escribir a  $Z[j]$  en la forma

$$\begin{aligned} Z_E[j] &= \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} q(\tau) \frac{m}{2} \frac{d^2}{d\tau^2} q(\tau) d\tau \right) \\ &\quad \exp \left( \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} j(\tau) q(\tau) d\tau \right) \end{aligned} \quad (23.66)$$

de manera de que  $Z_E[j]$  tome la forma de  $I[\hat{A}, \hat{B}]$  en la ec.(23.50) con

$$\hat{A}(\tau) = -\frac{m}{\hbar} \frac{d^2}{d\tau^2} \quad \hat{B}(\tau) = \frac{1}{\hbar} j(\tau) \quad (23.67)$$

Luego, según el resultado (23.63) podemos escribir

$$Z_E[j] = \exp \left( \frac{1}{2\hbar^2} \int_{\tau_i}^{\tau_f} j(\tau) A^{-1}(\tau, \tau') j(\tau') d\tau d\tau' \right) Z_0 \quad (23.68)$$

con

$$Z_0 = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}q \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} \frac{m \dot{q}^2}{2} d\tau \right) \quad (23.69)$$

Es muy fácil encontrar la función de Green  $A^{-1}(\tau, \tau')$  del operador  $\hat{A}$  (23.67)

$$A^{-1}(t, t') = -\frac{\hbar}{m} |\tau - \tau'| \quad (23.70)$$

de manera que tendremos finalmente

$$Z_E[j] = \exp \left( -\frac{1}{2m\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} j(\tau) |\tau - \tau'| j(\tau') d\tau d\tau' \right) Z_0 \quad (23.71)$$

Vimos que

$$\langle q(t) \rangle = \hbar \frac{1}{Z} \frac{\delta Z}{\delta j(t)} \Big|_{j=0} \quad (23.72)$$

Utilizando el resultado (23.71) vemos que

$$\langle q(t) \rangle = 0 \quad (23.73)$$

Para el caso de una “función de correlación de dos puntos” en cambio obtenemos

$$\langle T \hat{q}(t_1) \hat{q}(t_2) \rangle = \hbar^2 \frac{1}{Z[j]} \frac{\delta^2 Z[j]}{\delta j(\tau_1) \delta j(\tau_2)} \Big|_{j=0} = -\frac{\hbar}{m} |t_1 - t_2| \quad (23.74)$$

## Problemas

1. Muestre que para la partícula libre

$$Z_{i \rightarrow f} = F_0(t_f, t_i) \exp \left( \frac{i}{\hbar} \frac{m (q_{cl}(t_f) - q_{cl}(t_i))^2}{2(t_f - t_i)} \right)$$

2. Usando que

$$Z_{i \rightarrow f} = \int dq_c Z_{i \rightarrow c} Z_{c \rightarrow f}$$

muestre que

$$F_0(t_i, t_f) = F[T]$$

con  $T = t_f - t_i$ .

# Clase 24

## El oscilador armónico

Otra teoría con acción cuadrática que puede estudiarse muy fácilmente utilizando la integral de caminos es la del oscilador armónico cuya acción definida en el intervalo  $(t_i, t_f)$  es

$$S = \int_{t_i}^{t_f} \left( \frac{1}{2} m \dot{q}(t)^2 - \frac{\lambda}{2} q(t)^2 \right) dt \quad (24.1)$$

Dejamos como problema el cálculo de funciones de correlación según el método que utilizamos para el caso de la partícula libre. En su lugar, describiremos otro método que tiene la ventaja de poder ser extendido para casos no-gaussianos, como por ejemplo el caso en que el potencial es cuártico.

Supongamos que hemos encontrado una solución  $q_{cl}(t)$  de las ecuaciones clásicas de movimiento que resultan de la acción (24.1),

$$\left. \frac{\delta S[q]}{\delta q(t)} \right|_{q=q_{cl}} = 0 \quad (24.2)$$

con las condiciones

$$q_{cl}(t_i) = q_i, \quad q_{cl}(t_f) = q_f \quad (24.3)$$

Luego, dada la integral funcional

$$Z_{i \rightarrow f} = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}q \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q] \right) \quad (24.4)$$

precedemos a un cambio de variables  $q(t) \rightarrow x(t)$ ,

$$q(t) = q_{cl}(t) + \sqrt{\hbar} x(t) \quad (24.5)$$



con

$$x(t_i) = x(t_f) = 0 \quad (24.6)$$

Evidentemente el jacobiano es trivial,

$$\mathcal{D}q = \mathcal{D}x \quad (24.7)$$

por lo que tendremos, que en términos de la nueva variable  $Z$  toma la forma

$$Z_{i \rightarrow f} = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}x \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q_{cl}(t) + \sqrt{\hbar} x(t)] \right) \quad (24.8)$$

Por otro lado, si procedemos a la siguiente expansión de la acción en serie de potencias de  $x(t)$  (desarrollo en serie de Taylor para la funcional  $S[q]$  en alrededor de la solución clásica) y teniendo en cuenta que no habrá término lineal puesto que  $\delta S / \delta q_{cl} = 0$  tendremos

$$S[q_{cl}(t) + \sqrt{\hbar} x(t)] = S[q_{cl}] + \frac{\hbar}{2} \int_{t_i}^{t_f} x(t) \left. \frac{\delta^2 S}{\delta q(t) \delta q(t')} \right|_{q=q_{cl}} x(t') dt dt' \quad (24.9)$$

Como el oscilador armónico es cuadrático la serie se corta en el segundo orden y el resultado (24.9) es exacto. Para un potencial general la serie continuaría con potencias crecientes de  $\hbar^{1/2}$  con lo que en una aproximación de  $\hbar$  pequeña podríamos quedarnos con una expresión cuadrática como (24.9) que sería, en tal caso, aproximada.

Volviendo (24.8)-(24.9) tenemos

$$\begin{aligned} Z_{i \rightarrow f} &= \mathcal{N}^{-1} \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q_{cl}(t)] \right) \\ &\int \mathcal{D}x \exp \left( \frac{i}{2} \int_{t_i}^{t_f} x(t) \left. \frac{\delta^2 S}{\delta q(t) \delta q(t')} \right|_{q=q_{cl}} x(t') dt dt' \right) \end{aligned} \quad (24.10)$$

diferenciando (24.1) tenemos, para la acción

$$\frac{\delta^2 S}{\delta q(t) \delta q(t')} = -2 \left( \frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} + \frac{\lambda}{2} \right) \delta(t - t') \quad (24.11)$$

de manera que (24.10) puede escribirse como

$$\begin{aligned} Z_{i \rightarrow f} &= \mathcal{N}^{-1} \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q_{cl}(t)] \right) \\ &\int \mathcal{D}x \exp \left( -i \int_{t_i}^{t_f} x(t) \left( \frac{m}{2} \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \frac{\lambda}{2} x(t) \right) dt \right) \end{aligned} \quad (24.12)$$

La integral funcional factoreada en la segunda línea solo depende de  $t_i$  y  $t_f$  y no de las condiciones iniciales, tenidas en cuenta por el factor exponencial clásico. Luego,

$$Z_{i \rightarrow f} = F(t_i, t_f) \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q_{cl}(t)] \right) \quad (24.13)$$

donde

$$F(t_i, t_f) = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}x \exp \left( -i \int_{t_i}^{t_f} x(t) \left( \frac{m}{2} \frac{d^2 x(t)}{dt^2} + \frac{\lambda}{2} x(t) \right) dt \right) \quad (24.14)$$

Se puede calcular muy fácilmente  $F$ . Pero antes, escribamos explícitamente la acción clásica  $S[q_{cl}]$ . Partimos de las ecuaciones clásicas de movimiento

$$m \frac{d^2 q_{cl}}{dt^2} = -\lambda q_{cl} \quad (24.15)$$

cuya solución general es

$$q_{cl} = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t) \quad (24.16)$$

(hemos usado la notación habitual  $\lambda = m\omega^2$ ). Imponiendo las condiciones (24.3) tendremos

$$q_{cl} = \frac{1}{\sin(\omega T)} (q_i \sin(\omega(t_f - t)) + q_f \sin(\omega(t - t_i))) \quad (24.17)$$

con  $T = t_f - t_i$ . Insertando esta solución en la acción se tiene finalmente

$$S[q_{cl}] = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega T)} \left( (q_i^2 + q_f^2) \cos(\omega T) - 2q_i q_f \right) \quad (24.18)$$

con lo que

$$Z_{i \rightarrow f} = F(t_i, t_f) \exp \left( \frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega T)} \left( (q_i^2 + q_f^2) \cos(\omega T) - 2q_i q_f \right) \right) \quad (24.19)$$

En resumen: la probabilidad de transición para el oscilador armónico queda expresada por

$$Z_{i \rightarrow f}^{osc} = F(t_i, t_f) \exp \left( \frac{i}{\hbar} S^{osc}[q_{cl}(t)] \right) \quad (24.20)$$

$$F(t_i, t_f) = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}x \exp \left( \frac{im}{2} \int_{t_i}^{t_f} \left( \left( \frac{dx(t)}{dt} \right)^2 - \omega^2 x(t)^2 \right) dt \right) \\ x(t_i) = x(t_f) = 0 \quad (24.21)$$

Nos resta calcular  $F(t_i, t_f)$ . Hay diferentes maneras de hacerlo pero aquí seguiremos un método que aumentará el número de herramientas para calcular integrales de camino. Comenzaremos por escribir a  $F$  en (24.21) en la forma

$$F(t_i, t_f) = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}x \exp \left( i \int_{t_i}^{t_f} \frac{m}{2} x(t) \hat{D} x(t) dt \right) \quad (24.22)$$

donde el operador  $\hat{D}$  está definido como

$$\hat{D} = -\frac{d^2}{dt^2} - \omega^2 \quad (24.23)$$

Se trata de un operador hermítico que induce un problema de autofunciones y autovalores bien definido

$$\hat{D}\varphi_n = \lambda_n \varphi_n \quad (24.24)$$

Las condiciones inicial y final de las autofunciones son elegidas en concordancia con la ecuación (24.21),

$$\varphi_n(t_i) = \varphi_n(t_f) = 0 \quad (24.25)$$

Es fácil encontrar las autofunciones y los autovalores de este problema,

$$\varphi_n = N_n \sin \left( \frac{n\pi(t - t_i)}{T} \right), \quad N_n = \sqrt{\frac{2}{T}} \quad (24.26)$$

$$\lambda_n = \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \quad (24.27)$$

con  $T = t_f - t_i$  y  $N_n$  una constante de normalización.

Supondremos que  $\{\varphi_n\}$  provee una base adecuada para expandir  $x(t)$ ,

$$x(t) = \sum_n c_n \varphi_n(t) \quad (24.28)$$

$$\int_{t_i}^{t_f} \varphi_n(t) \varphi_m(t) dt = \delta_{nm} \quad (24.29)$$

Llegamos así a un punto crucial que nos permitirá calcular integrales de camino siguiendo una prescripción alternativa a la que utilizamos hasta ahora. Recordemos que hasta aquí escribíamos la medida de integración en la forma

$$\mathcal{D}x(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_j dx_j \quad (24.30)$$

donde  $N$  y  $\epsilon$  eran el número de puntos y el ancho de la partición que hicimos del intervalo temporal. Quedó claro que  $\int \mathcal{D}x(t)$  representa una medida de integración sobre todas las trayectorias que satisfagan las condiciones de borde (24.21).

Ahora bien, la ecuación (24.28) representa, a través de un desarrollo de Bessel-Fourie una dada trayectoria que podríamos identificar con un superíndice  $I$ ,  $x^I(t)$ . A esta trayectoria le corresponde un conjunto de coeficientes que, consistentemente, indicaremos con  $\{c_n^I\}$ . Análogamente, a otra trayectoria  $x^{II}(t)$  le corresponderá un conjunto de coeficientes  $\{c_n^{II}\}$  y así siguiendo. Luego, como alternativa a la integración definida a través de la medida  $\mathcal{D}(x)$  representada por (24.30) podemos plantear la integración de cada uno de los coeficientes de Bessel-Fourier sobre todos los valores que pueden tomar en un desarrollo del tipo (24.28),

$$\mathcal{D}x(t) \equiv \mathcal{A} \lim_{M \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dc_1 \int_{-\infty}^{\infty} dc_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dc_M = \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} dc_i \quad (24.31)$$

Aquí  $\mathcal{A}$  es una constante de normalización (que hemos omitido en la última igualdad) que asegura que la normalización de integrales utilizando las dos medidas alternativas coincidan.

Si utilizamos para calcular  $F(t_i, t_f)$  la medida definida a partir del desarrollo de Bessel-Fourier terminaremos, usando la ortonormalidad

de las autofunciones  $\varphi'_n$ s

$$F(t_i, t_f) = \mathcal{N}^{-1} \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} dc_i \exp \left( \frac{im}{2} \sum_n \lambda_n c_n^2 \right) \quad (24.32)$$

Cada una de las integrales de esta expresión es la de una función gaussiana y será luego proporcional a  $1/\sqrt{\lambda_i}$  por lo que el resultado final resulta

$$F(t_i, t_f) = \mathcal{N}^{-1} \lim_{M \rightarrow \infty} \left( \frac{2\pi}{im} \right)^{\frac{M}{2}} \frac{1}{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_M}} \quad (24.33)$$

Desde el punto de vista matemático el producto de autovalores en (24.33) define el determinante del operador  $\hat{D}$  (con lo que esto quiera decir ya que  $\hat{D}$  es un operador no acotado para el que el producto de autovalores crece sin cota). Escribiremos entonces

$$\prod_n \lambda_n \equiv \det \hat{D} \quad (24.34)$$

y resolveremos el problema de posibles divergencias, que se presentará también para otros potenciales.

La ecuación (24.33) se escribe entonces en forma compacta como

$$F(t_i, t_f) = \bar{\mathcal{N}}^{-1} (\det \hat{D})^{-\frac{1}{2}} \quad (24.35)$$

con

$$\bar{\mathcal{N}}^{-1} = \mathcal{N}^{-1} \lim_{M \rightarrow \infty} \left( \frac{2\pi}{im} \right)^{\frac{M}{2}} \quad (24.36)$$

En cuanto a la ec.(2.76) para la amplitud de transición del oscilador armónico cuántico, resulta

$$\langle q_f; t_f | q_i; t_i \rangle = \bar{\mathcal{N}}^{-1} \exp \left( \frac{i}{\hbar} S^{osc}[q_{cl}] \right) (\det \hat{D})^{-\frac{1}{2}} \quad (24.37)$$

Ahora bien, el producto de autovalores del operador  $\hat{D}$  es

$$\det \hat{D} = \prod_n \lambda_n = \prod_n \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) \quad (24.38)$$

Como adelantamos, el producto del lado derecho no está acotado ya que crece como  $n^2$ . Sin embargo, si reescribimos esta fórmula como sigue

$$\det \hat{D} = \prod_n \lambda_n = \prod_n \frac{n^2 \pi^2}{T^2} \prod_n \left( 1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right) \quad (24.39)$$

queda claro que podemos absorber el primer producto, que es independiente de  $\omega$  y por ello de las propiedades del oscilador, en un factor global de normalización  $\mathcal{N}^{-1}$  que solo dependerá de  $t_f - t_i = T$  y que llamaremos  $F(t)$ .

En cuanto al segundo producto en (24.39), su resultado puede encontrarse en una tabla matemática (por ejemplo en [30], fórmula 1.431)

$$\prod_n \left( 1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right) = \frac{\sin(\omega T)}{\omega T} \quad (24.40)$$

De esta manera, tenemos finalmente

$$\langle q_f; t_f | q_i; t_i \rangle = F(T) \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q_{cl}] \right) \left( \frac{\omega T}{\sin(\omega T)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (24.41)$$

El factor de normalización  $F(T)$ , no depende de  $\omega$  sino de la extensión  $T$  del intervalo y de la masa  $m$  de la partícula. Su valor será entonces el mismo para una partícula libre ( $\omega = 0$ ) que para el caso de un oscilador. Pero para la partícula libre conocemos el resultado de la amplitud de transición y por lo tanto de  $F(T)$  (ver el problema 2 de la clase anterior)

$$F[T] = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (24.42)$$

El resultado final para la amplitud de probabilidad de transición para la partícula sometida a un potencial de oscilador armónico resulta

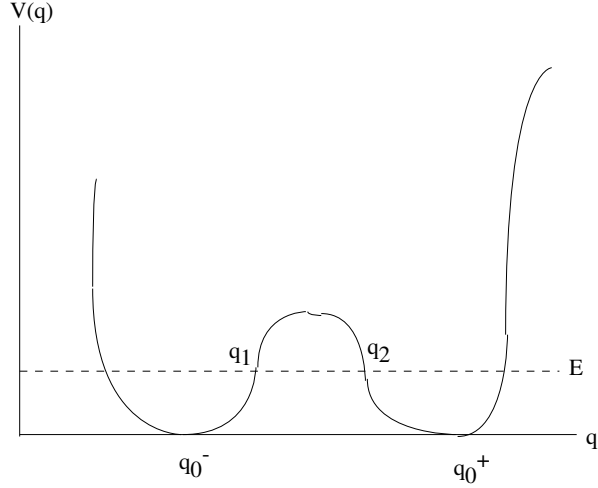
$$\langle q_f; t_f | q_i; t_i \rangle = \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[q_{cl}] \right) \left( \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega T)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (24.43)$$

## Más sobre la acción euclídea

El efecto túnel que en general puede estudiarse en mecánica cuántica utilizando métodos no perturbativos semiclásicos (WKB) puede también analizarse utilizando la integral de caminos con la ventaja que los

desarrollos que ello requiere son muy fácilmente extendibles al caso de la teoría cuántica de campos.

Consideremos por ejemplo el potencial de la figura siguiente



El coeficiente de transmisión  $T(E)$  entre los dos pozos para una partícula de energía  $E$  puede calcularse usando el método WKB resultando (ver por ejemplo [34])

$$|T(E)| \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{q_1}^{q_2} \sqrt{2(V(q) - E)} dq\right) (1 + O(\hbar)) \quad (24.44)$$

(aquí  $q_1$  y  $q_2$  son los puntos de retorno clásicos para la energía  $E$ ).

Evidentemente  $T(E)$  se anula, para  $\hbar \rightarrow 0$  más rápido que cualquier potencia de  $\hbar$  por lo que no pueden utilizarse técnicas perturbativas y hay que apelar al método WKB.

¿Cómo tratar este problema en el marco de la integral de caminos? How can we attack this problem using a semiclassical technique within the path-integral approach? Vimos que lo equivalente a un método semiclásico parte de hacer cambio de variables de integración funcional

$$q(t) = q_{cl}(t) + \sqrt{\hbar} x(t) \quad (24.45)$$

Pero en el caso del efecto tunel enfrentamos el problema siguiente

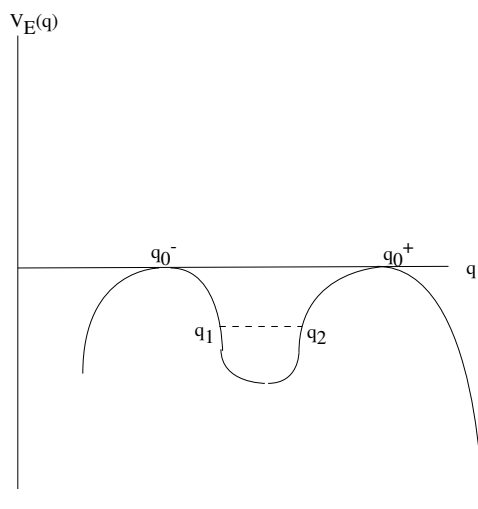
No existen trayectorias clásicas que conecten  $q_1$  con  $q_2$ .

puesto que el efecto túnel es un fenómeno estrictamente cuántico.

Los problemas **reales** son enfrentados por los grandes hombres y mujeres con **imaginación**. En este caso, pasando, por medio de una rotación de Wick, a tiempos **imaginarios**. En efecto, vimos que en la acción euclídea el potencial aparecía con signo positivo por lo que podemos escribir

$$S_E = \int (T + V) dt = \int (T - (-V)) dt \quad (24.46)$$

Como problema de mecánica tratado en términos de energía cinética y potencial restados en una acción,  $S_E$  corresponde a la de un potencial euclídeo  $V_E$  que no es el dado por la figura anterior sino por la que sigue



Pero para este potencial existen trayectorias clásicas en las que una partícula puede partir de  $q_1$  y llegar a  $q_2$  y esto es cierto aún para energías  $E \rightarrow 0$ , que corresponde a que la partícula pase de  $q_0^-$  a  $q_0^+$ . Como dijimos, la aplicación de esta técnica fue iniciada en [31] y luego elaborada para distintos problemas en [32]. A las trayectorias clásicas se les da el muy honrado nombre de “instantones”.





# Bibliography

- [1] E. Schrödinger, Ann. Phys. **79** (1926) 109.
- [2] O. Klein, Zs. Phys. **37** (1926) 895.
- [3] V.A. Fock, Zs. Phys. **38** (1926) 242.
- [4] W. Gordon, Zs. Phys. **40** (1926) 117.
- [5] W. Pauli y V. Weisskopf, Helv. Phys. Acta. **7** (1934) 709
- [6] P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **A117** (1928) 610.
- [7] E. Cartan, Leçons sur la théorie des spineurs, Hermann, Paris, 1938.
- [8] E. Schrödinger, Sitzungs b.d. Berlin Akad. pag.418 (1930).
- [9] L.L. Foldy and S.A. Wouthuysen, Phys. Rev. **78** 91950) 29.
- [10] A. Pais en *Paul Dirac, the man and his work*, ed. P. Goddard, Cambridge University Press, 1998.
- [11] P.A.M. Dirac, Proc. Royal Soc. Lond. **A126** (1930) 360.
- [12] P.A.M. Dirac, Proc. Royal Soc. Lond. **133** (1931) 60.
- [13] J. Schwinger, *A report on Quantum Electrodynamics*, en The Physicist's Conception of Nature, Reidel, Dordrecht, 1973.
- [14] W. Heisenberg, Z. Physik **99** (1927) 499
- [15] D.R. Hartree, Proc. Cambridge Phil. Soc., **24** (1928) 89 y 111.

- [16] P.A.M. Dirac, Proc. Royal Soc. Lond. **123** (1929) 713.
- [17] P.A.M. Dirac, *The Quantum Theory of the Emission and Absorption , of Radiation*. Proceedings of the Royal Society of London **A 114** (1927) 243.
- [18] P. Jordan y A. Klein, Zeits. für Physik **45** (1927) 751.
- [19] P. Jordan y W. Pauli, Zeits. für Physik **47** (1928) 151.
- [20] P. Jordan y E. Wigner, Zeits. für Physik **47** (1928) 631.
- [21] L. Landau y R. Peierls, Zeits. für Physik **62** (1930) 188.
- [22] V. Fock, Zeits. für Physik **75** (1932) 622.
- [23] P. A. M. Dirac *The Quantum Theory of Emission and Absorption of Radiation*, Proc. Roy. Soc. (London) A 114 (1927)243
- [24] E. Fermi, *Nuclear Physics*. University of Chicago Press, 1950.
- [25] L. Lorenz, “On the Identity of the Vibrations of Light with Electrical Currents” Philos. Mag. **34** (1867) 287.
- [26] P.A.M. Dirac, The principles of Quantum Mechanics, Oxford, 1930.
- [27] P.A.M. Dirac, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion, **3** (1933) 64.
- [28] R.P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367; Phys. Rev. **84** (1951) 108.
- [29] V. Volterra and J.Peres, Theorie générale des fonctionnelles, Gauthier, Paris, 1923.
- [30] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryshik, *Tables of Integrals, Series and Products*, Academic Press, London, 1994.
- [31] K. Freed, Journal of Chemical Physics **56** (1972) 692.
- [32] D. Mc Laughlin, Journal of Mathematical Physics **13** (1972) 1099.

- [33] A.M. Polyakov, *Gauge Fields and Strings*, Harwood Academic Publishers, Worcester, 1987.
- [34] L. Landau and E. Lifshitz, *Mécanique Quantique, vol.III*, Ed. Mir, Moscou, 1967.
- [35] O. W. Greenberg, *Spin and Unitary Spin Independence in a Paraquark Model of Baryons and Mesons*, Phys. Rev. Lett. **13** (1964) 598.