

apuntes para

MECÁNICA CUÁNTICA 2

Patricio Cordero S.
Departamento de Física
Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de Chile

versión noviembre 2007

Índice general

1.	Repaso y algo más	9
1.1.	Unidades	9
1.2.	Espacio de estados y proyectores	9
1.3.	Propiedades de la ecuación de Schrödinger 1D	11
1.4.	Repaso del problema estacionario de una partícula en un potencial central	12
1.5.	Soluciones sistemáticas de problemas centrales	14
1.6.	Simetrías espaciales y leyes de conservación	17
1.7.	Evolución en el tiempo	18
1.8.	Efecto del campo magnético en átomos	20
2.	Simetría	27
2.1.	Simetría y degeneración	27
2.2.	Sobre grupos y álgebras de Lie	34
2.3.	Producto Kronecker y reglas de selección	40
2.4.	El grupo de traslaciones 1D y bandas de energía	43
3.	Métodos aproximados independientes del tiempo	47
3.1.	Método de perturbaciones en el caso no degenerado	47
3.2.	Método perturbativo en el caso de espectro degenerado	58
3.3.	Método variacional	68
3.4.	Moléculas. Aproximación de Born-Oppenheimer	71

4.	Choque y desparramo	75
4.1.	Choques	75
4.2.	Autoestados de colisión	80
4.3.	Aproximación de Born	83
4.4.	Ondas parciales	87
5.	Perturbaciones dependientes del tiempo	97
5.1.	Formalismo	97
5.2.	Probabilidad de transición	100
5.3.	Resonancias	101
5.4.	Interacción de un átomo con una onda electromagnética . .	108
5.5.	Resonancia magnética	113
5.6.	El cuadro de interacción	117
6.	Ecuaciones Relativistas	123
6.1.	El primer paso	123
6.2.	Acoplamiento minimal	125
6.3.	Ecuación de Dirac	126
6.4.	La ecuación de Dirac con potencial central	137
6.5.	Cambios	141
7.	Pequeña introducción a campos cuánticos en una dimensión	145
7.1.	Osciladores cuánticos	145
7.2.	Cadena discreta	147
7.3.	Cadena abierta	155
7.4.	El efecto Casimir	157
7.5.	Límite al continuo	160
7.6.	Medio unidimensional cuántico	163
8.	Campos cuánticos	167
8.1.	El campo cuántico escalar en $3 + 1$ dimensiones	167

8.2. Funciones base	167
8.3. La expansión del campo	168
8.4. H en base a los operadores de creación y destrucción . . .	170
8.5. La energía potencial entre dos nucleones	170
8.6. Relaciones de conmutación a tiempos distintos	172
8.7. Rompimiento espontáneo de la simetría: bosones de Goldstone	173
8.8. Mecanismo de Higgs-Kibble	175
8.9. Hacia el modelo de Weinberg y Salam	177

Cronología cuántica personal hasta 1935

Pequeña prehistoria

- 1884 Balmer obtiene fórmula empírica para las líneas espectrales del hidrógeno
- 1887 Hertz produce ondas electromagnéticas y descubre el efecto fotoeléctrico
- 1895 Röntgen descubre rayos x
- 1896 Becquerel descubre la radioactividad nuclear
- 1897 JJ Thomson mide e/m para rayos catódicos, electrones son parte fundamental de los átomos

Hitos en primer tercio s. XX

- 1900 Planck: Radiación de cuerpo negro \Rightarrow primera idea de cuantización, constante h
- 1905 Rutherford inicia estudio de partículas α
- 1905 Einstein explica efecto fotoeléctrico usando h : cuantización de la radiación
- 1907 Einstein, usando cuantización de la energía explica capacidad calórica de sólidos $C(T)$.
- 1909-10 cuidadosa medición de la carga del electrón, Millikan
- 1911 Rutherford propone modelo nuclear de los átomos
- 1913 Bohr propone modelo de átomo de hidrógeno
- 1914 Mosley usa rayos x para relacionar modelo de Bohr con tabla periódica
- 1914 Franck y Hertz observan que energía atómica está cuantizada
- 1916 Wilson y Sommerfeld proponen regla de cuantización
- 1916 Millikan verifica efecto fotoeléctrico según Einstein
- 1919 Rutherford: primera detección de desintegración nuclear inducida
- 1922 Stern y Gerlach observan cuantización del momento angular (\hbar)
- 1923 Compton deduce y observa choque entre fotones y electrones
- 1924 De Broglie propone longitud de onda del electrón $\frac{h}{mv}$
- 1925 Schrödinger desarrolla ecuación de onda para partículas
- 1925 Heisenberg formula mecánica cuántica matricial
- 1925 Pauli formula principio de exclusión
- 1925 Goudsmit y Uhlenbeck sugieren *spin* del electrón
- 1927 Heisenberg formula principio de incertidumbre
- 1927 Davisson y Gerner: difracción de ondas electrónicas en cristal
- 1927 GP Thompson observa difracción de electrones en lámina metálica

-
- 1927 Dirac formula exitosa teoría relativista del electrón
1928 Gamow, Condon y Gurney usan mecánica cuántica para deducir la vida media de partículas alfa.
1930 Pauli: predice existencia del neutrino
1931 Van de Graaff: primer acelerador electrostático
1932 Lawrence, Livingstone: primer ciclotrón
1932 Chadwick descubre el neutrón y Anderson el positrón
1932 Cockcroft, Walton: primera tramutación artificial: $p+{}^7\text{Li} \rightarrow {}^8\text{Be}$
1933 Ochsenfel descubre efecto Meissner (superconductor expulsa a \vec{B})
1934 Chadwick y Goldhaber miden en forma muy precisa la masa del neutrón
1934 Chadwick y Goldhaber miden las fuerzas nucleares
1934 Perrin el neutrino tiene masa cero
1934 Fermi, teoría de interacciones débiles y decaimiento beta
1934 Esterman y Stern, momento magnético del neutrón
1934 Dirac, polarización del vacío y más divergencias en ED
1935 Yukawa, Stueckelberg, teoría de las interacciones nucleares y el pión
1935 Oppenheimer, spin y estadística
1935 Enrico Fermi, hipótesis que hay elementos transuránicos

Capítulo 1

Repaso y algo más

1.1. Unidades

Normalmente usaremos unidades e.s.u.:

c	$2,9978 \cdot 10^{10}$	cm/s	velocidad de la luz
\hbar	$1,05457 \cdot 10^{-27}$	erg s	$h/2\pi$
e	$4,8 \cdot 10^{-10}$	e.s.u.	carga elemental
m_e	$9,1 \cdot 10^{-28}$	g	masa electrón
m_p	$1,67 \cdot 10^{-24}$	g	masa protón
α	$1/137,036$		$\frac{e^2}{\hbar c}$
a	$0,529 \cdot 10^{-8}$	cm	$\frac{\hbar}{m_e c \alpha} = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$

Con la definición del radio de Bohr a se cumple que

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} = \frac{ae^2}{2}$$

1.2. Espacio de estados y proyectores

Típicamente veremos problemas cuántico que tienen asociado un operador hamiltoniano H y un espacio L de estados. A menudo este espacio se puede descomponer en la forma

$$L = L_1 \otimes L_2$$

Por ejemplo el problema de una partícula en un potencial central. Una base de L se describe con funciones $\Psi = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$. El espacio L es de la forma

$$L = L_R \otimes L_Y$$

En mecánica cuántica a los observables se les asocia operadores hermíticos, $A = A^\dagger$, lo que implica que tienen autovalores reales,

$$A |as\rangle = a |as\rangle \quad s = 1, \dots, g_a$$

Si $g_a = 1$ para todo autovalor a se dice que el espectro es no degenerado, si no, s es el índice de degeneración. Dos autovectores correspondientes a distintos autovalores son necesariamente ortogonales. Si el espectro es degenerado, siempre es posible escoger, en cada autoespacio L_a , una base ortonormal.

$$\langle as|a's'\rangle = \delta_{aa'} \delta_{ss'} \quad (1.2.1)$$

La base $\{|as\rangle\}$ generan un espacio L_A en el cual, por definición, es completa,

$$\sum_a \sum_{s=1}^{g_a} |as\rangle \langle as| = \mathbf{1} \quad (1.2.2)$$

y la suma parcial sobre uno de los s define un operador proyector P_a sobre el autoespacio L_a asociado al autovalor a

$$P_a \equiv \sum_{s=1}^{g_a} |as\rangle \langle as| \quad (1.2.3)$$

Estos proyectores son hermíticos e idempotentes,

$$P_a = P_a^\dagger \quad \text{y} \quad P_a P_{a'} = \delta_{aa'} P_a \quad (1.2.4)$$

Si el sistema está en un estado Ψ , la probabilidad, en el caso no degenerado, de observar que A tiene el valor a es

$$p_a = |\langle a|\Psi\rangle|^2 = \langle \Psi|a\rangle \langle a|\Psi\rangle \quad (1.2.5)$$

En el caso degenerado tal probabilidad es

$$\begin{aligned} p_a &= \sum_{s=1}^{g_a} \langle \Psi|as\rangle \langle as|\Psi\rangle \\ &= \langle \Psi|P_a|\Psi\rangle \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

1.3. Propiedades de la ecuación de Schrödinger 1D

Se define el Wronskiano de dos funciones $f_1(x)$ y $f_2(x)$ como

$$W(f_1, f_2) = f_1 f_2' - f_2 f_1'$$

Si $W = 0$ en un intervalo x , entonces f_1 es proporcional a f_2 en ese intervalo.

Se demuestra que si f_1 y f_2 satisfacen ecuaciones

$$\begin{aligned} f_1'' + F_1(x) f_1 &= 0 \\ f_2'' + F_2(x) f_2 &= 0 \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

donde las F_k son continuas a pedazos, entonces

$$W(f_1, f_2)|_a^b = \int_a^b [F_1(x) - F_2(x)] f_1 f_2 dx$$

Demostración: La combinación $(1.3.1a) \times f_1 - (1.3.1b) \times f_2$ da

$$\underbrace{f_1 f_2'' - f_2 f_1''}_{W'} + (F_2 - F_1) f_1 f_2 = 0$$

lo que lleva inmediatamente a que

$$\int_a^b W' dx = \int_a^b (F_1 - F_2) f_1 f_2 dx. \quad \text{q.e.d.}$$

En el caso $F_k(x) = E_k - V(x)$ se obtiene, del resultado anterior, que

$$W|_a^b = (E_1 - E_2) \int_a^b f_1 f_2 dx \quad (1.3.2)$$

Si f_1 y f_2 son autofunciones con el mismo E se obtiene que $W(a) = W(b)$, es decir, W es constante. No se me ocurre cómo demostrar que $W = 0$ y que, por tanto, el espectro es nodedegenerado.

Sean dos soluciones (f_1, E_1) y (f_2, E_2) de

$$f'' + (E - V(x)) f = 0$$

tal que $E_2 > E_1$ y tales que las f_k son reales. Se aplica (1.3.2) escogiendo los puntos (a, b) dos ceros consecutivos de f_1 . En tal caso, (1.3.2) se reduce a

$$f_2 f_1' \Big|_a^b = (E_2 - E_1) \int_a^b f_1 f_2 dx$$

Se supondrá que f_2 no cambia de signo en (a, b) . La función f_1 tiene signo fijo en el intervalo, digamos $f_1 < 0$, lo que implica $f_1(a) < 0$ y $f_1(b) > 0$ y a su vez esto implica que el signo del lado izquierdo es igual al signo de f_2 . Puesto que $E_2 > E_1$, el primer factor de la derecha es positivo, y como $f_1 < 0$, el signo del lado derecho es opuesto al de f_2 . Esto es una contradicción. Se concluye que entre dos ceros de f_1 siempre hay un cero de f_2 .

Mientras más nodos tiene una función de onda más alta es su energía.

También convendría agregar el comportamiento asintótico de la función de onda.

1.4. Repaso del problema estacionario de una partícula en un potencial central

La ecuación de Schrödinger en este caso conviene escribirla en coordenadas esféricas

$$H\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi = E\Psi(r, \theta, \phi)$$

y se usa separación de variables en la forma

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y(\theta, \phi)$$

lo que permite escribir H es la forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2m} \frac{L^2}{r^2} + V(r)$$

donde el operador L^2 que aparece en el término de barrera centrífuga es

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

y los L_i son

$$L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$$

que satisfacen las reglas de conmutación de momento angular

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k$$

En MQ1 se vió que es posible diagonalizar simultáneamente L^2 y $L_z \equiv L_3$ y los respectivos espectros de autovalores son

$$\begin{aligned} L^2 &\rightarrow \hbar^2 \ell(\ell+1) & \text{con} & \ell = 0, 1, \dots \\ L_3 &\rightarrow \hbar m & \text{con} & m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell \end{aligned} \quad (1.4.1)$$

y las autofunciones son los esféricos armónicos

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

En la ecuación que queda para $R(r)$ se hace el reemplazo

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}$$

con lo que la ecuación para $u(r)$ queda

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r) \quad (1.4.2)$$

y la función $u(r)$ debe satisfacer

$$\int_0^\infty u^* u dr = 1$$

Siempre se requiere que $R(r)$ sea finita en el origen, lo que exige que

$$u(0) = 0$$

Si el potencial efectivo cerca del origen está dominado por la barrera centrífuga, es necesario que

$$u(r \sim 0) = A r^{\ell+1}$$

En infinito debe comportarse en la forma

$$u(r \sim \infty) = e^{-\sqrt{2mE} r / \hbar}$$

1.5. Soluciones sistemáticas de problemas centrales

La ecuación maestra

Se planteará brevemente una forma práctica de resolver la ecuación (1.4.2) para muchos casos. En la mayoría de ellos sólo se podrá resolver el caso $\ell = 0$.

Se comienza planteando una ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{d^2 F}{dz^2} + p(z) \frac{dF}{dz} + q(z) F = 0 \quad (1.5.1)$$

sobre la que se hace dos cambios. El primero es un cambio de variable,

$$z = h(r)$$

y a continuación se cambia de función:

$$F(h(r)) = e^{k(r)} u(r)$$

Estos cambios producen una larga ecuación en la que aparecen derivadas de $u(r)$ y de $k(r)$. Se desea que u satisfaga (1.4.2), por lo que se exige que el coeficiente de du/dr sea nulo, lo que implica

$$k' = \frac{1}{2} \left(\frac{h''}{h'} - p h' \right) \quad (1.5.2)$$

Al hacer uso de esta relación en la ecuación larga que no se ha escrito se obtiene

$$u'' + \left(-\frac{3h''^2}{4h'^2} - p^2 \frac{h'^2}{4} + \frac{h'''}{2h'} - \frac{p'h'}{2} + q h'^2 \right) u(r) = 0$$

que debemos comparar con (1.4.2) reescrita en la forma

$$u'' + \left(\frac{2m(E - V)}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right) u(r) = 0$$

Para sacar provecho de esto se exige que los paréntesis redondos de ambas ecuaciones sean iguales, lo que da la relación

$$\frac{3h''^2}{4h'^2} - p^2 \frac{h'^2}{4} + \frac{h'''}{2h'} - \frac{p'h'}{2} + qh'^2 + \frac{2m(V-E)}{\hbar^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} = 0 \quad (1.5.3)$$

que llamaremos la ecuación maestra.

Se debe notar que la función $u(r)$ se debe escribir

$$u(r) = e^{k(r)} F(h(r)) \quad (1.5.4)$$

El caso confluyente a modo de ejemplo

Se dejará planteado el problema específico en que la ecuación de partida (1.5.1) sea la ecuación hipergeométrica confluyente, es decir $p = (b-z)/z$ y $q = -a/z$

$$p = \frac{b-h(r)}{h(r)}, \quad q = -\frac{a}{h(r)}$$

En tal caso la ecuación maestra se convierte en

$$-\frac{3h''^2}{4h'^2} - \frac{b^2h'^2}{4h^2} + \frac{bh'^2}{2h} - \frac{h'^2}{4} + \frac{h'''}{2h'} + \frac{bh'^2}{2h^2} - \frac{ah^2}{h} + \frac{2m(V-E)}{\hbar^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} = 0 \quad (1.5.5)$$

Las funciones de esta ecuación son h y V , los coeficientes independientes de r son a , b etc. La solución general de (1.5.1) con las elecciones de $p(r)$ y $q(r)$ que se ha hecho, da que la función F original es la función hipergeométrica confluyente

$${}_1F_1(a, b, h(r))$$

En los problemas de nuestro interés se desea que esta función no crezca más rápido que una potencia de $h(r)$. La función hipergeométrica confluyente es un polinomio tan solo si

$$a = -v, \quad v = 0, 1, 2, \dots$$

Caso Coulombiano

Si se escoge sencillamente $h = Cr$ y $V = -\frac{Ze^2}{r}$ se obtiene inmediatamente de (1.5.2) que

$$e^{k(r)} = r^{b/2} e^{-Cr/2}$$

lo que establece, ya que u debe anularse en el origen, que $b > 0$. La ecuación (1.5.5) se convierte en

$$\frac{b(2-b) + 4\ell(\ell+1)}{4r^2} + \frac{1}{r} \left(\frac{b-2a}{2} C - \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \right) - \left(\frac{C^2}{4} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) = 0$$

Cada uno de los tres términos debe anularse independientemente. El primero da dos raíces para b , pero una de las raíces es negativa y se deshecha. El segundo término da una ecuación para C . Se obtiene

$$b = 2\ell + 2, \quad C = \frac{2mZe^2}{\hbar^2(\ell+1+\nu)} = \frac{2Z}{an}$$

La última de las ecuaciones que debe anularse dice que

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2(\ell+1+\nu)^2} = -Z^2 \frac{e^2}{2a} \frac{1}{n^2}$$

El número cuántico principal es $n = \nu + \ell + 1$ y si se deja n fijo ℓ sólo puede tomar los valores $\ell = 0, 1, \dots, (n-1)$.

Caso Morse

Se resuelve el caso Morse para momento angular nulo, $\ell = 0$. Para ello se escoge

$$h(r) = 2\alpha e^{-\beta r}$$

(con $\alpha > 0$) que se reemplaza en (1.5.5) junto con colocar $a = -\nu$ y $\ell = 0$. Si se llama $Z(r)$ a la expresión que se obtiene, y puesto que ella debe ser nula, se exige que $dZ/dr = 0$, de donde se puede despejar dV/dr . Si se exige que dV/dr no dependa de ν se obtiene que la constante b tiene que depender en ν en la forma $b = A - 2\nu$ donde A es una constante arbitraria. Es trivial integrar dV/dr lo que define V salvo por una constante,

la que se escoge convenientemente para conseguir que el potencial sea asintóticamente sea nulo

$$V = -\frac{\alpha \hbar^2 \beta^2 e^{-\beta r}}{2m} (A - \alpha e^{-\beta r})$$

Para que V pueda tomar valores negativos (condición necesaria para que haya estados ligados) es necesario que existan valores de r para los cuales A/α sea mayor que $e^{-\beta r}$, y esta última cantidad está siempre entre cero y uno, entonces A tiene que ser positivo. Si se escoge, como es tradicional, que el potencial sea repulsivo cerca del origen, se necesita que

$$A < \alpha$$

Al reemplazar V en la expresión para Z se cancelan todos los términos que dependen de r y se puede despejar que la energía es

$$E = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{8m} (2\nu - A + 1)^2$$

que, como función de ν , tiene su valor mínimo, E_0 cuando $\nu = 0$, y crece monótonamente con ν mientras se satisfaga

$$\nu \leq \frac{A-1}{2}$$

1.6. Simetrías espaciales y leyes de conservación

Las simetrías en mecánica cuántica son operaciones que dejan invariante el hamiltoniano, en el sentido que $\mathcal{O}H\mathcal{O}^{-1} = H$, pero además preservando el producto escalar. Esto último requiere que las simetrías estén descritas por operadores unitarios¹ \mathcal{O} , $\mathcal{O}^\dagger = \mathcal{O}^{-1}$, entonces

$$\mathcal{O}H\mathcal{O}^\dagger = H$$

y, si la simetría es continua, se puede considerar un operador de simetría infinitesimalmente cercano a la unidad,

$$\mathcal{O} = 1 - id\alpha_1 X_1$$

¹Podrían ser operadores antiunitarios, pero tal posibilidad será desdeñada.

donde X_α es un operador hermítico que es el generador infinitesimal de la correspondiente simetría. Es sencillo ver que lo dicho implica que el hamiltoniano conmuta con los generadores infinitesimales de simetrías

$$[H, X_j] = 0$$

El operador $\mathcal{O}(\vec{\alpha})$ lejos de la unidad se puede escribir

$$\mathcal{O} = e^{-i\vec{\alpha} \cdot \vec{X}}$$

A cada simetría espacial le está asociada una cantidad conservada X , un observable que se conserva. El operador X asociado a estos observables juegan, por otro lado, el papel de generadores infinitesimales de la operación de simetría.

Ejemplo: rotación en torno a eje \hat{n} en ángulo α

$$R_{\hat{n}}(\alpha) = e^{-i\alpha \hat{n} \cdot \vec{L}/\hbar} \quad (1.6.1)$$

La ecuación de Schrödinger para un sistema aislado (H independiente del tiempo)

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

tiene como solución formal

$$\begin{aligned} \Psi(t_b) &= e^{-i(t_b-t_a)H/\hbar} \Psi(t_a) \\ &= U(t_b-t_a) \Psi(t_a) \end{aligned} \quad (1.6.2)$$

Esta es una ecuación en la que aparece un operador de evolución $U(t)$. El generador infinitesimal es el Hamiltoniano en el sentido que el operador $U(T)$ satisface

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H U \quad (1.6.3)$$

1.7. Evolución en el tiempo

Regla de evolución de valores medios

En lo que sigue se llamará Ψ al estado inicial del sistema y $\Psi(t)$ al estado evolucionado en el tiempo, con lo que (1.6.2) es

$$\Psi(t) = U(t) \Psi \quad (1.7.1)$$

El valor medio del observable A en el instante t es

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle_t &= \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \\
 &= \sum_a \sum_{s=1}^{g_a} \langle \Psi(t) | A | a_s \rangle \langle a_s | \Psi(t) \rangle \\
 &= \sum_a \sum_{s=1}^{g_a} a \langle \Psi(t) | a_s \rangle \langle a_s | \Psi(t) \rangle \\
 &= \sum_a a \langle \Psi(t) | P_a | \Psi(t) \rangle = \sum_a a p_a(t) \\
 &= \sum_a a \langle \Psi | U^\dagger(t) P_a U(t) | \Psi \rangle \tag{1.7.2}
 \end{aligned}$$

Cuadro de Schrödinger y evolución de p_E

Si se denomina $|E_s\rangle$ a los estados propios de H ,

$$H |E_s\rangle = E |E_s\rangle$$

y el estado inicial se expande en la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{E',s'} c_{E',s'} |E',s'\rangle, \quad c_{E_s} \equiv \langle E_s | \Psi \rangle$$

se obtiene el estado evolucionado $\Psi(t)$ en forma muy sencilla, gracias a que cada autoestado de H tiene una evolución tan sencilla

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{E',s'} c_{E',s'} e^{-iE't/\hbar} |E',s'\rangle$$

y la probabilidad de observar E es

$$p_E(t) = \sum_s \langle \Psi(t) | E_s \rangle \langle E_s | \Psi(t) \rangle = \sum_s |c_{E_s}|^2$$

que es independiente del tiempo. Esto ocurre precisamente porque H es el generador de la evolución temporal.

Cuadro de Heisenberg

En este cuadro se define operadores asociados a los observables que dependen del tiempo

$$A(t) = U^\dagger(t) A U(t) \quad (1.7.3)$$

y estados que no evolucionan

$$p_a(t) = \langle A \rangle_t = \langle \Psi | U^\dagger(t) A U(t) | \Psi \rangle = \langle \Psi | A(t) | \Psi \rangle$$

De (1.7.3)

$$dA(t) = dU^\dagger A U + U^\dagger dA U$$

pero $dU = -\frac{i}{\hbar} dt U H$ mientras que $dU^\dagger = \frac{i}{\hbar} H dt U$ lo que da

$$dA(t) = \frac{i}{\hbar} dt (H U^\dagger A U - U^\dagger A U H)$$

que se reescribe

$$\frac{dA(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [A, H] \quad (1.7.4)$$

que es la *ecuación de Heisenberg* para los observables.

1.8. Efecto del campo magnético en átomos

Efecto Zeeman “normal” (sin spin)

Se verá el efecto de un campo magnético uniforme sobre el espectro atómico.

El hamiltoniano más sencillo para un átomo de Z electrones es

$$H_0 = \sum_{b=1}^Z \left(\frac{p_b^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_b} \right) + \sum_{b < c} \frac{e^2}{r_{bc}}$$

Para incluir el efecto de un campo electromagnético externo se hace uso del acoplamiento minimal

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r})$$

por lo cual

$$p^2 \rightarrow p^2 + \frac{e}{c} (\vec{A} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{A}) + \frac{e^2}{c^2} A^2$$

Puesto que interesa describir un campo magnético uniforme, una elección muy conveniente es

$$A_i = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} B_j x_k$$

donde los B_j son constantes. Se puede demostrar que en efecto

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Por cada electrón b se necesita calcular

$$\begin{aligned} A_i p_i + p_i A_i &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} (B_j x_k p_i + p_i B_j x_k) \\ &= B_j \epsilon_{ijk} x_k p_i \\ &= \vec{B} \cdot \vec{L} \end{aligned} \quad (1.8.1)$$

En el penúltimo paso se uso que x_k conmuta con p_i porque $k \neq i$. Lo que se acaba de obtener es

$$\vec{A} \cdot \vec{p}_b + \vec{p}_b \cdot \vec{A} = \vec{B} \cdot \vec{L}_b$$

Al sumar sobre todos los electrones se obtiene $-\vec{B} \cdot \vec{L}$.

Se deja como ejercicio demostrar que

$$\sum_b A^2(\vec{r}_b) = \frac{B^2}{4} \sum_b r_{b\perp}^2 \quad (1.8.2)$$

donde $r_{b\perp}$ es la proyección de \vec{r}_b al plano perpendicular a la dirección de \vec{B} .

De lo anterior se desprende que el efecto de un campo magnético uniforme sobre un átomo se logra agregando al hamiltoniano H_0 dos términos

$$\frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{e^2}{8mc^2} B^2 \sum_{b=1}^Z r_{b\perp}^2$$

El último de estos términos se desprecia porque se puede estimar que el cociente entre el segundo y el primer término es de orden

$$10^{-9} ZB$$

que es muy chico aun si el campo magnético es muy intenso $B \sim 10^4$ [Gauss].

La pequeña energía $\frac{e}{2mc}\vec{B} \cdot \vec{L}$ puede ser interpretada como la suma de las energías potenciales de los momentos magnéticos $\vec{\mu}_b$ orbitales

$$\vec{\mu}_b = -\frac{e}{2mc}\vec{L}_b \quad (1.8.3)$$

En efecto, en electrodinámica se aprende que la energía potencial de un momento magnético $\vec{\mu}$ en presencia de un campo magnético \vec{B} es $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ que es precisamente lo que ha aparecido como perturbación a H_0 .

Si se escoge el eje Z paralelo a \vec{B} se tiene finalmente

$$H = H_0 + \frac{eB}{2mc}L_z \quad (1.8.4)$$

Designando $|nLM\rangle$ a los autoestados de H_0 , el nuevo autovalor se obtiene fácilmente.

$$\begin{aligned} H |nLM\rangle &= \left(H_0 + \frac{eB}{2mc}L_z \right) |nLM\rangle \\ &= \left(E_{nL}^0 + \frac{eB}{2mc}\hbar M \right) |nLM\rangle \\ &= (E_{nL}^0 + M\mu_B B) |nLM\rangle \end{aligned} \quad (1.8.5)$$

donde

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2mc} \quad \text{magnetón de Bohr}$$

Cada nivel E_{nL}^0 que es $2L+1$ veces degenerado se desdobra en $2L+1$ niveles no degenerados. El intervalo de energía entre ellos es

$$\Delta E = \mu_B B$$

Acoplamiento spin-órbita

El término de spin-órbita

Como se vió en Mecánica Cuántica I, cada electrón tiene un momento magnético $\vec{\mu}_e$ intrínseco asociado

$$\vec{\mu}_e = -g_e \frac{e}{2mc} \vec{s} \quad (1.8.6)$$

donde \vec{s} es el operador de spin del electrón. Esta expresión difiere de (1.8.3) en el factor $g_e \approx 2$. Estos factores g tienen complejos orígenes,

$$\begin{aligned} g_{\text{electron}} &= 2,0023192 \quad \text{predicho en QED} \\ g_p &= 5,59 \\ g_n &= -3,83 \end{aligned} \quad (1.8.7)$$

Aun sin campo magnético externo, el momento magnético del electrón interactúa con el campo magnético producido por la órbita,

$$\vec{B} = \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \vec{v} \times \nabla \phi$$

donde ϕ es el potencial eléctrico y, suponiendo que se tiene un potencial $\phi(r)$ central, trivialmente

$$\nabla \phi = \phi' \frac{\vec{r}}{r}$$

La energía potencial es

$$\begin{aligned} -\vec{\mu} \cdot \vec{B} &= -\frac{e}{mc} \vec{s} \cdot \left(\frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{E} \right) \\ &= \frac{e}{m^2 c^2} \vec{s} \cdot \vec{p} \times \nabla \phi \\ &= \frac{e}{m^2 c^2} \vec{s} \cdot \vec{p} \times \vec{r} \frac{\phi'}{r} \\ &= \frac{e}{m^2 c^2} \frac{\phi'}{r} \vec{s} \cdot \vec{L} \end{aligned}$$

Si este cálculo se hubiera hecho considerando efectos relativistas se habría obtenido un factor 1/2 extra. El resultado correcto es el *acoplamiento spin-órbita*

$$\xi(r) \vec{L} \cdot \vec{s} = -\frac{e}{2m^2 c^2} \frac{\phi'}{r} \vec{L} \cdot \vec{s} \quad (1.8.8)$$

En el caso del átomo de hidrógeno con $\phi = -e/r$ se obtiene

$$\xi(r) = \frac{e^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3}$$

El hamiltoniano de Pauli para un átomo de un electrón es

$$H_P = \frac{p^2}{2m} + e\phi(r) + \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{s} \quad (1.8.9)$$

Estados propios del hamiltoniano de Pauli

El hamiltoniano de Pauli ya no es invariante bajo rotaciones generadas por los operadores L_i sino que lo es bajo rotaciones generadas por los operadores de momento angular total

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{s} \quad (1.8.10)$$

Los estados propios de H_P pueden ahora llevar índices J y M , aparte de ℓ y s . También ya ha sido visto que

$$|n\ell sJM\rangle = \sum_{M=m_\ell+m_s} |n\ell m_\ell, sm_s\rangle \langle n\ell m_\ell, sm_s | n\ell sJM\rangle$$

donde el último factor de cada sumando corresponde a un *coeficiente de Clebsch-Gordan*. Estos estados son triviales de construir en el caso de spin $\frac{1}{2}$.

Para el caso de $s = \frac{1}{2}$ los estados $|n\ell sJM\rangle$ son fáciles de construir. Se va a construir estados propios asociados al momento angular total J partiendo del producto directo de espacio de momento angular orbital $|\ell m\rangle$ y y de spin $\frac{1}{2}$, $|\pm\rangle$.

Se sabe que

$$\begin{aligned} L_+ |\ell m\rangle &= \hbar \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} |\ell m + 1\rangle \\ L_- |\ell m\rangle &= \hbar \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} |\ell m - 1\rangle \end{aligned}$$

Haciendo uso que el número cuántico magnético es aditivo, se puede obtener un estado con número cuántico M con la combinación

$$|\psi\rangle = a_1 \left| \ell M - \frac{1}{2} \right\rangle |+\rangle + a_2 \left| \ell M + \frac{1}{2} \right\rangle |-\rangle$$

Se debe determinar los coeficientes a_k para que $|\psi\rangle$ sea además autovalor de J^2 .

De la identidad

$$J^2 = L^2 + s^2 + L_+ s_- + L_- s_+ + 2L_z s_z$$

se obtiene fácilmente la acción de J^2 sobre $|\psi\rangle$, obteniéndose una mezcla de dos vectores linealmente independientes, la cual debe ser igual a

$\hbar^2 J(J+1)|\psi\rangle$. Al exigir igualdad entre los respectivos coeficientes se obtiene primero que si $\ell \neq 0$,

$$J = \ell \pm \frac{1}{2}$$

y además, una vez que se exige que el estado esté normalizado, resulta

$$\begin{aligned} & \left| \ell, \frac{1}{2}, J = \ell \pm \frac{1}{2}, M \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \left[\pm \sqrt{\ell \pm M + \frac{1}{2}} \left| \ell M - \frac{1}{2} \right\rangle |+\rangle \right. \\ & \quad \left. + \sqrt{\ell \mp M + \frac{1}{2}} \left| \ell M + \frac{1}{2} \right\rangle |-\rangle \right] \end{aligned} \quad (1.8.11)$$

Capítulo 2

Simetría

2.1. Simetría y degeneración

Simetría

El hamiltoniano H , que describe un sistema cuántico, es invariante a la acción del operadores O_g unitarios si

$$O_g H O_g^\dagger = H \quad (2.1.1)$$

Si H es invariante a la acción de O_{g_1} y también a la acción de O_{g_2} también es trivialmente invariante a la acción de sus productos

$$O_{g_1} O_{g_2} \quad \text{y} \quad O_{g_2} O_{g_1}$$

De aquí que los operadores que dejan invariante a un hamiltoniano forman un grupo, al que se denomina el *grupo de simetría* de H y en forma genérica se denotará G . Un ejemplo muy conocido es el caso de los hamiltonianos con potencial central $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$ (con $\vec{p} = -i\hbar\nabla$) que son invariantes a rotaciones espaciales y a la inversión de todas las coordenadas con respecto al centro de fuerzas. El grupo que describe al conjunto de todas esas operaciones se llama $O(3)$, mientras que el que describe tan solo a las rotaciones se llama $SO(3)$. En cambio en hamiltoniano asociado a la molécula de amonio, NH_4 , debiera ser invariante al grupo de transformaciones discretas que dejan invariante a un tetrahedro regular.

Si Ψ es una autofunción de H con autovalor E y H es invariante a la acción de O_g , entonces $E\Psi = H\Psi = (HO_g^{-1})(O_g\Psi)$ que implica

$$H(O_g\Psi) = E(O_g\Psi) \quad (2.1.2)$$

y por lo tanto $\Psi_g \equiv O_g\Psi$ también es autofunción de H con el mismo autovalor.

Operadores sobre un espacio de funciones

En el contexto actual se habla de espacios de funciones (armónicos esféricos, polinomios de algún tipo etc.) y los operadores actúan sobre estos espacios. Normalmente estos operadores son de carácter geométrico.

Sea T una transformación de tipo geométrico que actúa sobre el vector posición \vec{r} , $\vec{r}' = T\vec{r}$. Al operador geométrico T se le asocia un operador lineal O_T que actúa sobre funciones $\psi(\vec{r})$ de modo que la acción de este operador sobre ψ es realmente la acción sobre el argumento de la función como se explica en lo que sigue. La acción da por resultado una nueva función $\psi' = O_T\psi$

$$\psi'(\vec{r}') \equiv O_T\psi(\vec{r}') = \psi(\vec{r}) \quad \text{si } \vec{r}' = T\vec{r}. \quad (2.1.3)$$

es decir, por definición, la función transformada ψ' toma los mismos valores en el punto imagen \vec{r}' que la función original ψ toma en el punto \vec{r}

$$O_T\psi(T\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \quad (2.1.4)$$

o equivalentemente

$$O_T\psi(\vec{r}) = \psi(T^{-1}\vec{r}). \quad (2.1.5)$$

Aunque la forma (2.1.5) es la más usada debe tenerse mucho cuidado en la forma de aplicarla ya que se presta fácilmente a errores.

EJERCICIO: Repita la deducción que sigue pero haciendo uso de (2.1.5) en vez de (2.1.4)

$$\begin{aligned} O_S\psi'(S\vec{r}') &= \psi'(\vec{r}') \\ O_S O_T\psi(S\vec{r}') &= \psi(\vec{r}) \\ O_S O_T\psi(ST\vec{r}) &= \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

La primera igualdad se debe a (2.1.4), la segunda a (2.1.3) y la tercera a la definición de x' . Esto demuestra que la acción de $O_S O_T$ es igual, debido a (2.1.4), a la acción de O_{ST} :

$$O_S O_T = O_{ST} \quad (2.1.6)$$

Corolario de esto es que

$$O_{S^{-1}} = (O_S)^{-1}. \quad (2.1.7)$$

Degeneración

Dada una autofunción Ψ de H de autovalor E , la acción del grupo de simetría sobre ella engendra un *autoespacio* L_E de H , con autovalor E . La dimensión n_E de este espacio es la *degeneración* del autovalor de E . Sean $\psi_1, \dots, \psi_{n_E}$ una base ortonormal del espacio L_E , esto es, el producto escalar entre ellas da

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$$

La acción de los operadores del grupo sobre estas funciones definen matrices,

$$O_g \phi_i = D_{ji}(g) \phi_j \quad \text{suma implícita} \quad (2.1.8)$$

lo que permite tener la asociación entre operadores del grupo G y matrices de dimensión n_E . Se puede comprobar que la operación producto se conserva:

$$O_{g_1} O_{g_2} \psi_1 = D_{kj}(g_1) D_{ji}(g_2) \psi_k \quad (2.1.9)$$

De esta forma las matrices $D(g)$ definen una representación matricial del grupo G de simetría. Esta representación se llama $D(G)$. Si $g \rightarrow O_g \rightarrow D(g)$ entonces

$$g^{-1} \rightarrow O_{g^{-1}} = O_g^{-1} \rightarrow D(g^{-1}) = D^{-1}(g)$$

Estas matrices dependen de la base $\{\psi_i\}$ escogida.

Algunos conceptos sobre grupos

Grupos discretos y continuos: ejemplos: Los grupos pueden ser divididos en discretos y continuos. Entre los grupos discretos están los grupos

finitos. En los grupos continuos, como el grupo de rotaciones, es posible caracterizar sus elementos por los valores de unos pocos parámetros reales y continuos (e.g., los ángulos de Euler en el caso de $SO(3)$). Si estos parámetros tienen un rango finito de variación se dice que el grupo continuo es *compacto*. El grupo de transformaciones de Lorentz no es compacto, porque además de ángulos de Euler tiene parámetros que corresponden a ángulos hiperbólicos. Las transformaciones propias de Lorentz constituyen el grupo $SO(3, 1)$.

Otro grupo de mucho interés en mecánica cuántica es el grupo $O(3)$. Tiene una estructura muy sencilla en términos del grupo de rotaciones $SO(3)$. Los elementos de $O(3)$ son a) rotaciones puras $R(\hat{n}, \alpha)$ o bien b) son de la forma $IR(\hat{n}, \alpha)$ donde I es la operación de inversión. Esta última operación es aquella que simultáneamente cambia el signo de las tres coordenadas: $(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$. La inversión I conmuta con todas las rotaciones, por lo que $O(3)$ es el producto directo de dos grupos,

$$O(3) = SO(3) \times \{e, I\} \quad (2.1.10)$$

Clases conjugadas: Dos elementos g_1 y g_2 de un grupo G son *conjugados* si existe un tercer elemento en el grupo tal que $g_1 = g_3 g_2 g_3^{-1}$

$$g_1 \simeq g_2 \quad \iff \quad g_1 = g_3 g_2 g_3^{-1} \quad (2.1.11)$$

Puesto que *ser conjugado* es una relación de equivalencia, un grupo puede ser descompuesto en *clases conjugadas*. La clase K_a de un grupo G es el conjunto de todos los elementos $g_k \in G$ que son conjugados a g_a . Naturalmente que las clases conjugadas son disjuntas y cubren al grupo. El elemento neutro constituye una clase por sí solo.

Para el grupo de rotaciones $SO(3)$ dos elementos son conjugados si y sólo si son rotaciones en un mismo ángulo α . El rótulo natural para designar las clases conjugadas de $SO(3)$ es α .

Las clases conjugadas de $O(3)$ son las siguientes: a) La identidad es una clase por sí sola (como en todo grupo); b) la clase $R(\alpha)$ de todas las rotaciones en ángulo α sin importar la orientación del eje de rotación; (hay un continuo de clases de este tipo); c) la clase que contine solo a la inversión y finalmente d) la clase de todas las operaciones $IR(\alpha)$.

Primeras nociones sobre representaciones lineales

Representación y fidelidad: Se tiene una representación matricial $D(G)$ del grupo G con matrices de $n \times n$ si

$$\begin{aligned} g &\rightarrow D(g) \\ g_1 g_2 &\rightarrow D(g_1)D(g_2) = D(g_1 g_2) \end{aligned}$$

Algunas representaciones son *fieles* en el sentido que $g_1 \neq g_2$ implica $D(g_1) \neq D(g_2)$. En el otro extremo, la *representación trivial* es aquella que asocia la unidad a cada elemento del grupo.

Espacio de representación y matrices: El espacio de vectores sobre el que actúan las matrices se llama el espacio de la representación. Por ejemplo, el espacio L de los armónicos esféricos $Y_m^\ell(\theta, \phi) = Y_m^\ell(\hat{r})$, con ℓ fijo y $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$ es un espacio de representación del grupo $SO(3)$. Las matrices se construyen con la acción de las rotaciones sobre los Y_m^ℓ ,

$$\begin{aligned} D_{mm'}^\ell(\theta, \phi, \alpha) &= \langle Y_m^\ell | R(\theta, \phi, \alpha) | Y_{m'}^\ell \rangle \\ &= \int \left(Y_m^\ell(\theta, \phi) \right)^* R(\theta, \phi, \alpha) Y_{m'}^\ell(\theta, \phi) d \cos \theta d \phi \end{aligned}$$

Reductibilidad: Se dice que la representación de G sobre el espacio L es *reductible* si existe un subespacio L_1 que es dejado invariante por la acción del grupo. Si, por el contrario, no existe subespacio invariante, entonces la representación sobre L es *irreductible*. Estas representaciones se abrevian como RR y RI respectivamente. Se usará índices griegos (de la parte central del alfabeto) para denotar en forma genérica las RI de un grupo G : $D^\mu(G)$.

Si las matrices $D(g)$ de una representación $D(G)$ pueden ser llevadas todas a una forma diagonal en bloques, entonces $D(G)$ es una RR completamente reductible y el espacio L de la representación puede ser descompuesto en la forma $L = \oplus_j L_j$, con $j = 1, \dots, k$, en que cada subespacio L_j de L es invariante y L_j no contiene subespacios invariantes. Estos subespacios son espacio de RIs de G y la representación original puede ser expresada como suma directa de representaciones sobre cada uno de estos L_j ,

$$D(G) = D_1(G) \oplus \dots \oplus D_k(G) \quad (2.1.12)$$

Cuando una RR de G se descompone en suma directa de RIs, suele ocurrir que entre los sumandos haya representaciones D_a y D_b equivalentes, en el sentido que, con una elección apropiada de las bases se haga coincidir las matrices en ambas representaciones. La nomenclatura es tal que se considera que tal representación aparece al menos dos veces en la descomposición. Más en general se tiene que una representación totalmente reducible se descompone en la forma

$$D(G) = \bigoplus_{\mu=1}^r a_{\mu} D^{\mu}(G) \quad (2.1.13)$$

donde las $D^{\mu}(G)$ son RIs del grupo y cada a_{μ} es el entero no negativos que informa cuántas veces aparece $D^{\mu}(G)$ en la descomposición de $D(G)$ y r el número de RIs no equivalentes que tiene G .

Para grupos finitos y grupos de Lie compactos (ver §2.2), todas las representaciones reducibles son totalmente reducibles.

La representaciones irreducibles de $SO(3)$ son las D^{ℓ} con $\ell = 0, 1, \dots$. A las representaciones irreducibles de $O(3)$ se les debe agregar la paridad $P = \pm 1$ como segundo rótulo, $D^{\ell, P}$. Las representaciones de $O(3)$ sobre el espacio de los armónicos esféricos tienen paridad $P = (-1)^{\ell}$.

Representaciones unitarias: Toda representación en base a matrices unitarias es irreducible o bien totalmente reducible. Toda representación de un grupo finito o un grupo continuo compacto es equivalente a una *representación unitaria*, es decir, una en que las matrices $D(g)$ son todas unitarias, $D^{\dagger}(g) = D^{-1}(g)$.

Para los grupos finitos, el número de representaciones irreducibles no equivalentes es igual al número de clases conjugadas. No existe una propiedad comparable para grupos continuos.

Caracteres y su ortogonalidad (producto escalar entre ellos): En cada representación $D(G)$, las matrices asociadas a dos elementos conjugados tienen la misma traza ya que para matrices cualquiera, $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(CAB)$. Se llama *carácter* de la clase K_a a la traza

$$\chi_a = \text{Tr}[D(g_a)] \quad (2.1.14)$$

Condición necesaria y suficiente para que dos representaciones $D_1(G)$ y $D_2(G)$ sean equivalentes es que tengan los mismos caracteres.

Los caracteres de RIs obedecen relaciones de ortogonalidad con respecto a un producto escalar que se define como suma sobre todas las clases conjugadas.

En el caso de grupos finitos esta relación es

$$\sum_{a=1}^r \gamma_a (\chi_a^\mu)^* \chi_a^\nu = \gamma \delta_{\mu\nu} \quad (2.1.15)$$

donde γ_a es el número de elementos en la clase K_a y γ es el número de elementos del grupo.

En el caso de grupos continuos, se integra—usando una medida $\mu(\alpha)$ propia del grupo—siendo α los parámetros que rotulan a cada clase conjugada. La ortogonalidad es

$$\int (\chi^\rho(\alpha))^* \chi^\nu(\alpha) d\mu(\alpha) = \delta_{\rho\nu} \quad (2.1.16)$$

EJEMPLO: Los caracteres del grupo de rotaciones $SO(3)$ son

$$\chi^\ell(R(\alpha)) = \frac{\sin(2\ell + 1)\frac{\alpha}{2}}{\sin\frac{\alpha}{2}} \quad (2.1.17)$$

y satisfacen,

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\pi \chi^{\ell_1}(\alpha) \chi^{\ell_2}(\alpha) (1 - \cos \alpha) d\alpha = \delta_{\ell_1 \ell_2} \quad (2.1.18)$$

No hay asterisco porque los caracteres son reales.

Determinación de las componentes irreducibles: Se ha visto que una representación reducible D de un grupo G admite una descomposición (2.1.13). Se trata de encontrar los coeficientes enteros a_μ . Sean χ_a los caracteres asociados a las clases conjugadas K_a de G . Ellos claramente tienen que tener la forma

$$\chi_a = \sum_{\mu} a_{\mu} \chi_a^{\mu}$$

Si se conoce el producto escalar $(\vec{\chi}^\mu, \vec{\chi}^\nu) = \delta_{\mu\nu}$, ellas aplica trivialmente a la igualdad anterior y se obtiene

$$a_{\mu} = (\vec{\chi}, \vec{\chi}^{\nu})$$

Se ha usado notación vectorial para indicar suma sobre todas las clases conjugadas usando la medida que corresponda.

La representación *adjunta* a otra: A toda representación matricial $D(G)$ se le puede asociar otra representación, llamada *adjunta* a D , constituida por las matrices traspuestas e inversas, y se la denota \bar{D} ,

$$\bar{D}(g) = \tilde{D}^{-1}(g) \quad (2.1.19)$$

Si la representación es unitaria, esto es $D^\dagger(g) = D^{-1}(g)$ para todo g , entonces

$$\bar{D} = \tilde{D}^\dagger = D^* \quad (2.1.20)$$

que son las matrices complejas conjugadas.

Dos lemas de Schur: (a) Si D^a y D^b son RIs de un grupo y existe una matriz A no nula para la cual $AD^a(G) = D^b(G)A$ necesariamente las dos RIs son equivalentes. (b) Si $D(G)$ es RI de G y existe matriz no nula A que conmuta con toda la representación, A necesariamente es múltiplo de la matriz unidad.

Antes se vió que dos autofunciones que pueden ser conectadas por una transformación de simetría, $\Psi_a = O_g \Psi_b$, necesariamente tienen asociado el mismo autovalor del hamiltoniano. El autoespacio que tales funciones engendra es un espacio de representación del grupo G de simetría y normalmente tal representación es irreductible. En los rarísimos casos en que esto no ocurre se habla de *degeneración accidental*.

2.2. Sobre grupos y álgebras de Lie

Grupo de Lie, parámetros y topología

Los grupos de Lie son grupos cuyos elementos pueden ser caracterizados por parámetros continuos reales, a_1, \dots, a_n . También puede haber parámetros discretos. En G la ley producto

$$g(a)g(b) = g(c) \quad (2.2.1)$$

queda totalmente definida por la dependencia de los c_λ en los parámetros a y b por medio de funciones analíticas,

$$c_\lambda = \phi_\lambda(a_1, \dots, a_n; b_1, \dots, b_n) \quad \text{o bien} \quad \mathbf{c} = \phi(\mathbf{a}; \mathbf{b}) \quad (2.2.2)$$

El entero n designa al número estrictamente necesario de parámetros para caracterizar a los elementos del grupo, pero siempre hay una infinidad de formas de parametrizar un grupo de Lie. Es convención que, cualquiera sea la parametrización de un grupo de Lie, al elemento neutro se le asocia el punto cero del espacio de parámetros, es decir, $g(a_1 = 0, \dots, a_n = 0)$ es siempre el elemento neutro del grupo. Como ya se ha dicho, un grupo de Lie se dice *compacto* si sus parámetros varían en un rango finito, de lo contrario es *no compacto*. $SO(3)$ es compacto y $SO(3,1)$ no es compacto.

Un grupo de Lie no enteramente trivial (es no abeliano) es el grupo $O(2)$ de las rotaciones en torno a un eje fijo de \mathbb{R}_3 y las reflexiones con respecto a planos σ que contienen al eje de rotación.

Dada una parametrización particular, se puede definir un espacio cuyos puntos tengan asociados los parámetros del grupo, los que juegan el papel de coordenadas en ese espacio. A tal espacio se le llama el *espacio topológico del grupo*. Diferentes parametrizaciones de un grupo pueden conducir a espacios algo diferentes, pero las características topológicas de esos espacios es siempre la misma para un mismo grupo.

Estructura local, generadores infinitesimales y álgebra

Los grupos de Lie, a pesar de su depurada teoría matemática, son definidos a partir de realizaciones muy concretas. Por ejemplo $SO(N)$ es el grupo de las rotaciones en \mathbb{R}_N , $SU(N)$ es el grupo cuya estructura definen las matrices complejas, unitarias y determinante 1 de $N \times N$ etc. La acción sobre un espacio particular se llama, la *representación natural* del grupo. Estas son representaciones porque definen la acción del grupo sobre un espacio de puntos $\mathbf{x} = (x^1, \dots, x^N)$. La acción del elemento $g(a)$ sobre el punto \mathbf{x} se define por las funciones

$$x'^j = f^j(x^1, \dots, x^N; a_1, \dots, a_n) \quad \text{o} \quad \mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x}; \mathbf{a}) \quad (2.2.3)$$

Si en la ecuación anterior se considera un incremento de los parámetros, $\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a} + d\mathbf{a}$, en el lado izquierdo se tiene $\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'$. Por componentes esto es

$$\begin{aligned} x'^j + dx'^j &= f^j(\mathbf{x} + d\mathbf{x}; \mathbf{a} + d\mathbf{a}) \\ &= f^j(\mathbf{x}; \mathbf{a}) + \left(\frac{\partial f^j}{\partial a_\sigma} \right)_{\mathbf{a}=\mathbf{a}} da_\sigma \end{aligned}$$

Tomando $\mathbf{a} = 0$ en la relación anterior se obtiene

$$dx^j = \left(\frac{\partial f^j}{\partial a_\sigma} \right)_{\mathbf{a}=0} da_\sigma \quad (2.2.4)$$

La prima ha desaparecido debido a que $\mathbf{a} = 0$. Esto se escribe

$$dx^j = u^{j\sigma}(\mathbf{x}) da_\sigma \quad (2.2.5)$$

La variación de \mathbf{x} recién obtenida induce un cambio sobre cualquier función $F(\mathbf{x})$,

$$\begin{aligned} dF(\mathbf{x}) &= \frac{\partial F}{\partial x^j} dx^j \\ &= \frac{\partial F}{\partial x^j} u^{j\sigma}(\mathbf{x}) da_\sigma \\ &= da_\sigma \left(u^{j\sigma} \frac{\partial}{\partial x^j} \right) F(\mathbf{x}) \\ &= i da_\sigma X_\sigma F(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

donde los

$$X_\sigma = -i u^{j\sigma}(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (2.2.7)$$

son los *generadores infinitesimales* asociados al grupo G en el espacio de las funciones F . Un teorema fundamental de la teoría de grupos de Lie dice que los generadores infinitesimales de un grupo G se cierran bajo la operación de conmutación, definiendo un *álgebra de Lie*,

$$[X_\rho, X_\sigma] = i C_{\rho\sigma}^\tau X_\tau \quad (2.2.8)$$

donde los coeficientes $C_{\rho\sigma}^\tau$ son números reales y se conocen como las *constantes de estructura* del grupo. El álgebra se define sobre el cuerpo de los reales.

Las constantes de estructura tiene algunas propiedades interesantes,

$$\begin{aligned} C_{\rho\sigma}^\tau &= -C_{\sigma\rho}^\tau \\ C_{\rho\sigma}^\tau C_{\tau\mu}^\nu + C_{\sigma\mu}^\tau C_{\tau\rho}^\nu + C_{\mu\rho}^\tau C_{\tau\sigma}^\nu &= 0 \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

$$g_{\mu\nu} = g_{\nu\mu} = A C_{\mu\alpha}^\beta C_{\nu\beta}^\alpha$$

A es una constante que se escoge. Un grupo de Lie es semisimple si y sólo si $\det g \neq 0$. Si G es compacto siempre se puede lograr que $g_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$.

Se define la matriz $g^{\lambda\nu}$ inversa de $g_{\mu\nu}$ y con ella se define el *operador de Casimir* C ,

$$g_{\mu\lambda} g^{\lambda\nu} = \delta_{\mu}^{\nu}, \quad C = g^{\mu\nu} X_{\mu} X_{\nu} \quad (2.2.10)$$

que, se puede demostrar, conmuta con todos los generadores X_{σ} del álgebra. El teorema de Schur garantiza que en las RIs C es múltiplo de la identidad.

Un operador $O_{g(a)}$ asociado a cualquier elemento del grupo puede representarse por

$$O_{g(a)} = e^{ia_{\sigma} X_{\sigma}} \quad (2.2.11)$$

Ejemplo: $SO(3)$

El espacio de parámetros: Se asocia a cada rotación $R(\theta, \phi, \alpha)$ un punto en el interior de una esfera de radio π de la manera que sigue. Los ángulos (θ, ϕ) son ángulos esféricos de siempre y se usan para definir la rotación de magnitud α a su alrededor,

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi, \quad 0 \leq \alpha \leq \pi$$

Los puntos asociados se obtienen dibujando el radio de la esfera caracterizado por la dirección (θ, ϕ) y, en este radio, se escoge el punto que está a distancia α del centro. De esta manera a cada punto de la esfera sólida le corresponde una única rotación y a cada rotación le corresponde al menos un punto de la esfera. Puesto que las rotaciones $(\theta, \phi, \alpha = \pi)$ y $(\pi - \theta, \phi + \pi, \alpha = \pi)$ son la misma rotación, se identifica los dos puntos asociados a ellas. Como a este par de rotaciones les corresponden puntos sobre el manto de la esfera que están diametralmente opuestos queda definida una topología especial asociado a $SO(3)$: puntos en la superficie que están diametralmente opuestos se identifican. Esto hace que el espacio topológico de $SO(3)$ sea doblemente conexo como se pasa a explicar.

En la figura anterior se muestra primero tres curvas que, en el espacio topológico asociado a $SO(3)$, son cerradas. La primera puede ser contraída continuamente a un punto, la segunda no puede ser contraída a un

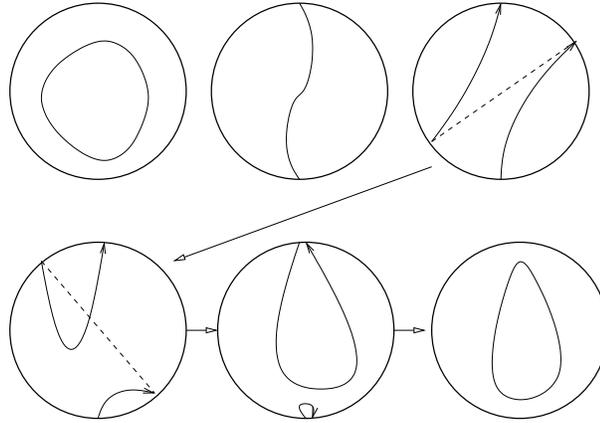


Figura 2.1: El espacio de parámetros de $SO(3)$ es una esfera sólida donde se identifica los puntos de la superficie que aparecen diametralmente opuestos. Hay dos clases de curvas cerradas: las que pueden ser contraídas continuamente a un punto y las que no se puede contraer a un punto. Esto implica que $SO(3)$ admite “representaciones bivaluadas”: spin semientero.

punto y la tercera nuevamente sí. Esta última deformación se ilustra en los diagramas que de la segunda fila.

Se concluye que el espacio de parámetros de $SO(3)$ tiene dos tipos de curvas cerradas no equivalentes, por esto se dice que $SO(3)$ es *doblemente conexo*.

Generadores infinitesimales de rotaciones: A las rotaciones definidas en el plano rs ,

$$\begin{aligned} x'^r &= x^r \cos \theta - x^s \sin \theta = f^r(x; \theta) \\ x'^s &= x^r \sin \theta + x^s \cos \theta = f^s(x; \theta) \end{aligned}$$

se le asocia (ejercicio) el generador infinitesimal

$$X_{rs} = -i \left(x^r \frac{\partial}{\partial x^s} - x^s \frac{\partial}{\partial x^r} \right)$$

y, en el caso especial de $SO(3)$, se definen los generadores infinitesimales $L_i = \varepsilon_{ijk} X_{jk}$ que satisfacen

$$[L_i, L_j] = i \varepsilon_{ijk} L_k \quad (2.2.12)$$

que son, salvo por un factor \hbar , los operadores de momento angular.

El grupo cobertor

Hay grupos de Lie con cualquier grado de conexión, incluso los hay infinitamente conexos. Los grupos de Lie para los cuales todas las curvas cerradas son topológicamente equivalentes a un punto se llaman *simplemente conexos*. A todo grupo de Lie G múltiplemente conexo le está asociado un grupo \bar{G} simplemente conexo que se llama el *cobertor* de G . Un grupo múltiplemente conexo y su cobertor pueden ser parametrizados de tal manera que ambos tengan la misma álgebra, en el sentido que las reglas de conmutación de sus generadores infinitesimales se satisfacen con los mismos parámetros de estructura.

El cobertor de $SO(3)$ es el grupo $SU(2)$ de las matrices unitarias de 2×2 :

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (2.2.13)$$

El espacio de parámetros topológicamente es la superficie tridimensional de una hiperesfera de radio uno en \mathbb{R}_4 que es simplemente conexo. El grupo cobertor del grupo propio de Lorentz $SO(3,1)$ es el grupo $SL(2, \mathbb{C})$, (matrices complejas de determinante 1).

EJERCICIO: *Considere el grupo de matrices*

$$\begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} & e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

Compruebe que son automáticamente de la forma (2.2.13). Encuentre los generadores infinitesimales asociados a cada uno de los tres parámetros. Descubra que dos de ellos conducen al mismo generador. Obtenga el tercer generador como el conmutador de los dos obtenidos y obtenga las relaciones de conmutación entre todos ellos comprobando que no se obtiene otros.

EJERCICIO: *A cada matriz U dada en (2.2.13) se le puede asociar una*

matriz de 3×3

$$R = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a^2 - b^{*2} - b^2 + a^{*2} & i(a^2 - b^{*2} + b^2 - a^{*2}) & 2(ab + a^*b^*) \\ -i(a^2 + b^{*2} - b^2 - a^{*2}) & a^2 + b^{*2} + b^2 + a^{*2} & -2i(ab - a^*b^*) \\ -2(a^*b + ab^*) & 2i(a^*b - ab^*) & 2(aa^* - bb^*) \end{pmatrix} \quad (2.2.14)$$

Compuebe que las matrices son reales y ortogonales. En efecto, son matrices de la representación natural de $SO(3)$. Note que a la matriz $-U$ le corresponde la misma matriz R , es decir, el grupo $SU(2)$ de las matrices U recorre dos veces al grupo $SO(3)$ de las matrices R . Suele decirse que las representaciones fieles de $SU(2)$ son representaciones “bivaluadas” (o espinoriales) de $SO(3)$. También debiera demostrarse que la ley producto es la misma.

2.3. Producto Kronecker y reglas de selección

Serie de Clebsch-Gordan

El producto Kronecker de dos representaciones de un grupo G define una nueva representación de G ,

$$D_{ik,j\ell}^{a,b}(g) \equiv D_{ij}^a(g) D_{j\ell}^b(g) \quad \text{para todo } g \in G \quad (2.3.1)$$

y se denota $D^{a,b}(G) = D^a(G) \times D^b(G)$. Aun si las representaciones factor son RIs, la representación producto es, en general, reductible y su descomposición se denomina *serie de Clebsch-Gordan*,

$$D^\mu \times D^\nu = \bigoplus_{\lambda} a_{\lambda}^{\mu\nu} D^\lambda \quad (2.3.2)$$

Las representaciones irreducibles de $O(3)$ son las representaciones $D^{\ell,P}$ de momento angular y la serie de Clebsch-Gordan es

$$D^{\ell_1,P_1} \times D^{\ell_2,P_2} = \bigoplus_{\ell=|\ell_1-\ell_2|}^{\ell_1+\ell_2} D^{\ell,P=P_1P_2} \quad (2.3.3)$$

Vectores y pseudovectores con respecto a $O(3)$

El grupo $O(3)$ actúa naturalmente sobre $L = \mathbb{R}_3$. Se definen matrices $D_{ij}(g)$ que representan al grupo (son ortogonales) y ellas definen transformaciones lineales en L . Típicamente se tiene transformaciones

$$x'^i = D_{ij}(g)x^j$$

y esta es la representación ($\ell = 1, P = -1$) de los más comunes vectores usados en física (posición, velocidad etc). La paridad es -1 porque los x^i cambian de signo bajo la inversión.

Consideremos el espacio de representación formado por dos réplicas del anterior: $\mathbb{R}_3 \times \mathbb{R}_3$. Es un espacio de dimensión 9 y sus elementos base pueden ser los $x^i y^j$. La acción del grupo sobre este espacio por definición es

$$x'^i y'^m = D_{ij}(g)D_{mn}(g)x^j y^n, \quad \text{que escribimos} \quad M'^{im} = D_{im,jn}(g)M^{jn}$$

Claramente este espacio tiene subespacios invariantes. El más trivial es el espacio unidimensional L_0 de las combinaciones $x^1 y^1 + x^2 y^2 + x^3 y^3$ que es la traza de M . Queda un espacio de dimensión 8 de las matrices $\bar{M} = M - \text{Tr}(M)$. Cada una de estas matrices sin traza se puede separar en una matriz simétrica y otra antisimétrica

$$\bar{M}_{ij} = S_{ij} + A_{ij}$$

que (ejercicio) constituyen espacios invariantes. El espacio de las matrices antisimétricas es tridimensional y el de las matrices simétricas (y sin traza) es de dimensión 5. Todo lo anterior corresponde a

$$D^{1,-1} \times D^{1,-1} = D^{0,+} \oplus D^{1,+} \oplus D^{2,+} \quad (2.3.4)$$

El espacio de las S_{ij} puede ser visto como el de los objetos

$$B_k = \varepsilon_{ijk} S_{jk}$$

que tienen tres componentes y, bajo $SO(3)$, transforman como vectores, pero como tienen paridad positiva (no cambian de signo bajo una inversión), y en física se los llama pseudovectores.

En física algunos pseudovectores muy conocidos son el momento angular y el campo magnético. El rotor de una función vectorial permite definir un pseudovector.

Reglas de selección

Si D^α y D^β son RI de G :

1. La serie de Clebsch-Gordan de $D^\alpha \times \overline{D}^\alpha$ contiene a la representación trivial una y solo una vez.
2. La serie de Clebsch-Gordan de $D^\alpha \times \overline{D}^\beta$ contiene a la representación trivial si y solo si $D^\alpha = D^\beta$

Si G es un grupo de transformaciones lineales y unitarias sobre un espacio de funciones ψ y existen operadores T_j , también sobre L , que transforman de acuerdo a una representación $D^T(G)$,

$$O_g T_i O_g^{-1} = D_{ji}^T T_j$$

y se tiene funciones ψ_j^μ base de la representación $D^\mu(G)$, entonces las funciones $T_i \psi_j^\mu$ pertenecen a un espacio de la representación $D^T(G) \times D^\mu(G)$.

Teorema de Wigner-Eckart: De lo anterior se desprende que los elementos de matriz

$$\langle \psi_k^\nu | T_i | \psi_j^\mu \rangle$$

son nulos si la descomposición de $D^T(G) \times D^\mu(G)$ no contiene a la representación $D^\nu(G)$.

Más adelante se verá, por ejemplo, que transiciones de un nivel a otro de una partícula en un potencial central ocurren debido a *operadores de transición* como los T_i anteriores. Si al estado inicial le corresponde la RI $(\ell, (-1)^\ell)$ de $O(3)$ y a la transición le corresponde $(\ell = 1, P_0)$, entonces sólo se podrá tener transiciones a estados

$$(\ell - 1, P_0(-1)^\ell), \quad (\ell, P_0(-1)^\ell), \quad (\ell + 1, P_0(-1)^\ell)$$

Si $P_0 = +1$ entonces la primera y la tercera transiciones no ocurren porque no existen estados con esas paridades, es decir, solo se tiene

$$(\ell, (-1)^\ell) \rightarrow (\ell, (-1)^\ell) \tag{2.3.5}$$

Pero si $P_0 = -1$ entonces solo se puede tener transiciones del primer y la tercer tipo

$$(\ell, (-1)^\ell) \rightarrow \begin{cases} (\ell - 1, -(-1)^\ell) \\ (\ell + 1, -(-1)^\ell) \end{cases} \quad (2.3.6)$$

2.4. El grupo de traslaciones 1D y bandas de energía

Potencial periódico

Sean T_{na} (a fijo y n un entero) operadores de traslación que actúan sobre cualquier espacio de funciones de x en la forma

$$T_{na} f(x) = f(x + na)$$

Estos operadores constituyen un grupo abeliano y discreto,

$$T_{na} T_{ma} = T_{(n+m)a}$$

Un representación natural de estos operadores es

$$T_{na} = e^{a \frac{d}{dx}}$$

Si en un problema cuántico unidimensional se tiene un potencial periódico, con período a

$$V(x) = V(x + na) \quad n \text{ entero}$$

entonces el hamiltoniano es invariante al grupo de traslaciones discretas $x \rightarrow x + na$,

$$H(x) = H(x + na) = T_{na} H(x) T_{na}^{-1}$$

y esto implica que si $\psi(x)$ es una autofunción de H , con autovalor E , entonces

$$\psi'(x) = T_{na} \psi(x) = \psi(x + na)$$

también es una autofunción con la misma energía. Pero como el problema es unidimensional no puede haber degeneración, lo que implica que

ambas funciones ψ' y ψ tienen que ser proporcionales y la constante de proporcionalidad tiene que ser 1, esto es

$$T_{na}\psi(x) = e^{ikna}\psi(x) \quad (2.4.1)$$

Por el momento k es un real arbitrario y (2.4.1) define la *representación* k del grupo de traslaciones. La única forma de compatibilizar que $\psi(x+na) = e^{ikna}\psi(x)$ es que ψ sea una función particular que se denomina ψ_k : con

$$\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$$

donde la función $u_k(x)$ es periódica de período a ,

$$u_k(x+a) = u_k(x) \quad (2.4.2)$$

A continuación se restringe el análisis al caso en que la partícula descrita por el hamiltoniano vive en una caja de volumen $L = Na$ con bordes periódicos. En tal caso la traslación en $L = Na$ debe ser la identidad,

$$T_{Na} = T_L = e^{ikL} = 1$$

de donde $kL = 2\pi r$ o bien

$$k = \frac{2\pi r}{L}, \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.4.3)$$

Caso particular

A continuación se considera el potencial periódico definido por

$$V(x) = \frac{\hbar^2 \lambda}{2m a} \sum_n \delta(x - na)$$

Entre cada nodo $x_n = na$ la partícula es libre y la función de onda debe tener una forma sinusoidal. Sea R_n el intervalo $(n-1)a \leq x \leq na$ y R_{n+1} el intervalo $na \leq x \leq (n+1)a$. Al plantear

$$\begin{aligned} R_n : \quad \psi &= A_n \sin q(x - na) + B_n \cos q(x - na) \\ R_{n+1} : \quad \psi &= A_{n+1} \sin q(x - (n+1)a) + B_{n+1} \cos q(x - (n+1)a) \end{aligned}$$

la exigencia de continuidad en $x = na$ implica

$$-A_{n+1} \sin qa + B_{n+1} \cos qa = B_n$$

Este es un sistema lineal y homogéneo por lo que se debe exigir que el determinante de los coeficientes sea nulo lo que lleva a

$$\cos ka = \frac{\lambda}{2qa} \sin qa + \cos qa \quad (2.4.4)$$

Puesto que el potencial está definido con δs , la derivada de ψ debe ser

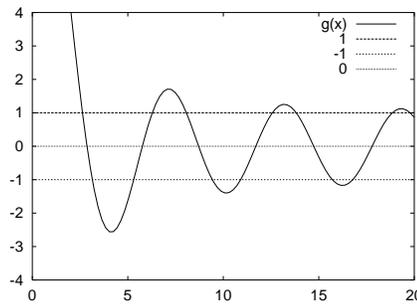


Figura 2.2: El lado derecho de (2.4.4), como función de q , es una $g(q)$ función oscilante decreciente que arroja solución q tan solo si $|g(q)| \leq 1$. Se ve que hay “bandas” de valores de q que son solución.

discontinua y

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} dx V(x) \psi(x) \\ &= \frac{\lambda}{a} B_n \end{aligned}$$

Si se evalúa la derivada de ψ a ambos lados del punto na

$$\begin{aligned} \psi'(na+) &= qA_{n+1} \cos qa + qB \sin qa \\ \psi'(na-) &= qA_n \end{aligned}$$

Con lo anterior se deducen

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= A_n \cos qa + B_n \left(\frac{\lambda}{qa} \cos qa - \sin qa \right) \\ B_{n+1} &= A_n \sin qa + B_n \left(\frac{\lambda}{qa} \sin qa - \cos qa \right) \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

Además se debe exigir que $\psi(x+a) = e^{ika}\psi(x)$ lo que lleva a las relaciones de recurrencia a

$$A_{n+1} = e^{ika}A_n, \quad B_{n+1} = e^{ika}B_n$$

que, al ser reemplazadas en (2.4.5) se obtiene

$$\begin{aligned} e^{ika}A_n &= A_n \cos qa + B_n \left(\frac{\lambda}{qa} \cos qa - \sin qa \right) \\ e^{ika}B_n &= A_n \sin qa + B_n \left(\frac{\lambda}{qa} \sin qa - \cos qa \right) \end{aligned}$$

Capítulo 3

Métodos aproximados independientes del tiempo

3.1. Método de perturbaciones en el caso no degenerado

Planteamiento general

En esta sección se tratará de problemas donde el espectro de energía es no degenerado.

Se tiene una ecuación de Schrödinger estacionaria

$$H |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle \quad (3.1.1)$$

que no puede ser resuelta en forma analítica pero tal que exista un caso más sencillo del mismo tipo que sí puede ser resuelto. Supongamos que se conoce la solución de

$$H_0 |\Phi_n\rangle = E_n^0 |\Phi_n\rangle \quad (3.1.2)$$

y tal que

$$H = H_0 + gV \quad (3.1.3)$$

El último término es la *perturbación* a que es sometido H_0 .

Una perturbación no es necesariamente una acción externa sobre el sistema. Por ejemplo, el átomo de helio puede estudiarse con un H_0 que es la suma de dos hamiltonianos de una carga en un campo Coulombiano, $H_0 = H_{01} + H_{02}$, y la perturbación gV puede ser la repulsión electrostática entre los electrones. En el laboratorio no hay parámetro físico alguno que pueda ser ajustado para estudiar, por ejemplo, el límite $g \rightarrow 0$. En cambio el caso de un átomo sometido a, por ejemplo, un campo magnético externo uniforme \vec{B} , puede ser estudiado para una amplia gama de intensidades de \vec{B} , en particular campo externo nulo.

Bajo ciertas condiciones, algunas de las cuales estudiaremos, la solución de (3.1.1) puede ser expresada como una serie de potencias en g , en torno a la solución conocida del problema (3.1.2). No se discutirá la convergencia de las series y, más aun, suele ocurrir que ellas sean divergentes y, sin embargo, los primeros términos de la serie describan en forma satisfactoria al *sistema perturbado*.

La suposición básica es que (3.1.1) es regular en el punto $g = 0$, en el sentido que el límite ($g \rightarrow 0$) de los $E_n(g)$ son los E_n^0 y los $|\Psi_n(g)\rangle$ convergen a los $|\Phi_n\rangle$:

$$E_n \rightarrow E_n^0, \quad \Psi_n \rightarrow \Phi_n \quad (3.1.4)$$

El método

Formalismo

Puesto que los Φ_n forman un conjunto completo, puede hacerse la expansión

$$\Psi_n = \mathcal{N}_g \left\{ \Phi_n + \sum_{k \neq n} C_{nk}(g) \Phi_k \right\} \quad (3.1.5)$$

De (3.1.4) se desprende que

$$C_{nk}(g=0) = 0, \quad \mathcal{N}_0 = 1 \quad (3.1.6)$$

La primera de estas condiciones se escribe entonces

$$C_{nk}(g) = gC_{nk}^1 + g^2C_{nk}^2 + \dots \quad (3.1.7)$$

y además se escribe formalmente

$$E_n = E_n^0 + gE_n^1 + g^2E_n^2 + \dots \quad (3.1.8)$$

De lo anterior se puede escribir

$$\Psi_n = \mathcal{N}_g \left\{ \Phi_n + \sum_j g^j \phi_n^j \right\} \quad (3.1.9)$$

donde,

$$\phi_n^1 = \sum_{k \neq n} C_{nk}^1 \Phi_k, \quad \phi_n^2 = \sum_{k \neq n} C_{nk}^2 \Phi_k \quad (3.1.10)$$

Existe libertad suficiente para que se pueda escoger que las correcciones a Φ_n sean ortogonales a este estado no perturbado.

Primer orden

Todo lo anterior se reemplaza en (3.1.1) y se iguala los coeficientes de g^m para cada m . Para $m = 0$ se reobtiene (3.1.2). Para $m = 1$ se obtiene

$$\sum_{k \neq n} C_{nk}^1 (E_k^0 - E_n^0) \Phi_k + V \Phi_n = E_n^1 \Phi_n \quad (\text{1er orden})$$

Se usa dos veces esta ecuación. La primera vez se hace el producto escalar con $\langle \Phi_n |$ obteniendo

$$gE_n^1 = \langle \Phi_n | gV | \Phi_n \rangle \quad (3.1.11)$$

y luego el producto escalar con $\langle \Phi_\ell |$ ($\ell \neq n$) lo que da

$$C_{nk}^1 = \frac{\langle \Phi_k | V | \Phi_n \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \quad (3.1.12)$$

Con estos coeficientes se construye la corrección de primer orden (3.1.10) a la función de onda.

Segundo orden

La ecuación que resulta de g^2 es

$$\begin{aligned}
 H_0 \sum_{k \neq n} C_{nk}^2 |\Phi_k\rangle + V \sum_{k \neq n} C_{nk}^1 |\Phi_k\rangle \\
 = E_n^0 \sum_{k \neq n} C_{nk}^2 |\Phi_k\rangle \\
 + E_n^1 \sum_{k \neq n} C_{nk}^1 |\Phi_k\rangle + E_n^2 |\Phi_n\rangle
 \end{aligned} \tag{3.1.13}$$

Si se hace el producto escalar con $\langle \Phi_n |$ resulta

$$\sum_{k \neq n} C_{nk}^1 \langle \Phi_n | V | \Phi_k \rangle = E_n^2$$

lo que lleva a

$$\begin{aligned}
 E_n^2 &= \sum_{k \neq n} \frac{\langle \Phi_k | V | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | V | \Phi_k \rangle}{E_n^0 - E_k^0} \\
 &= \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \Phi_k | V | \Phi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_k^0}
 \end{aligned} \tag{3.1.14}$$

No es tan raro que en ejemplos de interés se obtenga que E_n^1 sea nulo, lo que deja, en la práctica a (3.1.14) como la primera corrección a los autovalores de H_0 . En tal caso.

1. Si $n = 0$, es decir, se está corrigiendo la energía del estado fundamental, entonces todas las diferencias $E_0^0 - E_k^0$ son negativas y resulta $E_0^2 < 0$, es decir, la corrección da una energía fundamental corregida más baja que la de H_0 .
2. Suponiendo que todos los $\langle k | V | n \rangle$ son del mismo orden, se ve que la suma en (3.1.14) los sumandos correspondientes a niveles E_k^0 cercanos a E_n^0 tienen mayor influencia.
3. Si un nivel vecino a E_n^0 , es dominante en (3.1.14), entonces la corrección tendrá por efecto alejar a esos dos niveles. Se habla del efecto de “repulsión” entre niveles cercanos.

Si (3.1.13) se contrae con $\langle \Phi_\ell |$ (con $\ell \neq n$) y después de CHECK
!!!!!! un poco de trabajo se obtiene que

$$C_{n\ell}^2 = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \Phi_k | V | \Phi_n \rangle \langle \Phi_\ell | V | \Phi_k \rangle}{(E_n^0 - E_k^0)(E_n^0 - E_\ell^0)} - \frac{\langle \Phi_n | V | \Phi_n \rangle \langle \Phi_\ell | V | \Phi_n \rangle}{(E_n^0 - E_\ell^0)^2}$$

El coeficiente C_{nm}^2 queda indeterminado. Lo usual es determinarlo exigiendo que $|\Psi_n\rangle$ esté consistentemente normalizado hasta segundo orden, lo que lleva a que, con $\Im C_{nm}^2 = 0$, se debe cumplir

$$C_{nm}^2 = -\frac{1}{2} \sum_{\ell} |C_{n\ell}^1|^2$$

que se deja como ejercicio.

Ejemplo: Helio

Consideremos el hamiltoniano

$$H = \left[\frac{p_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2} \right] + \frac{e^2}{r_{12}}$$

donde el último término se toma como gV mientras que H_0 es la suma de dos átomos tipo hidrógeno con carga Z . Si E_H es la energía fundamental del átomo de hidrógeno, el autovalor de H_0 es

$$E_0^0 = 2Z^2 E_H, \quad E_H = -\frac{e^2}{2a}$$

Se sabe que la función de onda del estado fundamental del "átomo de hidrógeno" de carga Z es

$$\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-Zr/a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

En el problema actual entonces

$$\Phi = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a} \right)^3 e^{-Z(r_1+r_2)/a} \quad (3.1.15)$$

y se debe calcular (cálculo hecho en E01_helio.mws)

$$\begin{aligned}
 E_0^1 &= \left\langle \Phi \left| \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right| \Phi \right\rangle \\
 &= \frac{e^2 Z^6}{\pi^2 a^6} \int \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3 r_1 d^3 r_2 \\
 &= \frac{5Z}{4} E_H
 \end{aligned} \tag{3.1.16}$$

El valor de E_0^1 entonces es $\frac{5 \times 2^2}{4} 13,6 = 34,0$, mientras que $E_0^0 = -2 \times 13,6 \times 2^2 = -108,8$. La suma de ambas cantidades da $-74,8$. El valor experimental es $-78,975$.

Usando números más finos se obtiene:

Átomo	Z	E_0^0	E_0^1	suma	E_{exper}
He	2	-108.0	33.75	-74.25	-78.6
Li ⁺	3	-243.5	50.50	-193.00	-197.1
Be ⁺⁺	4	-433.0	67.50	-366.50	-370.0

Detalles del cálculo Lo primero que se hace es integrar

$$\int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{\|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\|} = \int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}}$$

sobre θ . Esta integral da

$$\frac{1}{r_1 r_2} (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|) = \begin{cases} 2/r_1 & \text{si } r_1 > r_2 \\ 2/r_2 & \text{si } r_1 < r_2 \end{cases}$$

El resto de las integrales son: las angulares en un integrando que ya no tiene ángulos y sobre las magnitudes r_1 y r_2 que son sencillas de hacer.

Ejemplo: efecto Stark caso no Coulombiano

Es el efecto de un campo eléctrico externo uniforme sobre un átomo hidrogenoide (H_0 es una partícula en un potencial central que no es el

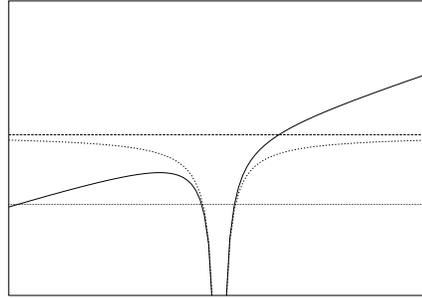


Figura 3.1: La figura muestra el potencial Coulombiano y también la suma del potencial Coulombiano y el término con el campo eléctrico. La línea horizontal más baja señala la altura del nivel fundamental. En principio hay efecto tunel.

potencial de Coulomb). El grupo de simetría del sistema no perturbado es $O(3)$. El término perturbativo es

$$V = -e\vec{E} \cdot \vec{r}$$

El campo eléctrico es tratado como una cantidad clásica, de modo que tan solo se debe calcular elementos de matriz de \vec{r} , es decir, a V le está asociada la representación $D^{\ell=1, P=-1}$. Entonces es claro, por el teorema de Wigner-Eckart que a primer orden el efecto es nulo,

$$E_{n\ell}^1 = -e \langle \Phi_{n\ell m} | \vec{E} \cdot \vec{r} | \Phi_{n\ell m} \rangle = 0 \quad (3.1.17)$$

Excepto en el caso en que el potencial en H_0 sea un potencial coulombiano, porque en tal caso los niveles tienen una degeneración más alta (Cada nivel admite $\ell = 0, \dots, n-1$). El caso coulombiano se analiza más adelante.

La figura ilustra que V es una cantidad divergente (en la figura tiende hacia la izquierda a $-\infty$ y hacia la derecha a $+\infty$). Sin embargo el efecto tunel para campos eléctricos “normales” resulta totalmente despreciable. En efecto, el campo eléctrico a nivel atómico es del orden

$$\frac{e}{a} \approx 10^9 \frac{\text{Volt}}{\text{cm}}$$

Pero este hecho matemático implica que la serie perturbativa no sea convergente. Las primeras correcciones, sin embargo, entregan un resultado que describe lo que se observa.

Corrección de primer orden

La determinación que en (3.1.17) se obtiene cero es tan sencillo que hay una forma mucho más directa y fácil de argumentar que E_{nl}^1 . Basta con notar que se debe calcular integrales del tipo $\int |\Phi_{nlm}|^2 \vec{r} d^3r$. Puesto que el integrando es impar, esta integral es nula.

El teorema de Wigner-Eckart, aplicado a este caso, dice que los elementos de matriz $\langle n' \ell' m' | V | n \ell m \rangle$ entre estados con paridad $P = (-1)^\ell$ pueden ser no nulos tan solo si $\ell' - \ell = \pm 1$ y $P' = -P$.

Sin pérdida de generalidad se puede escoger que el eje Z apunte en la dirección del campo \vec{E} , en cuyo caso el problema se reduce a calcular los elementos de matriz de z , pero $[z, L_z] = 0$, es decir, el operador L_z también conmuta con el hamiltoniano perturbado y el número cuántico m se conserva.

Las funciones de onda son del tipo

$$\Phi_{nl} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\hat{r}), \quad Y_{lm} = P_{lm}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

Se debe calcular el valor medio de $z = r \cos \theta$. Estas auto funciones Φ tienen paridad positiva o negativa, pero $|\Phi|^2$ es siempre de paridad positiva, de modo que $\langle \Phi | z | \Phi \rangle$ es necesariamente nulo,

$$E_n^1 = 0$$

Corrección de segundo orden

La corrección de segundo orden se reduce a calcular términos no diagonales

$$E_n^2 = \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^0 - E_k^0}$$

y la parte físicamente interesante del cálculo es

$$\int Y_{\ell' m'}^*(\hat{r}) \underbrace{\cos \theta}_{Y_{10}(\hat{r})} Y_{\ell m}(\hat{r}) d\hat{r}$$

Por las reglas de suma y de ortogonalidad de los esféricos armónicos, estas integrales sólo resultan no nulas si $m = m'$ y $\ell - \ell' = \pm 1$, por lo cual,

esquemáticamente

$$E_n^2 = e^2 E^2 \sum_{n'(\neq n)} \sum_{\ell'=\ell\pm 1} \frac{|\cdot|^2}{E_{n\ell}^0 - E_{n'\ell'}^0}$$

Ejemplo: correcciones a niveles nucleares debido a repulsión coulombiana

Se trata de estimar el valor medio de

$$V = \sum_{a<b}^Z \frac{e^2}{r_{ab}}, \quad \text{con } \frac{Z(Z-1)}{2} \text{ sumandos}$$

que se plantea como

$$\langle \phi_{jm} | V | \phi_{jm} \rangle \approx \frac{Z(Z-1)}{2} E_0$$

donde

$$E_0 = \int |\phi_{jm}|^2 \frac{e^2}{r_{ab}} d^3 r_a d^3 r_b$$

Sin entrar en detalles nucleares la densidad $\rho(r_a, r_b) = |\phi_{jm}|^2$, que es la densidad de probabilidad de encontrar a un protón en \vec{r}_a y a otro en \vec{r}_b se puede aproximar brutalmente a suponer primero que $\rho(r_a, r_b) \rho(r_a) \rho(r_b)$ y además que estas densidades individuales son uniformes dentro del núcleo y nulas afuera

$$\rho(r) = \frac{3}{4\pi R^3} \quad r < R$$

y nula si $r \geq R$, lo que da

$$E_0 = \frac{3Z(Z-1)}{5} \frac{e^2}{R}$$

El resultado, tomando $R = 1,45 N^{1/3} \frac{e^2}{R}$ tiene el orden de magnitud correcto.

Ejemplo: trampa para átomos ultrafríos

El modelo

Se logra tener átomos ultrafríos $T < 100\mu K$ en trampas producidas por espectro de interferencia de un laser. Se hará un modelo muy elemental del fenómeno que, no siendo muy realista, describe cualitativamente bien lo esencial de las frecuencias con que oscilan los átomos atrapados.

En un potencial periódico normalmente se tiene, debido a efecto túnel entre un mínimo y el siguiente, que en lugar de haber niveles de energía aislados haya bandas. Pero en nuestro caso se tendrá mínimos muy profundos y suficientemente separados para que ese efecto sea despreciable. Se considerará el hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + U_0 \sin^2 kx$$

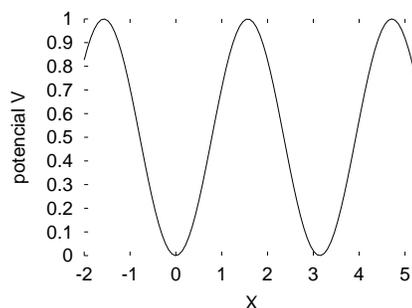


Figura 3.2: Potencial periódico.

donde la distancia entre un mínimo y el siguiente es

$$\delta_{\min} = \frac{2\pi}{k}$$

Adimensionalización y órdenes de magnitud

El potencial será aproximado a

$$U_0 k^2 x^2 - \frac{1}{3} U_0 k^4 x^4$$

El coeficiente de x^2 define la frecuencia característica ω_0 del sistema,

$$\omega_0^2 = \frac{2U_0 k^2}{m}$$

Se plantea resolver el problema de un oscilador armónico más una perturbación V proporcional a x^4 ,

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega_0^2 x^2, \quad V = -\frac{U_0}{3} k^4 x^4$$

A continuación se hará un análisis del orden de magnitud de cada uno de los términos, para lo cual se adimensionaliza en base a \hbar , ω_0 y m definiendo distancia, momento y energía características del sistema H_0 ,

$$x_c = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}, \quad p_c = \sqrt{\hbar m\omega_0}, \quad E_c = \hbar\omega_0$$

que, como se sabe, se relacionan con las propiedades del estado fundamental del oscilador. Es fácil comprobar la magnitud de cada uno de los tres términos de energía involucrados. Los dos términos en H_0 arrojan,

$$\frac{p_c^2}{2mE_c} = \frac{1}{2}, \quad \frac{m\omega_0^2 x_c^2}{2E_c} = \frac{1}{2}$$

mientras que la magnitud de V resulta

$$\frac{U_0 k^4 x_c^4}{3E_c} = \frac{U_0 k^4 \hbar}{3m^2 \omega_0^3} = \frac{\hbar k^2}{6m\omega_0} = \frac{1}{6} k^2 x_c^2$$

Pero este problema se ha planteado tal que $x_c \ll \delta_{\min}$ que se puede reducir a

$$k^2 x_c \ll 1$$

lo que hace de V una cantidad muy pequeña.

El hamiltoniano adimensional es

$$\bar{H} = \frac{1}{2} (\bar{p}^2 + \bar{x}^2) - \lambda \bar{x}^4 \quad (3.1.18)$$

con

$$\lambda = \frac{1}{6} k^2 x_c^2$$

La parte de oscilador armónico se puede escribir como

$$\bar{H}_0 = \mathcal{N} + \frac{1}{2}$$

donde

$$\bar{p} = \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad \bar{x} = i \frac{a - a^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad \mathcal{N} = a^\dagger a$$

y los autoestados normalizados $|n\rangle$ de \bar{H}_0 se pueden definir a partir del estado fundamental $|0\rangle$ por

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n |0\rangle}{\sqrt{n!}}$$

se cumple

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (3.1.19)$$

Cálculo de los corrimientos de las energías

Con lo anterior se calcula

$$\begin{aligned} E_n^1 &= -\lambda \langle n | x^4 | n \rangle \\ &= -\frac{\lambda}{4} \langle n | (a - a^\dagger)^4 | n \rangle \\ &= -\frac{\lambda}{4} \langle n | (a^2 + a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a)^2 | n \rangle \\ &= -\frac{\lambda}{4} \langle n | (a^2 + a^{\dagger 2} - \mathcal{N} - 1 - \mathcal{N})^2 | n \rangle \\ &= -\frac{\lambda}{4} \langle n | (a^2 a^{\dagger 2} + a^{\dagger 2} a^2 + (2\mathcal{N} + 1)^2) | n \rangle \\ &= -\frac{\lambda}{4} \left(\|a^{\dagger 2} |n\rangle\|^2 + \|a^2 |n\rangle\|^2 - (2n+1)^2 \right) \\ &= -\frac{\lambda}{4} (6n^2 + 6n + 3) \end{aligned}$$

El último paso se logró usando las propiedades (3.1.19). Los niveles corregidos no están igualmente espaciados.

3.2. Método perturbativo en el caso de espectro degenerado

En este caso se tiene

$$H_0 |\Phi_n^\rho\rangle = E_n |\Phi_n^\rho\rangle, \quad \rho = 1, \dots, N_n \quad (3.2.1)$$

donde ρ es el índice de degeneración. Se escoge base ortonormal

$$\langle \Phi_{n'}^{\rho'} | \Phi_n^\rho \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\rho\rho'} \quad (3.2.2)$$

El autovalor E_n se expande como antes y

$$\Psi_n = \mathcal{N}_g \left\{ \sum_{\rho} \alpha_{\rho} \Phi_n^{\rho} + g \sum_{k \neq n} C_{nk}^1 \sum_{\rho} \beta_{\rho} \Phi_k^{\rho} + \dots \right\} \quad (3.2.3)$$

y se obtiene la ecuación

$$\begin{aligned} (H_0 + gV) \{ \sum_{\rho} \alpha_{\rho} |\Phi_n^{\rho}\rangle + g \sum_{k \neq n} C_{nk}^1 \sum_{\rho} \beta_{\rho} |\Phi_k^{\rho}\rangle + \dots \} = \\ (E_n^0 + gE_n^1) \{ \sum_{\rho} \alpha_{\rho} |\Phi_n^{\rho}\rangle + g \sum_{k \neq n} C_{nk}^1 \sum_{\rho} \beta_{\rho} |\Phi_k^{\rho}\rangle + \dots \} \end{aligned}$$

Se aísla la ecuación con g en primer grado

$$\begin{aligned} H_0 \sum_{k \neq n} C_{nk}^1 \sum_{\rho} \beta_{\rho} |\Phi_k^{\rho}\rangle + V \sum_{\rho} \alpha_{\rho} |\Phi_n^{\rho}\rangle \\ = E_n^0 \sum_{k \neq n} C_{nk}^1 \sum_{\rho} \beta_{\rho} |\Phi_k^{\rho}\rangle + E_n^1 \sum_{\rho} \alpha_{\rho} |\Phi_n^{\rho}\rangle \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

Al hacer con ella el producto escalar usando $\langle \Phi_n^{\sigma} |$ se obtiene

$$\sum_{\rho} \alpha_{\rho} \langle \Phi_n^{\sigma} | V | \Phi_n^{\rho} \rangle = \alpha_{\sigma} E_n^1$$

Usando la notación

$$h^{\sigma\rho} = \langle \Phi_n^{\sigma} | V | \Phi_n^{\rho} \rangle$$

se llega a una ecuación de valores propios

$$h\vec{\alpha} = E_n^1 \vec{\alpha} \quad (3.2.5)$$

la que se resuelve en la forma usual planteando la ecuación secular

$$\det [h - E_n^1 \mathbf{1}] = 0 \quad (3.2.6)$$

Una vez que se tiene los valores propios, también se puede obtener, salvo por su normalización, los vectores propios $\vec{\alpha}$. Lo usual es normalizarlos a

$$\sum_{\rho} |\alpha_{\rho}|^2 = 1$$

Un ejemplo particularmente simple resulta si h es diagonal como ocurre al calcular el efecto Zeeman normal.

El átomo de hidrógeno de Pauli

Regla de intervalos de Landé esto se ve en MQ1

Ya se vió que el hamiltiniano de Pauli (1.8.9) que contiene un término de acoplamiento spin-órbita, el que acá es tomado como la perturbación al hamiltoniano simple. En lo que sigue conviene hacer uso de la identidad entre operadores

$$\frac{1}{2} (J^2 - L^2 - s^2) = \vec{L} \cdot \vec{s}$$

La ecuación secular en este caso es trivial porque es diagonal. En efecto, a primer orden, los únicos elementos de matriz de la perturbación son

$$\begin{aligned} & \langle n\ell sJM | \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{s} | n\ell sJM \rangle \\ &= \langle n\ell | \xi(r) | n\ell \rangle \langle \ell sJM | \frac{J^2 - L^2 - s^2}{2} | \ell sJM \rangle \\ &= \xi_{n\ell} \frac{J(J+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2} \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

Los intervalos del desdoblamiento entre los subniveles consecutivos del desdoblamiento de $E_{n\ell}^0$ son

$$\Delta E_{n\ell sJ} = \xi_{n\ell} J, \quad \text{regla de intervalos de Landé}$$

Efecto Zeeman anómalo

Se trata del caso en que se agrega al hamiltoniano de Pauli una interacción con un campo magnético externo uniforme. Se debe agregar dos términos: el acoplamiento \vec{B} -órbita ya visto: $-\frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot \vec{L}$ y el acoplamiento entre el spin (el momento magnético intrínseco del electrón) y el campo magnético, $-\frac{e}{mc} \vec{s} \cdot \vec{B}$. Tomando el eje Z en la dirección de \vec{B} la perturbación es

$$V = -\frac{eB}{2mc} (L_z + 2s_z)$$

El hamiltoniano H_0 es el de Pauli, que tiene autoestados $|n, \ell, s = \frac{1}{2}, J, M\rangle$ definidos en (1.8.11). Puesto que M es el autovalor de $L_z + s_z$, la perturbación se separa en $(L_z + s_z) + s_z$. La primera parte es trivialmente diagonal,

es decir arroja un término proporcional a $M \delta_{MM'}$. Lo que resta es calcular la segunda parte:

$$\begin{aligned} & \left\langle n, \ell, s = \frac{1}{2}, J, M' \left| V \right| n, \ell, s = \frac{1}{2}, J, M \right\rangle \\ &= -\frac{eB}{2mc} \left(\hbar M \delta_{MM'} + \left\langle n, \ell, s = \frac{1}{2}, J, M' \left| s_z \right| n, \ell, s = \frac{1}{2}, J, M \right\rangle \right) \end{aligned}$$

pero de (1.8.11) se ve que debe calcularse los elementos de matriz de s_z entre $\langle n, \ell, s = \frac{1}{2}, J, M' |$ y $|n, \ell, s = \frac{1}{2}, J, M\rangle$, es decir, entre el bra

$$\pm \sqrt{\ell \pm M' + \frac{1}{2}} \langle + | \left\langle \ell M' - \frac{1}{2} \right| + \sqrt{\ell \mp M' + \frac{1}{2}} \langle - | \left\langle \ell M' \frac{1}{2} \right|$$

y el ket

$$\pm \sqrt{\ell \pm M + \frac{1}{2}} \left| \ell M - \frac{1}{2} \right\rangle |+\rangle - \sqrt{\ell \mp M + \frac{1}{2}} \left| \ell M \frac{1}{2} \right\rangle |-\rangle$$

todo con un factor común $\hbar / \sqrt{2(2\ell+1)}$. Haciendo uso que los estados de spin son ortogonales se obtiene

$$\begin{aligned} \langle ..M' | s_z | ..M \rangle &= \frac{\hbar}{2(2\ell+1)} \left[(\ell \pm M + \frac{1}{2}) - (\ell \mp M + \frac{1}{2}) \right] \\ &= \pm \frac{\hbar M}{2\ell+1} \delta_{MM'} \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

Agrupando los distintos resultados se obtiene la matriz diagonal asociada a V ,

$$\left\langle n \ell \frac{1}{2} JM \left| V \right| n \ell \frac{1}{2} JM \right\rangle = -\frac{e\hbar BM}{2mc} \left(1 \pm \frac{1}{2\ell+1} \right)$$

El último paréntesis es el factor de Landé $g_{1/2}$ para $s = \frac{1}{2}$. Se puede demostrar que para cualquier spin resulta

$$g_s = 1 + \frac{J(J+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2J(J+1)}$$

Ejemplo: efecto Stark caso Coulombiano

Se considerará el caso $n = 2$. En este caso se tiene estados ($\ell = 0, m = 0$) y ($\ell = 1, m = 0, \pm 1$). Puesto que L_z conmuta con el hamiltoniano perturbado, se puede escoger autoestados simultáneos de H y L_z , es decir, los autoestados de H tienen un valor de m bien definido. De aquí que los elementos de matriz $\langle n\ell'm' | V | n\ell m \rangle$ son nulos salvo cuando $m = m'$. De aquí que los elementos de matriz de la perturbación usando los estados $|211\rangle$ y $|21-1\rangle$ solo dan no nulos en la diagonal. Tampoco se mezclan con los dos estados con $m = 0$. Los estados $|211\rangle$ y $|21-1\rangle$ tienen m en la forma $e^{im\phi}$ de modo que, por ejemplo, $\langle 2, 1, 1 | z | 2, 1, 1 \rangle$ no depende de m (las exponenciales se eliminan). Trivialmente, entonces, dos de los autovalores de la matriz de 4×4 de V son iguales y valen

$$E_{|m|=1}^1 = -eE \langle 2, 1, 1 | z | 2, 1, 1 \rangle = -eE \langle 2, 1, -1 | z | 2, 1, -1 \rangle$$

La igualdad se produce porque los factores con m en las respectivas integrales desaparecen. Es decir, hay un nivel desdoblado, asociado a $|m| = 1$ que es dos veces degenerado.

Tan solo se pueden mezclar los estados $|n\ell m\rangle$: $|200\rangle$ y $|210\rangle$ y lo que queda, entonces, es la ecuación secular

$$\det \begin{bmatrix} eE \langle 200 | z | 200 \rangle - \lambda & eE \langle 200 | z | 210 \rangle \\ eE \langle 210 | z | 200 \rangle & eE \langle 210 | z | 210 \rangle - \lambda \end{bmatrix} = 0 \quad (3.2.9)$$

pero los elementos diagonales son nulos. La razón en el caso 200 es porque violan $\Delta\ell = \pm 1$ y en el caso 210 porque viola paridad ya que tanto V como 210 tienen paridad negativa. Todo esto conduce a dos autovalores E^1 que corresponden a $m = 0$, (ver Stark-Coulomb.mws)

$$E_{m=0\pm}^1 = \pm eE | \langle 210 | z | 200 \rangle |$$

En la práctica, entonces, solo se debe calcular un solo elemento de matriz y se usa

$$\begin{aligned} \Phi_{2,0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{(2a)^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a} \right) e^{-r/2a} \\ \Phi_{2,1,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{(2a)^{3/2}} \frac{r \cos \theta}{a} e^{-r/2a} \end{aligned}$$

y se obtiene que el par de estados $m = 0$ originalmente degenerados se separan en dos con una diferencia de energía

$$E_{m=0\pm}^1 = \pm 3ae\|\vec{E}\|$$

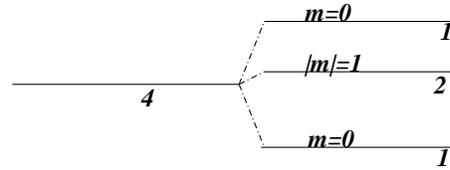


Figura 3.3: La figura indica las degeneraciones de los tres niveles en que se desdobra el nivel atómico $n = 2$ debido a un campo eléctrico uniforme.

Partículas idénticas

Sea H el hamiltoniano que describe un sistema de dos partículas de igual masa, por ejemplo,

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

y que, se denotará por $H(1,2)$. Se dice que se trata de dos partículas idénticas si el hamiltoniano es invariante al intercambio de las variables de ambas partículas,

$$H(1,2) = H(2,1)$$

En particular esto requiere que $V(1,2) = V(2,1)$.

Si denotamos por P al operador que intercambia ambas partículas,

$$PH(1,2)P^{-1} = H(2,1) = H(1,2)$$

se ve que P conmuta con H ; P es un operador de simetría del sistema.

Sea $\Psi(1,2)$ una función de onda del sistema en el sentido que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(1,2) = H(1,2)\Psi(1,2)$$

Supongamos que $\Psi'(1,2) \equiv P\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$ no es proporcional a $\Psi(1,2)$. En tal caso Ψ' es una nueva función de onda del sistema ya que P conmuta con H . Por lo tanto, cualquier combinación lineal de Ψ y Ψ' también es una función de onda del sistema. En particular, las funciones

$$\Psi_S(1,2) = \frac{\Psi + \Psi'}{\sqrt{2}}, \quad \Psi_A(1,2) = \frac{\Psi - \Psi'}{\sqrt{2}}$$

que son la función simétrica y la función antisimétrica respectivamente.

Un sistema de n partículas idénticas es descrito por un hamiltoniano $H(1,2,\dots,n)$ que es invariante a cualquier permutación de sus argumentos. (Existen $n!$ permutaciones posibles de n objetos).

Se postula que en la naturaleza existen tan solo dos tipos de partículas en relación al efecto de estas permutaciones:

Un sistema de n **bosones** idénticos es descrito por una función de onda $\Psi_B(1,\dots,n)$ totalmente simétrica con respecto a permutaciones de sus argumentos,

$$\Psi_B = \mathcal{P}\Psi_B \quad \text{para toda permutación } \mathcal{P}$$

Los bosones tienen spin entero.

Un sistema de n **fermiones** idénticos es descrito por una función de onda $\Psi_F(1,\dots,n)$ totalmente antisimétrica con respecto a permutaciones de sus argumentos,

$$\Psi_F = \delta_{\mathcal{P}} \mathcal{P}\Psi_F \quad \text{para toda permutación } \mathcal{P}$$

donde $\delta_{\mathcal{P}}$ es la paridad de la permutación. Los fermiones tienen spin semientero.

La simetría de la función de onda se preserva en la evolución temporal porque, por definición, los operadores \mathcal{P} de permutación conmutan con el hamiltoniano.

Una forma muy cruda de construir funciones de onda $\Psi(1,\dots,n)$ simétricas parte de funciones individuales ψ_1,\dots,ψ_n . Una función totalmente simétrica se construye sumando los productos de ellas con los argumentos ordenados de todas las formas posibles. Por ejemplo,

$$\begin{aligned} \Psi_B(1,2,3) = & \psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3) + \psi_1(3)\psi_2(1)\psi_3(2) + \\ & \psi_1(2)\psi_2(3)\psi_3(1) + \psi_1(1)\psi_2(3)\psi_3(2) + \\ & \psi_1(2)\psi_2(1)\psi_3(3) + \psi_1(3)\psi_2(2)\psi_3(1) \end{aligned}$$

Se podría dar en forma similar un ejemplo de construcción de una función antisimétrica, pero en este caso existe la construcción en base a los *determinantes de Slater*,

$$\Psi_F(1,\dots,n) = \det \begin{bmatrix} \psi_1(1) & \psi_2(1) & \dots & \psi_n(1) \\ \psi_1(2) & \psi_2(2) & \dots & \psi_n(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(n) & \psi_2(n) & \dots & \psi_n(n) \end{bmatrix}$$

Los electrones son fermiones y por lo tanto un estado de n electrones debe ser descrito por una función antisimétrica. Si se trata de construir un determinante de Slater en que dos de las funciones individuales sea iguales, se tendría que dos de las columnas de la matriz de arriba serían iguales, lo que hace automáticamente nula a la función, de aquí que ahora el principio de exclusión de Pauli de 1925 sea un corolario.

El principio de Pauli dice, entonces, que un estado atómico ($n, \ell = 0$) (estado S) solo puede tener dos electrones. Por eso, por ejemplo, el carbono tiene una estructura

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$$

y en sólidos resulta la noción de *energía de Fermi*.

En el caso de los bosones se tiene la noción de *condensado de Bose* que fué observado por primera vez en 1995.

Ejemplo con efectos de spin: las valencias del átomo de nitrógeno

Algunas palabras sobre átomos

El hamiltoniano genérico que se considerará para átomos en principio incluye dinámicamente tan solo a los electrones en las capas incompletas:

$$\begin{aligned} H &= \sum_a \left(\frac{p_a^2}{2m} + \phi(r_a) \right) + \sum_a \left(-\frac{Ze^2}{r_a} - \phi(r_a) + \sum_{b(<a)} \frac{e^2}{r_{ab}} \right) + \sum_a \xi(r_a) \vec{\ell}_a \cdot \vec{s}_a \\ &= H_0 + V_1 + V_2 \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

donde en H_0 aparece un potencial central ϕ que es el efecto del núcleo y de las capas completas interiores. El término V_1 resta el potencial ϕ y agrega el potencial coulombiano del electrón con el núcleo. El término V_2 incorpora los acoplamientos spin-órbita.

En átomos liviano $V_1 \gg V_2$ y en átomos muy pesados ocurre lo contrario. Los primeros están dominados por acoplamientos de los $\vec{\ell}$ individuales para originar en \vec{L} (y al mismo tiempo, debido al principio de Pauli, se acoplan los spines para dar un S total). Al final se considera el acoplamiento LS debido a V_2 .

En átomos livianos el nivel fundamental se determina usando las reglas de Hund: (a) se escoge los niveles con mayor valor de S . (b) Para un valor fijo de S , el nivel con máximo L está más abajo. (c) Para S y L fijos, si la capa está menos de a medio llenar, el nivel más bajo tiene el valor $J = |L - S|$, si no, tiene el valor $J = L + S$.

La regla (a) dice que la parte espinorial es lo más simétrica posible y por lo tanto la parte orbital es antisimétrica, los electrones se mantienen distantes y la repulsión coulombiana es menor. La regla (b) permite que la parte orbital tenga el máximo de lóbulos, lo que nuevamente permite electrones más distantes.

Los átomos pesados tienen propiedades relacionadas con que cada electrón acopla su ℓ con su s , dando origen a un j individual, porque V_2 es dominante, y finalmente se produce un acoplamiento jj que da el J total.

El caso del nitrógeno

La valencia de un átomo corresponde al valor $2J$ del estado en que está.

La configuración base del nitrógeno es de dos capas cerradas: $1s^2 2s^2$ más una capa con tres electrones $2p^3$. El sistema puede verse como el de tres electrones en estados individuales $\ell = 1$ y a eso se agrega el spin. En total se tiene 6 funciones individuales debido a los tres posibles valores para m multiplicado por dos debido a $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Ellas se pueden denotar: $1^+, 1^-, 0^+, 0^-, -1^+, -1^-$ (en general la notación es m^{m_s}). Con seis funciones para tres electrones se puede construir

$$20 = \binom{6}{3}$$

determinantes de Slater lo que llevaría a resolver una ecuación secular de 20×20 .

Se puede simplificar el problema si se sabe que en átomos livianos se acopla primero los ℓ dando origen a un L y separadamente se acoplan los espines dando un S . A este nivel intermedio el grupo de simetría es $SO(3)_L \times SU(2)_S$. Las representaciones de este grupo son (D^L, D^S) y sus dimensiones son $(2L + 1)(2S + 1)$.

Solo secundariamente—energéticamente menos importante—se da el acoplamiento LS para dar estados con J bien definido y el grupo de simetría es $SU(2)_J$.

Los 20 determinantes de Slater se clasifican en la tabla que sigue:

$$\begin{array}{c|cccc}
 M_S = & -3/2 & -1/2 & 1/2 & 3/2 \\
 \hline
 M_L = 2 & & d'_1 & d_1 & \\
 1 & & d'_2 d'_3 & d_2 d_3 & \\
 0 & d'_7 & d'_4 d'_5 d'_6 & d_4 d_5 d_6 & d_7 \\
 -1 & & \bar{d}'_2 \bar{d}'_3 & \bar{d}_2 \bar{d}_3 & \\
 -2 & & \bar{d}'_1 & \bar{d}_1 &
 \end{array} \tag{3.2.11}$$

donde los determinantes d_k son

$$\begin{aligned}
 d_1 &= (1^+ 1^- 0^+) \\
 d_2 &= (1^+ 1^- - 1^+) \\
 d_3 &= (1^+ 0^+ 0^-) \\
 d_4 &= (1^+ 0^+ - 1^-) \\
 d_5 &= (1^+ 0^- - 1^+) \\
 d_6 &= (1^- 0^+ - 1^+) \\
 d_7 &= (1^+ 0^+ - 1^+)
 \end{aligned}$$

Un d'_k se obtiene del correspondiente d_k invirtiendo los signos de los m_s , y un \bar{d}'_k se obtiene del correspondiente d_k invirtiendo los signos de los m .

En el caso actual no hay determinantes de Slater con $L = 3$. Para construir una función con $L = 3$ se tendría que usar dos funciones repetidas.

En (3.2.11) hay solo dos funciones con $M_L = 2$ (que se ha designado d_1 y d'_1), las que difieren en $M_S = \pm \frac{1}{2}$. Se adivina entonces que hay un subespacio $(L = 2, S = \frac{1}{2})$, que tiene dimensión $10 = (2 \cdot 2 + 1)(2 \cdot \frac{1}{2} + 1)$. Hay un solo determinante con $M_S = 3/2$ lo que sugiere el espacio $(L = 0, S = 3/2)$ de dimensión 4. Quedan aun seis funciones que se adivina que corresponden a $(L = 1, S = \frac{1}{2})$ de dimensión 6.

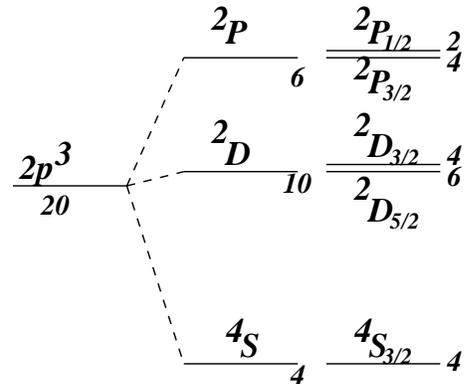


Figura 3.4: Desdoblamiento del nivel $2p^3$.

Esto muestra que el espacio de dimensión 20 se separa en tres espacios invariantes, bajo la acción de $SO(3)_L \times SU(2)_S$, de dimensiones 4, 10 y 6 como muestra la figura 3.4. Las correcciones al autovalor de energía se obtienen en forma aproximada calculando

$$\begin{aligned} E_1(^2D) &= \langle 1^+ 1^- 0^+ | V_1 | 1^+ 1^- 0^+ \rangle \\ E_1(^4S) &= \langle 1^+ 0^+ - 1^+ | V_1 | 1^+ 0^+ - 1^+ \rangle \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

Para conocer $E_1(^2P)$ se debe calcular los elementos de matriz de V_1 con las funciones ($M_L = 1, M_S = \frac{1}{2}$). Esta matriz de 2×2 tiene autovalores $E_1(^2D)$ y $E_1(^2P)$, lo que garantiza que su traza es la suma de estos dos autovalores. De aquí que

$$\begin{aligned} E_1(^2P) &= \langle 1^+ 1^- - 1^+ | V_1 | 1^+ 1^- - 1^+ \rangle \\ &+ \langle 1^+ 0^+ 0^- | V_1 | 1^+ 0^+ 0^- \rangle - E_1(^2D) \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

A continuación se debe hacer la segunda corrección correspondiente al acoplamiento LS . Esto hace necesario contruir autofunciones $|LSJM\rangle$ asociados a los tres subniveles ya calculados y luego, con ellos se construye matrices

$$\langle LSJM' | V_2 | LSJM \rangle$$

la que se debe diagonalizar. Esto conduce finalmente a los cinco niveles que aparecen a la derecha en la figura 3.4.

3.3. Método variacional

El método

Demostraremos que si H es un operador autoadjunto y se calcula el promedio $E[\Psi]$ de H con una función Ψ normalizable, entonces este promedio es estacionario ante variaciones de Ψ si y solo si Ψ es una autofunción de H y el promedio es el autovalor asociado.

Se define el promedio de H con respecto a una función de onda arbitraria Ψ como

$$E = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

Puesto que H es autoadjunto, E es real. La relación anterior se puede escribir en la forma

$$\langle \Psi | (H - E) | \Psi \rangle = 0$$

Si se varía Ψ también cambia el promedio E ,

$$\langle \delta\Psi | (H - E) | \Psi \rangle + \langle \Psi | (H - E) | \delta\Psi \rangle - \langle \Psi | \delta E | \Psi \rangle = 0$$

Exigir que $E[\Psi]$ esté en un punto estacionario corresponde a $\delta E = 0$ y la ecuación queda

$$\langle \delta\Psi | (H - E) | \Psi \rangle + \langle \Psi | (H - E) | \delta\Psi \rangle = 0 \quad (3.3.1)$$

Aparte de hacer la variación $\Psi \rightarrow \Psi + \delta\Psi$ también puede hacerse la variación $\Psi \rightarrow \Psi + i\delta\Psi$, la que conduce a

$$\langle \delta\Psi | (H - E) | \Psi \rangle - \langle \Psi | (H - E) | \delta\Psi \rangle = 0 \quad (3.3.2)$$

lo que permite afirmar que

$$\langle \delta\Psi | (H - E) | \Psi \rangle = 0, \quad \langle \Psi | (H - E) | \delta\Psi \rangle = 0 \quad (3.3.3)$$

y como la variación es arbitraria está garantizado que esto se satisface tan solo si $(H - E)|\Psi\rangle = 0$, es decir, Ψ es una autofunción y E es un autoestado.

Esta propiedad de los promedios $E[\Psi]$ se utiliza para encontrar valores aproximados para los valores propios a partir de usar un espacio de funciones parametrizadas tan próximas al espacio de autofunciones como sea posible.

Dado un hamiltoniano H , normalmente no se sabe bien cual es el espacio L que expanden las desconocidas autofunciones Ψ , pero argumentos matemáticos y físicos suelen permitir construir una clase de funciones ϕ que expanden un espacio L' que, por lo general, es un subespacio de L . Una modalidad consiste en darnos funciones ϕ con unos pocos parámetros, $\phi(a, b, \dots)$ para calcular $E[\phi]$ que ahora es una función ordinaria de estos parámetros, $E(a, b, \dots)$ y, en este espacio de parámetros se debe buscar el o los puntos estacionarios para la función E para valores $(\bar{a}, \bar{b}, \dots)$. Con tales valores se tiene un $\phi(\bar{a}, \bar{b}, \dots)$ que es una forma aproximada para la función propia asociada.

Ejemplo 1: el oscilador armónico unidimensional

Si se escoge como función de prueba sin normalizar

$$\Psi = x e^{-\alpha x^2}$$

y se obtiene que

$$\langle E \rangle (a) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi H \Psi dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2 dx} = \frac{3\hbar^2 \alpha}{2m} + \frac{3m\omega^2}{8\alpha}$$

Este promedio es extremo es $\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$ lo que permite deducir

$$E = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

Puesto que Ψ se anula una vez, se trata del primer estado excitado del sistema.

EJERCICIO: Escoja

$$\Psi = \frac{1}{a+x^4}$$

y demuestre que se obtiene

$$E_0 = \frac{\sqrt{10}}{6} \hbar \omega \approx 0,527 \hbar \omega$$

y si se toma $\Psi = \frac{x}{a+x^4}$ se obtiene una solución para el primer estado excitado y resulta $E_1 \approx 1,558 \hbar \omega$.

Ejemplo 2: estado fundamental del He

Para el hamiltoniano

ver Schiff

$$H = \left(\frac{p_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} \right) + \left(\frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_{12}}$$

con el último término nulo la función de onda exacta para el estado fundamental es (3.1.15) Se usará el método variacional usando Φ como función de prueba con Z como parámetro que se deja libre. Al calcular

$$E_0 \leq \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}$$

se obtiene

$$E_0 \leq \frac{e^2}{a} \left[Z^2 - \frac{27Z}{8} \right]$$

cuyo mínimo es para $Z = \frac{27}{16} \approx 1,69$. La función óptima toma en cuenta que cada electrón ve un núcleo apantallado. Usando este valor de Z resulta un E_0 que se compara con el experimental

$$\begin{aligned} E_0^{Z=2} &\approx -2,75 \frac{e^2}{a} \\ E_0^{Z=1,69} &\approx -2,85 \frac{e^2}{a} \\ E_0^{\text{experim}} &\approx -2,904 \frac{e^2}{a} \end{aligned}$$

3.4. Moléculas. Aproximación de Born-Oppenheimer

Reducción del problema

La ecuación de Schrödinger para una molécula puede esquemáticamente escribirse en la forma

$$\left(\sum_a \frac{P_a^2}{2M_a} + \sum_b \frac{p_b^2}{2m} + \underbrace{V_{nn} + V_{ne} + V_{ee}}_V \right) \Psi = E\Psi \quad (3.4.1)$$

donde el primer término es la energía cinética de los núcleos, K_n , el segundo el de los electrones, K_e y los términos V_{ij} son núcleo-núcleo, núcleo-electrón y electrón-electrón respectivamente.

En lo que sigue se incorpora algunas suposiciones que juegan un papel central. Las escalas de tiempo de la dinámica de los núcleos y de los electrones son muy diferentes. Para resolver la dinámica de los electrones se supone que los núcleos están quietos (los \vec{R}_a entran sólo como parámetros en esta etapa) y para la dinámica de los núcleos se supone que la función de onda electrónica no es muy sensible al valor de los R .

Se verá que hay tres escalas de energía en este problema: las energías de los orbitales electrónicos, las energías vibracionales de la molécula y las energías rotacionales de la molécula. Las dos últimas escalas son pequeñas comparadas con la primera.

Como primera aproximación se supondrá que los grados de libertad de los núcleos están congelados. El hamiltoniano de interés en esta etapa es

$$H_0 = \sum_b \frac{p_b^2}{2m} + V(\vec{r}; \vec{R}) = K_e + V(\vec{r}; \vec{R}) \quad (3.4.2)$$

donde los \vec{R} son parámetros. La ecuación de Schrödinger es

$$\left(K_e + V(\vec{r}; \vec{R}) \right) \phi_k^\sigma(\vec{r}; \vec{R}) = \varepsilon_k(\vec{R}) \phi_k^\sigma(\vec{r}; \vec{R}) \quad (3.4.3)$$

De los niveles energéticos que surjan típicamente solo interesa el más bajo (o unos pocos más bajos). Las funciones $\phi_k^\sigma(\vec{r}; \vec{R})$, que son funciones de muchos electrones, se construyen ortonormales. En lo que sigue supondremos que solo se estudia el nivel $\varepsilon_0(\vec{R})$ más bajo.

Una vez que se resuelve esta ecuación (numéricamente), se procede a variar los \vec{R} para encontrar el mínimo de $\varepsilon_0(\vec{R})$, es decir, se resuelve

$$\nabla_R \varepsilon_0(\vec{R}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{R} = \vec{R}_0 \quad (3.4.4)$$

Teniendo la solución de este problema se regresa al problema original y las funciones Ψ se construyen en la forma

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_\sigma \Phi_\sigma(\vec{R}) \phi_0^\sigma(\vec{r}; \vec{R})$$

y se reemplaza en el H original,

$$\begin{aligned} & K_n \sum_\sigma \Phi_\sigma(\vec{R}) \phi_0^\sigma(\vec{r}; \vec{R}) \\ & + \sum_\sigma \varepsilon_0(\vec{R}) \Phi_\sigma(\vec{R}) \phi_0^\sigma(\vec{r}; \vec{R}) = E \sum_\sigma \Phi_\sigma(\vec{R}) \phi_0^\sigma(\vec{r}; \vec{R}) \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

El primer término es una suma de laplacianos con respecto a las coordenadas moleculares \vec{R}_a y se supone que los ϕ electrónicos son funciones muy suaves de ellas (al menos cuando se está en el mínimo de ε_0), por lo que se desprecia las derivadas $\nabla_R \phi$, por lo cual el primer término se reduce a

$$\sum_\sigma (K_n \Phi_\sigma) \phi_0^\sigma = \sum_\sigma \phi_0^\sigma (K_n \Phi_\sigma)$$

Con esto, la ecuación (3.4.5) tiene un ϕ_0^σ como mero factor multiplicativo. Si se hace el producto escalar con un $\phi_0^{\sigma'}$ se obtiene

$$K_n \Phi_\sigma(\vec{R}) + \varepsilon_0(\vec{R}) \Phi_\sigma(\vec{R}) = E \sum_\sigma \Phi_\sigma(\vec{R}) \quad (3.4.6)$$

que es una ecuación de Schrödinger para Φ_σ nuclear y en la cual los $\varepsilon_0(\vec{R})$ juegan el papel de energía potencial. En las vecindades del mínimo (3.4.4) se puede hacer la aproximación

$$\varepsilon_0(\vec{R}) \approx \varepsilon_0(\vec{R}_0) + \frac{(R-R_0)_i (R-R_0)_j}{2} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon_0}{\partial R_i \partial R_j} \right)_0 \quad (3.4.7)$$

de donde se obtiene que la primera aproximación al movimiento nuclear puede asimilarse al de un oscilador armónico $3n$ -dimensional con oscilaciones y rotaciones.

Órdenes de magnitud

Energías

Los ε_k son del mismo orden de magnitud que la energía cinética de los electrones,

$$\varepsilon \sim \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{a_1} \right)^2$$

donde $a_1 = 2a$. La magnitud de la energía vibracional es $E_{\text{vib}} \approx \hbar\omega$ pero

$$M\omega^2 = \frac{\partial^2 \varepsilon_k}{\partial R^2} = \frac{\partial^2}{\partial R^2} \left(\frac{\hbar^2}{2mR^2} \right)_{(R \sim a_1)} \approx \frac{\hbar^2}{ma_1^4}$$

de donde

$$\omega \approx \sqrt{\frac{m}{M}} \frac{\hbar}{ma_1^2}$$

Así, finalmente

$$\frac{E_{\text{vib}}}{\varepsilon} \sim \sqrt{\frac{m}{M}}$$

La energía de rotación es del orden

$$E_{\text{rot}} \sim \frac{j(j+1)\hbar^2}{2I} \sim \frac{\hbar^2}{2Ma_1^2} \sim \frac{m}{M} \varepsilon$$

Puesto que ambas son energía pequeñas en comparación a la energía electrónica, la estructura electrónica no se ve afectada en forma importante por estos fenómenos.

Transiciones electrónicas

Las transiciones entre niveles vibracionales o rotacionales sí son observables.

La típica transición electrónica es

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} \sim \varepsilon = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{a_1} \right)^2$$

Usando que $a_1 = \frac{2\hbar}{m\alpha}$ se obtiene

$$\lambda \sim \frac{8h}{m\alpha^2} \sim 3500\text{\AA}$$

que corresponde al ultravioleta.

Transiciones vibracionales y rotacionales

Las transiciones vibracionales en moléculas chicas se caracteriza por $\Delta E_{\text{vib}} \sim \sqrt{\frac{m_e}{m_p}} \sim \frac{1}{50}$ con lo que $\lambda_{\text{vib}} \sim 50 \lambda_{\text{elec}}$ que implica el rango 10^{-3}cm que corresponde al infrarojo.

Las transiciones rotacionales son $\Delta E_{\text{rot}} \sim \frac{m_e}{m_p} \sim \frac{1}{2000}$ lo que implica longitudes de onda cercanas al centímetro (microonda).

Capítulo 4

Choque y desparramo

4.1. Choques

Generalidades

En lo que sigue la palabra partícula se referirá a las más básicas como son los electrones, protones, neutrones.

Se dice que se tiene un “choque de dos partículas”, que se denotarán a y b , se quiere decir que ellas se mueven desde un estado inicial en el que están tan lejos entre sí que se supone que no están interactuando, luego se acercan e interactúan por un tiempo finito. Lo que ocurre como resultado de esa colisión puede ser bastante complejo.

Si por ejemplo, dos electrones son lanzados uno contra el otro, tan pronto se “sientan” uno al otro se producirá una aceleración la cual, clásicamente, implica radiación electromagnética. Cuánticamente esto se describe diciendo que el estado inicial consta de dos electrones libres y el estado final consta de dos electrones libres y algunos fotones, lo que implica que la energía final acarreada por los dos electrones es menor que la energía que traían los electrones iniciales: el choque, se dice, es inelástico. El estudio estrictamente cuántico dice que la probabilidad de tener choque elástico es finita.

Los choques entre dos partículas pueden ser mucho más complejos que lo recién descrito. Puede ocurrir, por ejemplo, que ninguna de las

partículas que emerjan de la zona del choque puedan ser identificadas con la que incidieron. Por ejemplo, puede darse que del choque de un protón y un electrón emerjan un neutrón y un neutrino; o del choque de dos fotones pueden aparecer un electrón y un positrón.

En el capítulo que acá se inicia se estudiará únicamente choque elásticos, es decir, cuando chocan a y b emergen estrictamente a y b . En tales casos basta un hamiltoniano asociado al par (a, b) y la descripción física detallada se obtiene de él. Se supondrá, además, que el potencial de interacción se anula suficientemente rápido tal que satisfaga que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV = 0 \quad (4.1.1)$$

Dos cuerpos y choque elástico

Cuando dos cuerpos interactúan por medio de un potencial que tan solo depende de la posición relativa, el hamiltoniano del sistema

$$\bar{H} = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

puede ser reescrito haciendo el cambio de variables:

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= \vec{R} + \frac{m_2}{m_1+m_2} \vec{r} & \vec{p}_1 &= \frac{m_1}{m_1+m_2} \vec{P} + \vec{p} \\ \vec{r}_2 &= \vec{R} - \frac{m_1}{m_1+m_2} \vec{r} & \vec{p}_2 &= \frac{m_2}{m_1+m_2} \vec{P} - \vec{p} \end{aligned}$$

Los dos términos de energía cinética se reducen a

$$\frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} \quad \text{donde} \quad M = m_1 + m_2, \quad m = \frac{m_1 m_2}{M}$$

con lo cual \bar{H} se convierte en

$$\bar{H} = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

y es fácil comprobar que los nuevos pares conjugados son (\vec{r}, \vec{p}) y (\vec{R}, \vec{P}) . De aquí que \bar{H} es separable en la parte trivial que describe el movimiento libre del centro de masa y el problema del movimiento relativo descrito por

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

lo que lleva a utilizar la expresión, choque de una partícula de masa m contra un potencial con centro en el origen.

Si bien el fenómeno de choque es intrínsecamente un fenómeno temporal: existe un antes, un durante y un después, es posible hacer una descripción atemporal. La razón de esto es que el problema proviene de resolver la ecuación de Schrödinger la cual es lineal y homogénea. Esto implica que si la solución $\Psi(\vec{r}, t)$ se expande en modos

$$\Psi = \int e^{-iEt/\hbar} \psi_E(\vec{r}) dE$$

el problema se reduce a estudiar el comportamiento de cada componente ψ_E y el tiempo desaparece del formalismo.

En lugar de usar E como índice de los modos se usa k , y la notación es

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad U = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2} \quad (4.1.2)$$

y la ecuación de Schrödinger que interesa se puede escribir

$$(\nabla^2 + k^2) \psi = U \psi \quad (4.1.3)$$

La forma asintótica ($r \sim \infty$) de las soluciones a la ecuación anterior son soluciones a la ecuación en que se desprecia la interacción U

$$(\nabla^2 + k^2) \psi = 0 \quad (4.1.4)$$

Esta ecuación admite soluciones de la forma

$$e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

que se reconocen como ondas planas. También admite soluciones ($r \neq 0$) de la forma

$$\frac{1}{r} e^{\pm ikr}$$

que son ondas esféricas.

Densidad de flujo, ondas planas y esféricas

La densidad de flujo (corriente de probabilidad) en mecánica cuántica se define por

$$\begin{aligned}
 \vec{j} &= \Psi^* \frac{\vec{p}}{2m} \Psi + \left(\frac{\vec{p}\Psi}{2m} \right)^* \Psi \\
 &= \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi) \\
 &= \frac{1}{m} \Re \left(\Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi \right)
 \end{aligned} \tag{4.1.5}$$

Onda plana: Una onda plana se describe simplemente por

$$\psi_{\text{plana}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

y su asociado densidad flujo es

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \vec{k}$$

Onda esférica: En la descripción de la forma como la función de onda se desparra luego de chocar en un potencial de corto alcance cuyo centro está en el origen, se logra utilizando superposición de ondas esféricas. Una onda esférica genérica depende tan solo de la coordenada radial r y tiene la forma

$$\psi_{\text{esf}} = \frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

Es directo comprobar que la densidad de flujo que implica ψ_{esf} es

$$\vec{j} = \pm \frac{\hbar k}{m} \frac{\hat{r}}{r^2} \tag{4.1.6}$$

El factor r^{-2} asegura que el flujo radial total sea constante

$$J_{\text{rad}} = \int r^2 d\Omega \vec{j}(\vec{r}) \cdot \hat{r} \tag{4.1.7}$$

Puesto que k es positivo, el signo de este flujo está dado por el signo \pm en (4.1.6) directamente indica si se trata de una onda radial emergente la zona r chico o si es incidente.

En el tratamiento que sigue el interés estará en las ondas radiales emergentes por lo que se utilizará ondas esféricas con signo positivo en el exponente

$$\frac{e^{ikr}}{r}$$

Sección eficaz

La descripción que sigue se basa en que se tiene una onda estacionaria de la cual se separa la parte plana incidente de la parte esférica emergente. La parte plana se caracteriza por un vector de onda \vec{k}_i cuya dirección se hace coincidir con el eje Z , $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} = e^{ikz}$. Agregando la onda esférica se tiene

$$e^{ikz} + f_k(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.1.8)$$

donde f_k es lo que se llama la *amplitud de scattering*.

El análisis que sigue se limita a casos con fuerzas blanco-proyectil de alcance finito. Se excluye el caso Coulombiano.

La sección eficaz diferencial se obtiene de igualar el flujo incidente que pasa por una sección efectiva $d\sigma$,

$$\|\vec{j}_{in}\| d\sigma = \frac{\hbar k}{m}$$

con el flujo que emerge a una gran distancia r del blanco, en un elemento de ángulo sólido $d\Omega$, debido a la componente radial

$$\|\vec{j}_{rad}\| r^2 d\Omega = |f_k|^2 r^2 \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} = |f_k|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

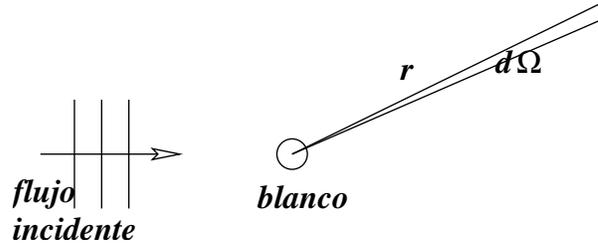


Figura 4.1: El haz incidente es desparrramado por el blanco. Interesa relacionar la corriente que incide en un elemento de área $d\sigma$ con la que emerge por un ángulo sólido $d\Omega$.

de donde se obtiene que la sección eficaz diferencial es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k|^2 \quad (4.1.9)$$

4.2. Autoestados de colisión

Se desea encontrar soluciones con energía positiva del problema estacionario $H\Psi = E\Psi$ para un hamiltoniano

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

donde el potencial se anula suficientemente rápido para r grande.

El problema es encontrar las soluciones de desparramo de

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi = U\Psi \quad (4.2.1)$$

con

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}, \quad U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\vec{r})$$

Pero como se quiere resolver casos con potencial de corto alcance se supondrá que en el remoto pasado ($t \sim -\infty$) la partícula proyectil está libre y puede ser descrita por una onda plana $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. La ecuación (4.2.1) puede ser convertida en una ecuación integral recurriendo a una función de Green G_0 tal que

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\vec{r}) = \delta(\vec{r}) \quad (4.2.2)$$

La ecuación integral, conocida como ecuación de Lipmann-Schwinger, es

$$\Psi(\vec{r}) = \Phi_0(\vec{r}) + \int d^3r' G_0(\vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}')\Psi(\vec{r}') \quad (4.2.3)$$

donde Φ_0 satisface la ecuación homogénea (partícula libre)

$$(\nabla^2 + k^2)\Phi_0(\vec{r}) = 0 \quad (4.2.4)$$

La elección de Φ_0 y de G_0 depende de las condiciones de borde que se imponga. Puesto que se desea que el haz incidente sea una onda plana se comienza estableciendo que

$$\Phi_0 = e^{i\vec{p}_{\text{ini}}\cdot\vec{r}/\hbar} = e^{i\vec{k}_i\cdot\vec{r}}$$

La ecuación (4.2.3) es llamada *ecuación de Helmholtz* y puede ser resuelta usando funciones de Green.

Determinación de G_0

En lugar de hacer una integración que da con G_0 se propone que hay dos soluciones de la forma

$$\alpha \frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

y se procede a demostrar que esto es cierto y determinaremos α . Se parte sabiendo que

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$$

y se aplica el Laplaciano a la función propuesta, que es

$$\alpha \left(\frac{\nabla^2 e^{ikr}}{r} + e^{ikr} \nabla^2 \frac{1}{r} + 2\nabla e^{ikr} \cdot \nabla \frac{1}{r} \right)$$

El Laplaciano de una función $f(r)$ que depende tan solo de r es $2f'/r + f''$. De aquí que los tres términos anteriores sean

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha}{r} (2ike^{ikr} - k^2 e^{ikr}) \\ & + \alpha e^{ikr} (-4\pi\delta(\vec{r})) \\ & - 2ik\alpha e^{ikr} \frac{1}{r^2} \end{aligned}$$

El primer término de la primera línea se cancela con la tercera línea y, sumando todo, se ha obtenido que

$$(\nabla^2 + k^2) \frac{\alpha e^{ikr}}{r} = -4\pi\alpha \delta(\vec{r})$$

Si se escoge $\alpha = -\frac{1}{4\pi}$ se obtiene la ecuación (4.2.2). Puesto que se habría obtenido lo mismo usando e^{-ikr} se obtiene las dos soluciones independientes que deben existir

$$G_0^\pm = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (4.2.5)$$

Onda emergente

Puesto que sólo se desea incluir tan solo y una componente de onda esférica *emergente* se usa G_0^+ obteniéndose

$$\Psi_{\vec{k}_i}^+(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{e^{ik\|\vec{r}-\vec{r}'\|}}{\|\vec{r}-\vec{r}'\|} U(\vec{r}') \Psi^+(\vec{r}') \quad (4.2.6)$$

Interesa estudiar la forma asintótica, es decir, a una distancia r mucho mayor al tamaño D de la zona de interacción $\|\vec{r}\| \gg D$. A tales distancias se cumple que

$$\|\vec{r}-\vec{r}'\| \approx r - \hat{r} \cdot \vec{r}'$$

que permite escribir una expresión simplificada para G^+ ,

$$\begin{aligned} G_0^+(\vec{r}-\vec{r}') &= -\frac{e^{ik\|\vec{r}-\vec{r}'\|}}{4\pi\|\vec{r}-\vec{r}'\|} \\ &\approx -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}'} \end{aligned}$$

donde se ha definido $\vec{k}_s \equiv k\hat{r}$. Con lo anterior se obtiene una solución con la forma dada en (4.1.8):

$$\begin{aligned} \Psi_{\vec{k}_i}^+(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}_i}^+(\vec{r}') \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + f(\vec{k}_i, \vec{k}_s) \frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

Esta es la forma asintótica ($r \sim \infty$) de la función de onda estacionaria, ya que el problema es independiente del tiempo. Es decir, esta función de onda describe un estado en que siempre hay un haz incidente y siempre hay ondas emergentes y todo se superpone.

En la expresión anterior el primer término es $\exp[ikr \cos \theta]$ y en el segundo, el coeficiente f depende de la magnitud k y del ángulo entre \vec{k}_i

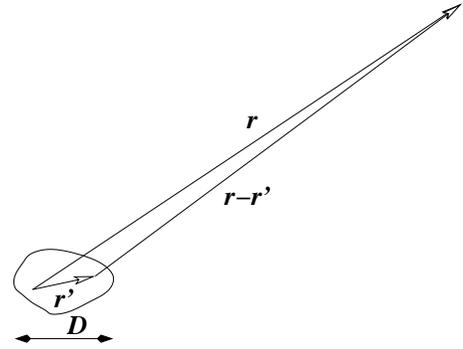


Figura 4.2: Se debe considerar distancias mucho mayores que el tamaño de la zona de interacción.

y $\vec{k}_s = k \hat{r}$, que es θ , lo que permite reescribir la expresión anterior en la forma

$$\Psi_k^+ = e^{ikr \cos \theta} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.2.8)$$

4.3. Aproximación de Born

Se está viendo procesos de desparramo elástico de una partícula contra un blanco de masa infinita, representada por un potencial de alcance finito: el potencial decrece a grandes distancias más rápido que r^{-2} . Se está suponiendo que incide una onda plana y que emergen ondas esféricas.

Formalmente el problema es descrito en forma asintótica por (4.2.7), que equivale a decir que la amplitud de desparramo es

$$f(\vec{k}_i, \vec{k}_s) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r' e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}_i}^+(\vec{r}') \quad (4.3.1)$$

Primer orden

La primera aproximación de Born consiste en reemplazar el factor Ψ^+ que aparece en el integrando del lado derecho en (4.2.7) por la onda plana incidente. Esto corresponde a suponer que el desparramo es débil, esto es, si el potencial es pequeño en comparación con la energía incidente, lo que conduce a

$$\begin{aligned} f_1(\vec{k}_i, \vec{k}_s) &= -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r' e^{-i(\vec{k}_s - \vec{k}_i) \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \\ &= -\frac{1}{4\pi} \tilde{U}(\vec{q}) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \tilde{V}(\vec{q}) \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\vec{q}) \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

que no es más que la transformada \tilde{U} de Fourier de U . Se ha definido

$$\vec{q} = \vec{k}_s - \vec{k}_i \quad (4.3.3)$$

y como la magnitud de ambos vectores de onda es k , la magnitud de \vec{q} es

$$q = \sqrt{k^2 + k^2 - 2k^2 \cos \theta} = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

La expresión (4.3.2) es conocida como la primera aproximación de Born a la amplitud de desparramo. Establece que a primer orden la amplitud de desparramo es proporcional a la transformada de Fourier del potencial evaluado para el vector de onda \vec{q} que describe el intercambiado (proporcional al momentum intercambiado).

El cálculo hecho hasta este orden es confiable para potenciales débiles y energías más bien grandes.

Ejemplo: con potencial de Yukawa

El potencial de Yukawa, que puede corresponde a un caso de interacciones mesónicas fuertes, o bien a un caso de potencial coulombiano apantallado, es

$$V(\vec{r}) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} e^{-\mu r}$$

De aquí que

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\vec{q}) &= Z_1 Z_2 e^2 \int d^3 r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \frac{e^{-\mu r}}{r} \\ &= 2\pi Z_1 Z_2 e^2 \int_0^\infty dr \int_{-1}^1 d\cos \theta r e^{-iqr \cos \theta} e^{-\mu r} \\ &= \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{q} \int_0^\infty \sin qr e^{-\mu r} dr \\ &= \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{q^2 + \mu^2} \end{aligned}$$

lo que conduce a

$$f_1 = \frac{2mZ_1 Z_2 e^2}{\hbar^2} \frac{1}{q^2 + \mu^2} \quad (4.3.4)$$

La sección eficaz diferencial, como se vió en (4.1.9) está dada por $|f|^2$. Para escribir esta expresión hacemos explícita la dependencia de f_1 en el ángulo entre \vec{k}_i y \vec{k}_s que se esconde en q^2 , como muestra la figura. Lo que se tiene entonces es

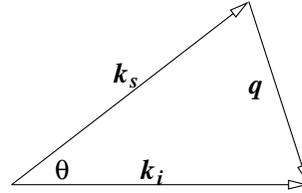


Figura 4.3: Relación entre los tres vectores que se define.

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} \approx |f_1(\theta)|^2 &= \left(\frac{2mZ_1Z_2e^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{[2k^2(1 - \cos \theta) + \mu^2]^2} \\ &= \left(\frac{2mZ_1Z_2e^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{[4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \mu^2]^2} \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

De aquí es un ejercicio trivial obtener la sección eficaz total.

El límite coulombiano

Al tomar el límite $\mu \rightarrow 0$ se obtiene el potencial de Coulomb y la sección eficaz diferencial tiende a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16} \left(\frac{Z_1Z_2e^2}{E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (4.3.6)$$

donde $E = (\hbar k)^2/2m$. Esta es exactamente la amplitud clásica dada por Rutherford y también es la sección eficaz diferencial cuántica exacta del caso Coulombiano. Esta expresión implica una sección eficaz total infinita.

Con potencial central

En el contexto de la primera aproximación de Born se sabe que $f_1 = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\vec{q})$ y que la sección eficaz total es

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \int d\Omega |\tilde{V}(\vec{q})|^2$$

Si el potencial es central, entonces la transformada de Fourier del potencial puede ser reducida y resulta ser tan solo una función del escalar

q ,

$$\begin{aligned}
 \tilde{V}(q) &= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \int_{-1}^1 d \cos \theta e^{-iqr \cos \theta} V(r) \\
 &= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \frac{2 \sin qr}{qr} V(r) \\
 &= \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty \sin qr V(r) r dr
 \end{aligned} \tag{4.3.7}$$

La sección eficaz total en el caso actual es

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \int_{-1}^1 |\tilde{V}(\vec{q})|^2 d \cos \theta$$

sin embargo, como $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$, se puede demostrar que

$$d \cos \theta = \frac{q}{k^2} dq$$

con lo cual

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{m^2}{2\pi \hbar^4 k^2} \int_0^{2k} |\tilde{V}(q)|^2 q dq \tag{4.3.8}$$

De aquí se puede obtener propiedades de σ_{tot} para choques de altas energías. Si el alcance del potencial es a , es decir $V(r)$ es despreciable para distancias del origen mayores que a , entonces su transformada de Fourier $\tilde{V}(q)$ es apreciable tan solo en una región $q < \frac{1}{a}$ que implica

$$\sin \frac{\theta}{2} \leq \frac{1}{2ka}$$

que es la zona con ángulo θ muy chico. Es decir, el desparramo a altas energías se limita a ángulos pequeños, en un cono caracterizado por

$$\theta \sim \frac{1}{ka}$$

Para energías altas la expresión (4.3.8) puede aproximarse integrando hasta infinito

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{m^2}{2\pi \hbar^4 k^2} \int_0^\infty |\tilde{V}(\vec{q})|^2 q dq \tag{4.3.9}$$

4.4. Ondas parciales

La ecuación de partida

Cuando el potencial es central la función de onda se puede separar en la forma

$$\Psi = R(r)Y(\hat{r}) \quad (4.4.1)$$

que conduce a la ecuación radial

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \right) R = 0 \quad (4.4.2)$$

Ondas esféricas en el caso libre

En el remoto pasado y en el remoto futuro la partícula es libre. Si en la ecuación anterior se pone $V = 0$ y $k^2 = 2mE/\hbar^2$ y $r = \rho/k$, la ecuación queda

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + 1 \right) R(\rho) = 0 \quad (4.4.3)$$

Por cada valor de ℓ existen dos soluciones independientes, la función esférica de Bessel, j_ℓ , y la función esférica de Neumann, n_ℓ ,

$$j_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (4.4.4)$$

$$n_\ell(\rho) = -(-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\cos \rho}{\rho}$$

Sus comportamientos asintóticos son

	$\ell \gg \rho \rightarrow 0$	$\ell \ll \rho \rightarrow \infty$	
$j_\ell(\rho)$	$\frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!}$	$\frac{1}{\rho} \sin(\rho - \ell\pi/2)$	
$n_\ell(\rho)$	$-\frac{(2\ell-1)!!}{\rho^\ell}$	$-\frac{1}{\rho} \cos(\rho - \ell\pi/2)$	(4.4.5)

En las vecindades del origen j_ℓ es regular y n_ℓ diverge como $\rho^{-\ell-1}$.

Dos propiedades útiles de los j_ℓ son

$$\frac{dj_\ell(\rho)}{d\rho} = -\frac{\ell+1}{\rho}j_\ell + j_{\ell-1}, \quad \frac{dj_{\ell-1}(\rho)}{d\rho} = \frac{\ell-1}{\rho}j_{\ell-1} - j_\ell \quad (4.4.6)$$

Los j_ℓ forman un buen conjunto

$$\int_0^\infty j_\ell(kr) j_\ell(kr') k^2 dk = \frac{\pi}{2r^2} \delta(r-r')$$

$$\int_0^\infty j_\ell(kr) j_\ell(k'r) r^2 dr = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k-k')$$

por lo que funciones propias de H , L^2 y L_z

$$\Psi_{E\ell m}^0(\vec{r}) \sim j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (4.4.7)$$

pueden ser δ -normalizadas y constituyen un conjunto completo.

Esto es, la función radial solución del caso libre es la solución regular en el origen

$$R_\ell(r) = j_\ell(kr)$$

cuya forma asintótica según (4.4.5) es

$$R_\ell(r) \approx -\frac{1}{2ikr} \left[e^{-i(kr-\ell\pi/2)} - e^{i(kr-\ell\pi/2)} \right] \quad (4.4.8)$$

Si se estudia el flujo de probabilidad de estos dos sumando se puede ver que son ondas esféricas que entran (el primer término) y que salen.

Ondas planas

Otro conjunto de funciones de onda para el caso libre son las ondas planas

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

que también satisface relaciones de conjunto completo δ -ortonormal.

Estas funciones pueden escribirse en términos de la base anterior (4.4.7). Lo haremos para el caso en que el vector \vec{k} es paralelo al eje Z, es decir, se encontrará los coeficientes c_ℓ en la expansión

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = e^{i\rho u} = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell j_\ell(\rho) P_\ell(u) \quad (4.4.9)$$

Entran solo los $Y_{\ell m=0}$ porque esta función no depende de ϕ . Momentáneamente se está usando la abreviación $\rho \equiv kr$ y $u = \cos \theta$.

En lo que sigue se determinan los coeficientes c_ℓ . Derivando la expansión anterior con respecto a ρ y usando la propiedad

$$\frac{dj_\ell}{d\rho} = \frac{\ell}{2\ell+1} j_{\ell-1} - \frac{\ell+1}{2\ell+1} j_{\ell+1}$$

que viene de (4.4.6) se obtiene

$$i u e^{i\rho u} = \sum_{\ell} c_\ell \frac{\ell j_{\ell-1} - (\ell+1) j_{\ell+1}}{2\ell+1} P_\ell(u) \quad (4.4.10)$$

Por otro lado se multiplica (4.4.9) por iu y se hace uso de la propiedad de los P_ℓ :

$$u P_\ell(u) = \frac{(\ell+1) P_{\ell+1} + \ell P_{\ell-1}}{2\ell+1}$$

que conduce a

$$\begin{aligned} i u e^{i\rho u} &= i \sum_{\ell} c_\ell j_\ell \frac{(\ell+1) P_{\ell+1} + \ell P_{\ell-1}}{2\ell+1} \\ &= i \sum_{\ell} \left(\frac{\ell c_{\ell-1} j_{\ell-1}}{2\ell-1} + \frac{(\ell+1) c_{\ell+1} j_{\ell+1}}{2\ell+3} \right) P_\ell \end{aligned}$$

Comparando esta última expresión con (4.4.10) e igualando los coeficientes de los $j_{\ell-1}$ por un lado y de los $j_{\ell+1}$ por el otro se obtiene relaciones de recurrencia que coinciden y son

$$c_\ell = i \frac{2\ell+1}{2\ell-1} c_{\ell-1}$$

y cuya solución es

$$c_\ell = (2\ell+1) i^\ell c_0 \quad (4.4.11)$$

Por lo cual

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta) \quad (4.4.12)$$

donde se ha usado que $c_0 = 1$ ya que en el límite $r \rightarrow 0$ la suma se reduce al término $\ell = 0$ (porque los $j_{\ell} \propto r^{\ell}$ y $P_0(u) = 1$) y todo el lado derecho vale 1, lo mismo que el lado izquierdo.

Será de utilidad escribir la forma asintótica ($r \sim \infty$) de esta expresión. Para lograrlo basta con reemplazar $j_{\ell}(kr)$ por su forma asintótica

$$\begin{aligned} j_{\ell}(kr) &= \frac{1}{kr} \sin(kr - \ell\pi/2) \\ &= \frac{1}{-2ikr} \left(e^{-i(kr - \ell\pi/2)} - e^{i(kr - \ell\pi/2)} \right) \end{aligned}$$

esto es

$$e^{ikz} \approx \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{i^{\ell} (e^{-iA} - e^{iA})}{-2ikr} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (4.4.13)$$

donde $A = kr - \ell\pi/2$. La onda plana ha quedado expresada como una superposición de ondas esféricas que entran y que salen. El flujo total es nulo.

Efecto del potencial

La parte radial en el caso del problema completo ($V \neq 0$) debe tener asintóticamente ($r \sim \infty$) una forma del tipo

$$R(\rho) \sim A_{\ell} j_{\ell}(kr) + B_{\ell} n_{\ell}(kr) \quad (4.4.14)$$

Si el potencial fuese nulo, la solución n_{ℓ} singular en el origen estaría totalmente excluida. Por esto, el coeficiente B_{ℓ} , comparado con A_{ℓ} es una medida del efecto del potencial. Así se entiende que la cantidad δ_{ℓ} , denominada *desplazamiento de fase de desparramo*, definida por

$$\tan \delta_{\ell} = -\frac{B_{\ell}}{A_{\ell}} \quad (4.4.15)$$

juega un papel interesante. Se anula si el potencial es nulo. Entonces, para r muy grande

$$R_{\ell}(kr) \sim d_{\ell} (\cos \delta_{\ell} j_{\ell} - \sin \delta_{\ell} n_{\ell})$$

$$\begin{aligned}
&\sim \frac{d_\ell}{kr} \left(\cos \delta_\ell \sin\left(kr - \frac{1}{2}\pi\ell\right) + \sin \delta_\ell \cos\left(kr - \frac{1}{2}\pi\ell\right) \right) \\
&\sim \frac{d_\ell}{kr} \left(\sin\left(kr - \frac{1}{2}\ell\pi + \delta_\ell\right) \right) \\
&\sim \frac{d_\ell}{-2ikr} \left(e^{-i(A+\delta_\ell)} - e^{+i(A+\delta_\ell)} \right) \\
&\sim \frac{d_\ell e^{-i\delta_\ell}}{-2ikr} \left(e^{-iA} - e^{2i\delta_\ell} e^{iA} \right) \\
&\sim \frac{d_\ell e^{-i\delta_\ell}}{-2ikr} \left(e^{-iA} - S_\ell(k) e^{iA} \right)
\end{aligned}$$

donde se ha usado la abreviación $S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)}$.

Aclarado esto se puede escribir la forma asintótica de la función de onda que incluye el efecto del potencial tomando como modelo el caso sin potencial dado en (4.4.13)

$$\Psi = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{i^\ell}{-2ikr} \left(e^{-iA} - S_\ell(k) e^{iA} \right) P_\ell(\cos \theta) \quad (4.4.16)$$

A esta expresión se le suma y resta la onda plana aprovechando la forma asintótica (4.4.13). La condición de borde exige que los términos proporcionales a e^{-iA} deben desaparecer (no hay ondas esféricas incidentes), lo que determina que $d_\ell = e^{i\delta_\ell}$. Por otro lado, se hace uso de

$$e^{iA} = \frac{1}{i^\ell} e^{ikr}$$

Con lo que da finalmente la función desparramada es

$$\Psi = e^{ikz} + \left[\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \underbrace{\frac{S_\ell(k) - 1}{2ik}}_{f_\ell(k)} P_\ell(\cos \theta) \right] \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.4.17)$$

El corchete es la función $f_k(\theta)$.

Sección eficaz total y teorema óptico

Puesto que la sección eficaz diferencial es $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$, la sección eficaz total se obtiene integrando sobre el ángulo sólido,

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\text{tot}} &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega \\
 &= \int d\Omega \left[\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_{\ell}(k) P_{\ell}(\cos \theta) \right] \\
 &\quad \times \left[\sum_{\ell'=0}^{\infty} (2\ell'+1) f_{\ell'}^*(k) P_{\ell'}(\cos \theta) \right] \\
 &= 4\pi \sum_{\ell} (2\ell+1) |f_{\ell}(\theta)|^2 \\
 &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell}
 \end{aligned}$$

Esto es

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell} \quad (4.4.18)$$

En la deducción anterior se hizo uso de

$$\int P_{\ell}(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) d\Omega = \frac{4\pi}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'}$$

Además se tiene la siguiente propiedad conocida como *teorema óptico*

$$\begin{aligned}
 \Im f_k(\theta=0) &= \sum_{\ell} (2\ell+1) \Im \left(\frac{e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell}}{k} \right) \\
 &= \frac{1}{k} \sum_{\ell} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell} \\
 &= \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}
 \end{aligned} \quad (4.4.19)$$

Esta propiedad proviene del hecho que la sección eficaz total describe la remoción de flujo del haz incidente. Tal remoción tan solo puede provenir de la interferencia destructiva y ésta solo puede ocurrir entre el haz incidente y el haz difundido hacia adelante ($\theta = 0$).

Suele hablarse de secciones eficaces parciales

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell(k)$$

Choque y parámetro de impacto

La probabilidad de encontrar a la partícula ceca del origen en el rango $(r, r + dr)$, en torno a $(\bar{\theta}, \bar{\phi})$ en un ángulo sólido $d\Omega$ es

$$|R_\ell(r) Y_{\ell m}(\bar{\theta}, \bar{\phi})|^2 r^2 dr d\Omega$$

pero $R_\ell(r \sim 0) \sim j_\ell(kr)$ por lo cual se debe considerar la función

$$r^2 (j_\ell(kr))^2$$

cuyo comportamiento para $\rho = kr \sim 0$ es

$$j_\ell(\rho) \sim \frac{\rho^\ell}{(2\ell + 1)!!}$$

Se puede demostrar que la probabilidad es muy pequeña desde el origen y hasta

$$b_\ell(k) \equiv \frac{\sqrt{\ell(\ell + 1)}}{k} \approx \frac{\hbar\ell}{\hbar k} = \frac{L}{p}$$

que, clásicamente, es el parámetro de impacto. De aquí que la probabilidad

$$r^2 (j_\ell(kr))^2 Y_{\ell m}^2(\theta_0, \phi_0) dr d\Omega_0$$

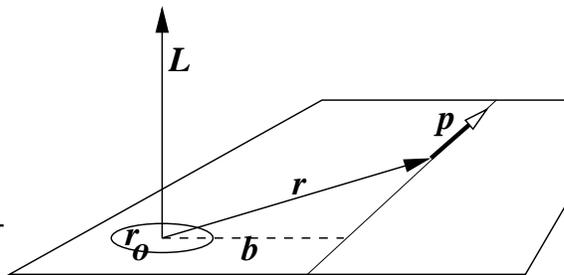


Figura 4.4: Se tiene el plano de incidencia y el parámetro de impacto b .

de encontrar a una partícula en el intervalo $(r, r + dr)$ y en $d\Omega_0$ sea muy pequeña cerca del origen.

Supongamos que $V(r > r_0) = 0$. En tal caso si $b_\ell(k) \gg r_0$ la partícula no ve al potencial. El potencial tiene efecto tan solo si ℓ es menor, de modo que se cumpla

$$\frac{1}{k} \sqrt{\ell_{\max}(\ell_{\max} + 1)} < r_0$$

Si la energía es grande, k es grande y típicamente ℓ_{\max} es enorme. La expansión en ℓ no resulta muy útil.

En resumen, si el parámetro de impacto es mucho mayor que el alcance del potencial el efecto del potencial es despreciable: no hay desparramo digno de mención.

El análisis que se ha hecho en ondas parciales es útil tan solo en el caso en que unas pocas ondas parciales contribuyen al problema.

Casos con absorción

Es normal, en experimentos de choque y desparramo en que el blanco se excite o emerja una partícula adicional etc. En tales casos se dice que el choque es inelástico y el formalismo es muy parecido solo que debe usarse

$$S_\ell(k) = \eta_\ell(k) e^{2i\delta_\ell(k)}$$

y

$$0 \leq \eta_\ell(k) \leq 1$$

lo que hace que el flujo saliente sea menor que el entrante. La onda parcial f_ℓ ahora es

$$\begin{aligned} f_\ell(k) &= \frac{S_\ell(k) - 1}{2ik} = \frac{\eta_\ell(k) e^{2i\delta_\ell(k)} - 1}{2ik} \\ &= \frac{\eta_\ell(k) \sin 2\delta_\ell(k)}{2k} + i \frac{1 - \eta_\ell \cos 2\delta_\ell}{2k} \end{aligned} \quad (4.4.20)$$

y la sección eficaz del choque elástico, que ahora es tan solo una parte del fenómeno completo, es

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{elast}} &= 4\pi \sum_{\ell} (2\ell + 1) |f_\ell(k)|^2 \\ &= 4\pi \sum_{\ell} (2\ell + 1) \frac{1 + \eta_\ell^2 - 2\eta_\ell \cos 2\delta_\ell}{4k^2} \end{aligned} \quad (4.4.21)$$

También hay una sección eficaz del proceso inelástico. Ya que no se va a especificar qué es el resto del proceso sólo es posible definir la sección eficaz inelástica *total*, que es la que describe la pérdida de flujo.

La estructura de la función de onda, tal como está escrita en (4.4.16) indica que los flujos esféricos que entran y salen por cada valor de ℓ son

$$\frac{\hbar k}{m} \frac{4\pi}{(2k)^2}, \quad \frac{\hbar k}{m} |S_\ell(k)|^2 \frac{4\pi}{(2k)^2}$$

respectivamente, de modo que el flujo neto que se pierde por cada valor de ℓ es

$$\frac{\hbar k}{m} \frac{\pi}{k^2} (1 - |\eta_\ell^2(k)|^2)$$

Si este flujo se divide por el flujo incidente $\frac{\hbar k}{m}$ y se suma sobre ℓ se tiene la sección eficaz inelástica,

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) (1 - \eta_\ell^2(k)) \quad (4.4.22)$$

La sección eficaz total resulta ser

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}} &= \sigma_{\text{elast}} + \sigma_{\text{inel}} \\ &= \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) (1 + \eta_\ell^2 - 2\eta_\ell \cos 2\delta_\ell + 1 - \eta_\ell^2) \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) (1 - \eta_\ell^2 \cos 2\delta_\ell) \end{aligned} \quad (4.4.23)$$

Si, por otro lado, se calcula la parte imaginaria de $f(0)$ dada en (4.4.20) se obtiene

$$\begin{aligned} \Im f(0) &= \sum_{\ell} (2\ell + 1) \frac{1 - \eta_\ell \cos 2\delta_\ell}{2k} \\ &= \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}} \end{aligned} \quad (4.4.24)$$

Capítulo 5

Perturbaciones dependientes del tiempo

5.1. Formalismo

Primeras consideraciones

Se va a considerar un sistema descrito por

$$H = H_0 + gV(\vec{r}, t)$$

donde la parte dependiente del tiempo es no nula sólo a partir de $t > 0$. Se supondrá que el problema asociado a H_0 se ha resuelto,

$$H_0\Phi_n = E_n\Phi_n$$

Se plantea resolver

$$i\hbar\partial_t\Psi = (H_0 + gV)\Psi \tag{5.1.1}$$

En todo este capítulo se supone que la perturbación es pequeña de modo que sea apropiado trabajar tan solo hasta primer orden y que los estados estacionarios de H_0 siguen siendo los apropiados. Se supone que $V(t < 0) = 0$, por lo que el estado inicial $\Psi(t = 0)$ puede ser un estado propio de H_0 , pero la evolución es comandada por H . Las preguntas centrales son: (a) cuál es la probabilidad que en t el sistema se encuentre en un estado Φ_m (propio de H_0) si tal estado está en el discreto y (b) la

probabilidad que el sistema esté en un rango de estados del continuo en un tiempo t .

Más adelante se va a suponer que el estado inicial del sistema es un autoestado Φ_p de H_0 . La presencia de la perturbación V hace que el sistema no se quede en este estado y, en principio, existe una probabilidad no trivial de que en un tiempo t posterior el sistema se encuentre en otro estado de H_0 .

Formalmente la solución buscada se expande en la base de los estados de H_0 ,

$$\Psi = \sum_n C_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n \quad (5.1.2)$$

exigiendo que se cumpla que

$$\sum_n |C_n(t)|^2 = 1$$

Es directo obtener que

$$\langle \Phi_m | \Psi \rangle = C_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} \quad (5.1.3)$$

Interesa estudiar la probabilidad de transición de que el sistema esté en el estado Φ_m en el instante t : $P_m(t)$,

$$P_m(t) = |\langle \Phi_m | \Psi(t) \rangle|^2 = |C_m(t)|^2 \quad (5.1.4)$$

Reemplazando (5.1.2) en (5.1.1) se obtiene al lado izquierdo

$$i\hbar \sum_n \left(\dot{C}_n - \frac{iE_n}{\hbar} C_n \right) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n$$

mientras que el lado derecho es

$$\sum_n C_n E_n e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n + \sum_n C_n g V(t) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n$$

El segundo término del lado izquierdo se cancela con el primer término del lado derecho. A continuación se hace el producto escalar con $\langle \Phi_m |$ obteniéndose

$$i\hbar \dot{C}_m = g \sum_n C_n(t) e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} V_{mn} \quad (5.1.5)$$

A partir de ahora se usará la notación

$$\omega_{mn} \equiv \frac{E_m - E_n}{\hbar} \begin{cases} > 0 & \text{absorción} \\ < 0 & \text{emisión} \end{cases}$$

Hasta aquí el formalismo es exacto en la medida que la suma sobre los estados Φ_n se considere formal, ya que la suma sobre la parte continua del espectro de energía debe expresarse como una integral.

Expansión perturbativa

Si V es realmente una perturbación, es natural esperar que exista una expansión

$$C_n(t) = \sum_{k=0}^{\infty} g^k C_n^k(t) \quad (5.1.6)$$

Para los dos órdenes más bajos se obtiene

$$\dot{C}_n^0 = 0 \quad \text{los } C_n^0 \text{ son constantes} \quad (5.1.7)$$

$$i\hbar\dot{C}_m^1 = \sum_n C_n^0 e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t)$$

Si se compara (5.1.5) con (5.1.7), teniendo en cuenta que C_n^0 es constante, se observa que al lado derecho se ha reemplazado $C_n(t)$ por C_n^0 , que corresponde a la más brutal de las aproximaciones y, por cierto, no puede esperarse que ella valga para tiempos arbitrariamente grandes.

Para trabajar calculando tan sólo hasta C_n^1 la convergencia debe ser muy fuerte, lo que requiere que

$$|V_{mp}| \ll \hbar\omega_{mp} \quad (5.1.8)$$

Si el estado inicial es $\Psi(0) = \Phi_p$ se toma

$$C_n(t=0) = \delta_{np}, \quad C_p^1(0) = 0$$

y en particular en la expansión la constante C_n^0 vale δ_{np} . En resumen, si $\Psi(0) = \Phi_p$,

$$\begin{aligned} C_n^0 &= \delta_{np} \\ i\hbar\dot{C}_m^1 &= e^{i\omega_{mp}t} V_{mp} \end{aligned} \quad (5.1.9)$$

La integración de la ecuación anterior da

$$C_m^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{mp}t'} V_{mp}(t') dt' \quad (5.1.10)$$

con lo que se puede escribir

$$\Psi(t) \approx e^{-iE_p t/\hbar} \Phi_p - \frac{i}{\hbar} \sum_n \int_0^t e^{i\omega_{np}t'} V_{np}(t') dt' e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n \quad (5.1.11)$$

En esta aproximación hasta primer orden, en que se supone que el estado final Φ_m es diferente al estado inicial Φ_p , el coeficiente $C_m(t)$ está dado por la suma de $C_m^0 + C_m^1$, pero $C_m^0 = 0$ por lo que

$$C_m(t) \approx C_m^1(t), \quad \text{cuando } m \neq p$$

5.2. Probabilidad de transición

Considérese que el sistema inicialmente está en un estado

$$\Psi(t=0) = \Psi_{\text{ini}} = \Phi_p$$

y evoluciona. Independiente de cualquier esquema de cálculo, la probabilidad de transición a un estado final Φ_m es $|\langle \Phi_m | \Psi(t) \rangle|^2$ y, de (5.1.2), se obtiene que esta probabilidad está dada por

$$P_{pm} \equiv |\langle \Phi_m | \Psi(t) \rangle|^2 = |C_m(t)|^2 \quad (5.2.1)$$

En el esquema de aproximación actual, para que en el instante t el sistema se encuentre en un estado Φ_m ($m \neq p$) está dada por

$$P_{pm} \approx |C_m^1(t)|^2 \quad (5.2.2)$$

que es

$$P_{pm} \approx \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{mp}t'} V_{mp}(t') dt' \right|^2 \quad (5.2.3)$$

Nota: se habla de probabilidad de transición tan solo si se transita de un estado discreto a otro. Si el continuo está involucrado es necesario usar el concepto de densidad de probabilidad de transición.

5.3. Resonancias

En lo que sigue se supone que $V(t)$ tiene una forma muy sencilla,

$$\begin{aligned} V(t) &= V_c \cos \omega t + iV_s \sin \omega t \\ &= \frac{V_c + V_s}{2} e^{i\omega t} + \frac{V_c - V_s}{2} e^{-i\omega t} \end{aligned} \quad (5.3.1)$$

Se ve que si $\omega = 0$, $V(t) = V_c = \text{cte}$, de ahí que $V_{mp} = V_{mp}^c \delta_{mp}$. En lo que sigue se tomará

$$\begin{aligned} V_{mp} &= \frac{V_{mp}^c + V_{mp}^s}{2} e^{i\omega t} + \frac{V_{mp}^c - V_{mp}^s}{2} e^{-i\omega t} \\ &= A_{mp} e^{i\omega t} + B_{mp} e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

En el cálculo de (5.2.3) se debe calcular

$$\begin{aligned} I_\omega &\equiv \int_0^t e^{i\omega_{mp}t'} V_{mp}(t') dt' \\ &= A_{mp} \int_0^t e^{i(\omega + \omega_{mp})t'} dt' + B_{mp} \int_0^t e^{i(\omega_{mp} - \omega)t'} dt' \\ &= A_{mp} \frac{e^{i(\omega_{mp} + \omega)t} - 1}{i(\omega_{mp} + \omega)} + B_{mp} \frac{e^{i(\omega_{mp} - \omega)t} - 1}{i(\omega_{mp} - \omega)} \end{aligned}$$

Esto permite escribir, para este caso, la expresión (5.1.10), en la forma

$$C_m^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \left(A_{mp} \frac{e^{i(\omega_{mp} + \omega)t} - 1}{i(\omega_{mp} + \omega)} + B_{mp} \frac{e^{i(\omega_{mp} - \omega)t} - 1}{i(\omega_{mp} - \omega)} \right) \quad (5.3.2)$$

que muestra que hay resonancias para $\omega = \pm \omega_{mp}$. En cada caso (signo $\omega \approx +\omega_{mp}$ o el otro), un término es muy grande y el otro se hace despreciable. Se verá que ellas ocurren tan solo si Φ_m está en el discreto.

El caso $\omega = 0$

En el límite $\omega = 0$, la integral I_ω anterior se reduce a

$$I_0 = V_{mp} \frac{e^{i\omega_{mp}t} - 1}{i\omega_{mp}}$$

por lo que

$$\begin{aligned}
 P_{mp} &= \frac{|V_{mp}|^2}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i\omega_{mp}t} - 1}{i\omega_{mp}} \right|^2 \\
 &= \frac{|V_{mp}|^2}{\hbar^2} \left| \frac{e^{-i\omega_{mp}t/2} - e^{i\omega_{mp}t/2}}{i\omega_{mp}} \right|^2 \\
 &= \frac{|V_{mp}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{\omega_{mp}t}{2}}{\left(\frac{\omega_{mp}}{2}\right)^2} \\
 &= \frac{|V_{mp}|^2 t^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{\omega_{mp}t}{2}}{\left(\frac{\omega_{mp}t}{2}\right)^2} \tag{5.3.3}
 \end{aligned}$$

que muestra oscilaciones entre los estados Φ_p y Φ_m aun cuando en este caso la perturbación es independiente del tiempo.

La función $\text{sinc}(x) \equiv \frac{\sin x}{x}$ es muy oscilante y para $|x|$ grande decrece como $1/|x|$. Usando la aproximación en que $\text{sinc}(x)$ es pequeña salvo que $|x| \lesssim \pi$ se ve que P_{pm} es pequeña salvo que

$$|E_p - E_m| \lesssim \frac{2\pi\hbar}{t}$$

En particular, para $t \rightarrow \infty$ solo puede haber transiciones entre estados de igual energía. Para t finito es posible tener cambios ΔE siempre que

$$\Delta E \Delta t \lesssim h$$

La probabilidad de transición sin cambio de energía es

$$P_{pm}(t) = \frac{|V_{mp}|^2 t^2}{\hbar^2} \tag{5.3.4}$$

donde se usó que $\text{sinc}(0) = 1$.

Caso con estado final en el discreto

Ahora se tomará $V_c = 0$. Se puede analizar separadamente

$$\omega \approx \omega_{mp} > 0, \quad \omega \approx -\omega_{mp} > 0$$

En el primer caso hay absorción de energía y el sistema se excita, en el segundo hay emisión y el sistema se desexcita. Se analiza el primer caso, ya que el segundo tiene un análisis entera-mente análogo.

En lo que sigue se supondrá que

$$\delta \equiv \omega - \omega_{mp} \ll \omega_{mp}$$

En (5.3.2) se puede despreciar el término en que las frecuencias se su-man y se obtiene

$$\begin{aligned} C_m^1(t) &\approx \frac{V_{mp}}{2i\hbar} \frac{e^{-\frac{i}{2}\delta t} (e^{\frac{i}{2}\delta t} - e^{-\frac{i}{2}\delta t})}{\delta} \\ &= \frac{V_{mp}}{2\hbar} e^{-\frac{i}{2}\delta t} \frac{\sin \frac{\delta t}{2}}{\frac{\delta}{2}} \end{aligned}$$

de donde se obtiene que

$$P_{pm} = \frac{|V_{mp}|^2 t^2}{4\hbar^2} \left(\frac{\sin(\delta t/2)}{\delta t/2} \right)^2 \quad (5.3.5)$$

que tiene un marcado máximo en $\omega = \omega_{mp}$, donde la probabilidad vale

$$\frac{|V_{mp}|^2}{4\hbar^2} t^2$$

El valor para el máximo recién definido no tiene sentido sino cuando este valor esté muy por debajo de la unidad, lo que pone una cota en t ,

$$t \ll \frac{2\hbar}{|V_{mp}|} \quad (5.3.6)$$

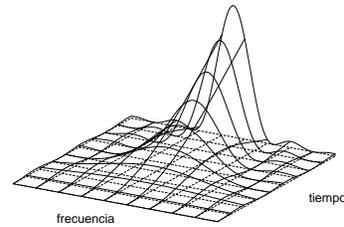


Figura 5.1: La figura muestra P_{mp} como función de ω y del tiempo. El máximo central ocurre en $\omega = \omega_{mp}$.

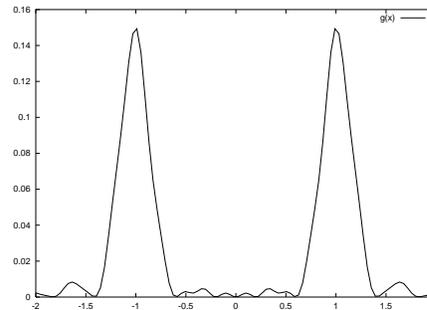


Figura 5.2: La figura muestra la forma de la probabilidad P_{mp} como función de ω cuando no se bota el término con la suma de las frecuencias. Hay máximos para $\omega = \pm\omega_{mp}$.

El ancho de este máximo se puede estimar de considerar que P_{mp} tiene sus primeros ceros vecinos a $\delta = 0$ en $\delta = \frac{4\pi}{t}$.

Si no se hubiese despreciado el término que tenía la suma de frecuencias se habría obtenido una figura con dos máximos laterales de la forma de la figura adjunta, ellos para $\omega = \pm\omega_{mp}$. Para que la aproximación usada tenga sentido, estos dos máximos tienen que estar bien separados. El ancho es del orden de $4\pi/t$ de modo que se debe requerir que

$$\frac{4\pi}{t} \ll \omega_{mp} \approx \omega \quad \implies \quad t \gg \frac{4\pi}{\omega} \quad (5.3.7)$$

Es decir, la aproximación es válida tan solo si el potencial ha actuado por un tiempo claramente mayor a $4\pi/\omega$, es decir, la perturbación haya tenido tiempo para oscilar muchas veces.

Al unir ambas desigualdades, (5.3.6) y (5.3.7) se obtiene la exigencia

$$|\hbar\omega| \gg |V_{mp}|$$

que es (5.1.8).

Numéricamente

En la figura adjunta se representa el módulo cuadrado de la función

$$C^1 = a_0 \left(\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} \right)$$

(En la figura se tomó $\omega_0 = 5$ y $a_0 = \frac{1}{10}$) Se aprecia que hay un lapso inicial en el cual la función es pequeña y no da señales de las dos resonancias.

Después de ese lapso inicial se distinguen claramente dos máximos dominantes centrados en $\omega = \pm\omega_0$

El análisis hecho en clases dice que el ancho de cada pico es aproximadamente $\frac{4\pi}{t}$ y la distancia entre los dos

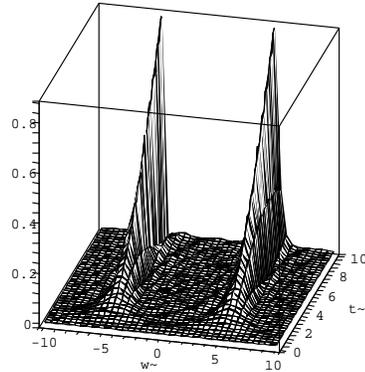


Figura 5.3: El módulo del cuadrado de la función C^1 .

máximos es $2\omega_0$. Para distinguirlos es necesario que $2\pi/t \ll \omega_0$, es decir, tan solo para $t \gg 2\pi/\omega_0$ se logra distinguirlo en forma separada. En el caso de la figura esto significa $t \gg 2,4$.

Por otro lado se debe exigir que la probabilidad sea mucho menor que la unidad, lo que requiere $t \ll 1/a_0$ que en el caso de la figura significa $t \ll 10$.

Caso con estado final en el continuo

En el caso en que el estado Φ_m está en el continuo $|\langle \Phi_m | \Psi(t) \rangle|^2$ es una densidad de probabilidad. Para definir una probabilidad se debe recurrir al concepto de densidad de estados en torno a Φ_m .

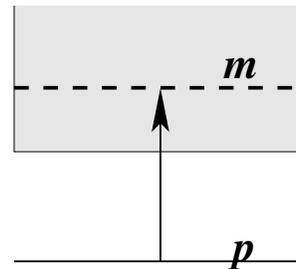


Figura 5.4: Transición de un estado del discreto a otro en el continuo.

Caso especial muy sencillo

Se analizará primero un caso muy particular en que el estado final, después de la interacción con un potencial $V(\vec{r})$, sea el de una partícula libre (como en una ionización),

$$\langle \vec{r} | \vec{p}_f \rangle = \psi_{\vec{p}_f} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\vec{p}_f \cdot \vec{r} / \hbar}$$

y la energía final es $E_f = \frac{p_f^2}{2m}$. Se debe considerar la contribución de todos los estados finales con \vec{p}_f dentro de un ángulo sólido $d\Omega_f$ y con la energía dentro de un estrecho rango dE .

La probabilidad de tener un estado final en el dominio descrito es

$$\delta P(\vec{p}_f, t) = \int_{D_f} d^3 p |\langle \vec{p} | \Psi(t) \rangle|^2$$

donde D_f es el dominio que restringe el momentum final a un estrecho ángulo sólido. La suma toma la forma $\int d^3 p (\dots)$ por la normalización de los estados $|\vec{p}\rangle$, ya que $\int |\vec{p}\rangle d^3 p \langle \vec{p}|$ es el operador unidad.

En lo que sigue se hará la sustitución

$$d^3 p = p^2 dp d\Omega$$

que se quiere poner en la forma

$$\rho(E) dE d\Omega$$

donde $\rho(E)$ es la *densidad de estados finales*.

En el caso particular que se estudia

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow dE = \frac{p dp}{m} = \frac{\sqrt{2mE} dp}{m}$$

por lo cual

$$p^2 dp = (2mE) \frac{m dE}{\sqrt{2mE}} = m\sqrt{2mE} dE$$

viéndose que la densidad de estados finales es

$$\rho(E) = m\sqrt{2mE}$$

por lo que

$$\delta P(\vec{p}_f, t) = \int_{D_f} d\Omega dE \rho(E) |\langle \vec{p} | \Psi(t) \rangle|^2 \quad (5.3.8)$$

Caso general

Genéricamente el estado final típico es designado por parámetros continuos α , la energía final es E_α y los estados están δ -normalizados

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

El sistema ha evolucionado desde un estado inicial a un $\Psi(t)$ y se desea conocer la probabilidad de encontrarlo en algún estado de un dominio D_f de los parámetros α . El elemento de probabilidad es

$$\delta P(\alpha_f, t) = \int_{D_f} d\alpha |\langle \alpha | \Psi(t) \rangle|^2$$

Se hace un cambio de variable de integración, tal como en el caso anterior, para singularizar a la energía como una de las variables

$$\{\alpha\} \longrightarrow \{E, \beta\}$$

y

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE$$

$$\delta P(\alpha_f, t) = \int_{D_f} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | \Psi(t) \rangle|^2 \quad (5.3.9)$$

Regla de oro de Fermi

En (5.3.9), $\Psi(t)$ es la función de estado normalizada en el instante t . Supondremos que el estado inicial Φ_p pertenece al discreto de H_0 y en lugar de escribir $\delta P(\alpha_f, t)$ usaremos la notación $\delta P(\Phi_p, \alpha_f, t)$ para subrayar que se parte desde Φ_p .

Se puede usar un potencial sinusoidal como en (5.3.1) o, mejor aun, un potencial constante, para usar (5.3.4). De esa expresión se tiene que

$$|\langle \beta, E | \Psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \beta, E | V | \Phi_p \rangle|^2 \left[\frac{\sin \frac{E-E_p}{2\hbar} t}{(E-E_p)/2\hbar} \right]^2$$

y la probabilidad de transición es

$$\delta P(\Phi_p, \alpha_f, t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\beta \in \delta\beta_f, E \in \delta E_f} d\beta dE \rho(\beta, E) \times |\langle \beta, E | V | \Phi_p \rangle|^2 \left[\frac{\sin \frac{E-E_p}{2\hbar} t}{(E-E_p)/2\hbar} \right]^2$$

Se hace notar que $\frac{1}{a\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 a\omega}{\omega^2} d\omega = 1$ lo que permite ver que

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 a\omega}{\pi a \omega^2} = \delta(\omega)$$

Si el término $\left[\frac{\sin \omega t}{\omega} \right]^2$ en la forma $\left[\frac{1}{\omega} \sin \omega t \right]^2 = \frac{1}{\omega^2} \sin^2 \omega t = \pi t \frac{1}{\pi t \omega^2} \sin^2 \omega t \sim \pi t \delta(\omega) = 2\pi \hbar t \delta(E - E_p)$. Es decir, para t suficientemente grande, el término $\left[\frac{\sin \omega t}{\omega} \right]^2$ se comporta como $2\pi t \hbar \delta(E - E_p)$ mientras que $\rho(\beta, E) |\langle \beta, E | V | \Psi(t) \rangle|^2$ tiene una variación suave con E , lo que permite suponerla constante dentro del rango en que $\left[\frac{\sin \omega t}{\omega} \right]^2 \approx \delta(\omega)$, lo que conduce a

$$\delta P(\Phi_p, \alpha_f, t) \begin{cases} = \frac{1}{\hbar} \delta\beta_f 2\pi t \rho(\beta_f, E_f = E_p) |\langle \beta_f, E_f = E_p | V | \Phi_p \rangle|^2 \\ = 0 & E_p \notin \delta\beta_f \end{cases}$$

La probabilidad por unidad de tiempo se define como

$$\delta W(\Phi_p, \alpha_f) = \frac{d}{dt} \delta P(\Phi_p, \alpha_f, t)$$

y la densidad de probabilidad de transición por unidad de tiempo y de intervalo β_f es

$$w(\Phi_p, \alpha_f) = \frac{\delta W}{\delta\beta_f}$$

lo que da la *regla de oro de Fermi*

$$w(\Phi_p, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_p | V | \Phi_p \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_p) \quad (5.3.10)$$

Si en lugar de considerar un potencial constante se hubiese usado el potencial sinusoidal en el caso resonante, el resultado habría sido

$$w(\Phi_p, \alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_p + \hbar\omega | V | \Phi_p \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_p + \hbar\omega) \quad (5.3.11)$$

de modo que ya no está la restricción a que la energía final coincida con la inicial.

5.4. Interacción de un átomo con una onda electromagnética

Probabilidad de transición

Consideraremos el hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V_0(\vec{r}) \quad (5.4.1)$$

y se supondrá que la contribución A^2 tiene efectos despreciable, por lo que nuestra perturbación V es $V = \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p}$. Si se escoge el gauge $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ se tiene que $\vec{A} \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot \vec{A}$. Se escribe

$$\vec{A} = \vec{A}_0^*(\vec{r}) e^{i\omega t} + \vec{A}_0(\vec{r}) e^{-i\omega t}$$

el primer término representa emisión y el segundo absorción.

Lejos de la fuente \vec{A}_0 satisface

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right) \vec{A}_0 = 0$$

de donde

$$\vec{A}_0(\vec{r}) = \vec{A}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (5.4.2)$$

Por elección de gauge $\vec{k} \cdot \vec{A}_0 = 0$.

Los campos son

$$\begin{aligned}\vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{i\omega}{c} \vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \\ \vec{B} &= \nabla \times \vec{A} = i\vec{k} \times \vec{A}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}\end{aligned}\quad (5.4.3)$$

y la densidad de energía es

$$\frac{1}{8\pi} (E^2 + B^2) = \frac{\omega^2}{2\pi c^2} \vec{A}_0 \cdot \vec{A}_0^*$$

Si el sistema está en una caja de volumen \mathcal{V} la energía en ella, y que se identifica con la energía de N fotones de frecuencia ω , es

$$\frac{1}{8\pi} \int d^3r (E^2 + B^2) = \frac{\omega^2 \mathcal{V}}{2\pi c^2} \|\vec{A}_0\|^2 = N\hbar\omega \quad (5.4.4)$$

Si se denota por \hat{e} al vector de polarización, $\vec{A}_0 = A_0 \hat{e}$ se tiene que $\hat{e} \cdot \vec{k} = 0$.

De (5.4.2) y (5.4.4) se concluye que en el caso de absorción

$$\vec{A} = \sqrt{\frac{2\pi c^2 N \hbar}{\omega \mathcal{V}}} \hat{e} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (5.4.5)$$

mientras que para emisión QED dice que

$$\vec{A} = \sqrt{\frac{2\pi c^2 (N+1) \hbar}{\omega \mathcal{V}}} \hat{e} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (5.4.6)$$

La interacción que se agrega a H_0 es $V = \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p}$ y que ahora puede ser escrita más explícitamente en la forma

$$V = \frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega \mathcal{V}}} e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \hat{e} \cdot \vec{p}$$

Esta energía potencial se reemplaza en el cálculo de C_m^1 dando

$$C_m^1(t) = -\frac{ie}{m\hbar c} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega \mathcal{V}}} \langle \Phi_m | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{e} \cdot \vec{p} | \Phi_p \rangle \int_0^t dt' e^{i\Delta t' / \hbar}$$

donde $\Delta = E_m^0 - E_p^0 + \hbar\omega$. La última integral vale $\frac{2}{\Delta} e^{i\Delta t/2} \sin \frac{\Delta t}{2}$. Al calcular $(C_m^1)^2$ el último factor contribuye con algo muy parecido a una delta de Dirac:

$$\frac{4}{\Delta^2} \sin^2 \frac{\Delta t}{2} \approx 2\pi\hbar t \delta(E_m^0 - E_p^0 + \hbar\omega)$$

por lo que la probabilidad $P_{p \rightarrow m} = |C_m^1|^2$,

$$P_{p \rightarrow m} = \frac{e^2}{m^2 c^2 \hbar^2} \frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega \mathcal{V}} \left| \langle \Phi_m | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} | \Phi_p \rangle \right|^2 2\pi\hbar t \delta(\Delta)$$

que conduce a la probabilidad por unidad de tiempo

$$W_{p \rightarrow m} = \frac{dP_{p \rightarrow m}}{dt} = 2\pi\hbar \frac{2\pi e^2}{m^2 \hbar \omega \mathcal{V}} \left| \langle \Phi_m | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} | \Phi_p \rangle \right|^2 \delta(E_m^0 - E_p^0 + \hbar\omega)$$

Esta es la probabilidad de transición, por unidad de tiempo, de que un átomo pase del estado Φ_p a Φ_m emitiendo un fotón de energía $\hbar\omega$. La δ de Dirac asegura que la energía se conserva. Pero realmente la energía del fotón no especifica en forma única el estado del fotón porque solo se puede afirmar que al fotón se lo detecta en un intervalo $(\vec{k}, \vec{k} + \Delta\vec{k})$ con $\|\vec{k}\| \approx \frac{\omega}{c}$ y la tasa de transición realmente es

$$R_{p \rightarrow m} = \sum_{\Delta\vec{k}} W_{p \rightarrow m} \Big|_{\|\vec{k}\| = \omega/c}$$

Nótese que aquí lo que se suma son las probabilidades. A continuación se hará esta suma, lo cual requiere de cálculos previos, porque se necesita la densidad de estado.

En (5.4.5) y (5.4.6) se escribió parte del potencial vectorial. Más finamente y sin a los detalles se puede escribir \vec{A} en la forma

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{a}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + c.c.$$

donde para simplificar el cálculo se supondrá que V representa un volúmen cúbico de arista L , $V = L^3$ con condiciones de borde periódicas. En tal caso de debe exigir que

$$e^{ik_j L} = 1 \quad j = x, y, z \quad \implies \quad k_j = \frac{2\pi n_j}{L}$$

donde los n_j son enteros no negativos. El elemento de volumen en el espacio de de vector de onda es

$$d^3k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 dn_x dn_y dn_z$$

mientras que

$$\omega = \|\vec{k}\| c = \frac{2\pi c}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

De lo anterior

$$\begin{aligned} R_{p \rightarrow m} &= \int d^3n W_{p \rightarrow m} \\ &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k W_{p \rightarrow m} \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3q W_{p \rightarrow m} \end{aligned} \quad (5.4.7)$$

pero $q = \hbar\omega/c$,

$$d^3q = d\Omega q^2 dq = d\Omega \left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 \frac{\hbar d\omega}{c}$$

Al integrar sobre $d(\hbar\omega)$ la delta exige que ω tome un único valor

$$\omega_{km} = \frac{E_p^0 - E_m^0}{\hbar}$$

Reemplazando la forma explícita de W y se obtiene

$$R_{p \rightarrow m} = \int d\Omega \frac{\alpha \omega_{km}}{2\pi} \left| \frac{1}{mc} \langle \Phi_m | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} | \Phi_p \rangle \right|^2 \quad (5.4.8)$$

Los elementos de matriz de transición

Se desea calcular en forma aproximada

$$\langle \Phi_m | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} | \Phi_p \rangle \quad (5.4.9)$$

Si se usa una función de onda hidrogenoide

$$\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-Zr/a}, \quad a = \frac{\hbar}{mc\alpha}$$

se obtiene que el $p \sim Zmc\alpha$ es decir

$$\hat{\epsilon} \cdot p \sim Zmc\alpha \quad \text{y que} \quad r \sim \frac{3\hbar}{2mcZ\alpha}$$

El valor medio de $\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$, que tiene que ser del orden de la energía de transición, $\hbar\omega$ resulta ser

$$\hbar\omega \sim \frac{1}{2}mc^2(Z\alpha)^2 \implies k = \frac{\omega}{c} \sim \frac{mc}{2\hbar}(Z\alpha)^2$$

de donde se obtiene que

$$kr \sim \frac{3}{4}Z\alpha \quad (5.4.10)$$

de modo que si $Z\alpha \ll 1$ no hay grandes oscilaciones y el elemento de matriz (5.4.9) es del mismo orden que $\hat{\epsilon} \cdot \vec{p}$ es decir $Zmc\alpha$. Además, de (5.4.10) con $Z\alpha \ll 1$ es razonable usar a expansión

$$e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} (\vec{k}\cdot\vec{r})^n \quad (5.4.11)$$

Transiones dipolares y superiores

Al más bajo orden el elemento de matriz es

$$\begin{aligned} \langle || \rangle &\approx \langle \Phi_m | \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} | \Phi_p \rangle \\ &\approx m \hat{\epsilon} \cdot \left\langle \Phi_m \left| \frac{d\vec{r}}{dt} \right| \Phi_p \right\rangle \\ &\approx \frac{im}{\hbar} \hat{\epsilon} \cdot \langle \Phi_m | [H, \vec{r}] | \Phi_p \rangle \\ &\approx \frac{im(E_m^0 - E_p^0)}{\hbar} \hat{\epsilon} \cdot \langle \Phi_m | \vec{r} | \Phi_p \rangle \\ &\approx im\omega_{mp} \hat{\epsilon} \cdot \langle \Phi_m | \vec{r} | \Phi_p \rangle \end{aligned} \quad (5.4.12)$$

Si este elemento de matriz es no nulo se tiene una *transición dipolar eléctrica*.

La próxima contribución en la expansión (5.4.11) proviene del elemento de matriz de

$$\hat{\epsilon} \cdot \vec{p} \vec{k} \cdot \vec{r}$$

que puede ser reescrito restando y sumando la cantidad $\frac{1}{2} \epsilon \cdot \vec{r} \vec{p} \cdot \vec{k}$

$$\hat{\epsilon} \cdot \vec{p} \vec{k} \cdot \vec{r} = \frac{1}{2} \left(\hat{\epsilon} \cdot \vec{p} \vec{k} \cdot \vec{r} - \epsilon \cdot \vec{r} \vec{p} \cdot \vec{k} \right) + \frac{1}{2} \left(\hat{\epsilon} \cdot \vec{p} \vec{k} \cdot \vec{r} + \epsilon \cdot \vec{r} \vec{p} \cdot \vec{k} \right)$$

Conviene ver que

$$\begin{aligned} (\vec{k} \times \hat{\epsilon}) \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) &= \vec{k} \cdot (\hat{\epsilon} \times (\vec{r} \times \vec{p})) \\ &= \hat{\epsilon} \cdot \vec{p} \vec{k} \cdot \vec{r} - \hat{\epsilon} \cdot \vec{r} \vec{k} \cdot \vec{p} \end{aligned}$$

de modo que

$$\hat{\epsilon} \cdot \vec{p} \vec{k} \cdot \vec{r} = (\vec{k} \times \hat{\epsilon}) \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) + \frac{1}{2} \left(\hat{\epsilon} \cdot \vec{p} \vec{k} \cdot \vec{r} + \epsilon \cdot \vec{r} \vec{p} \cdot \vec{k} \right)$$

El primer término puede asociarse con $\vec{L} \cdot \vec{B}$ ya que $\vec{k} \times \hat{\epsilon} \sim \nabla \times \vec{A} = \vec{B}$ y $\vec{r} \times \vec{p} \propto \vec{L}$. Se denomina término dipolar magnético y se debe calcular el elemento de matriz de un pseudovector $L_k \propto \epsilon_{ijk} x_j p_k$.

El segundo término a la derecha es un término llamado de cuadrupolo eléctrico. Se debe calcular elementos de matriz de un tensor simétrico: $p_i x_j + p_j x_i$.

De aquí surgen las reglas de selección propias de cada tipo de transición.

5.5. Resonancia magnética

El problema original

Se considerará el efecto de un campo magnético uniforme y contante más un campo magnético trasversal y oscilante sobre un dipolo magnético $\vec{\mu}$.

Los únicos grados de libertad que se considera son los del momento magnético $\vec{\mu} = \gamma \vec{J}$ del sistema y a él se aplica primero un campo magnético estático, $\vec{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 \hat{k}$. El hamiltoniano a orden cero es sencillamente

$$\begin{aligned} H_0 &= -\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{H}} \\ &= -\gamma \mathcal{H}_0 J_z \\ &= -\hbar \Omega J_z \end{aligned}$$

donde Ω es la frecuencia de Larmor, $\hbar \Omega = \gamma \mathcal{H}_0$.

Se agrega el efecto de un débil campo magnético trasversal variable de frecuencia ω

$$V(t) = -2g \hbar \Omega J_x \cos \omega t$$

con $g \ll 1$. Para atacar este problema se va a reescribir $V(t)$ en la forma de una suma de dos términos $V_1 + V_2$ y se atacará el problema asociado a $H_1 = H_0 + V_1$. Se argumentará que este sistema tiene una resonancia y que el efecto de V_2 cerca de la resonancia es despreciable.

Para reescribir V_1 se le suma y resta un término proporcional a $J_y \sin \omega t$, lo que permite escribir a V como suma de dos términos

$$\begin{aligned} V &= -g \hbar \Omega [(J_x \cos \omega t - J_y \sin \omega t) + (J_x \cos \omega t + J_y \sin \omega t)] \\ &= V_1 + V_2 \end{aligned}$$

Estos dos potenciales V_a difieren tan solo en el signo de ω , es decir, $V_2(\omega) = V_1(-\omega)$.

Solución cerrada a parte del problema

Se verá que el problema asociado a $H_1 = H_0 + V_1$ puede ser resuelto en forma cerrada. En lugar de escribir H_1 en la forma

$$H_1 = -\hbar \Omega (J_z + g(J_x \cos \omega t - J_y \sin \omega t))$$

se define

$$R = e^{-i\omega t J_z} \tag{5.5.1}$$

con lo cual

$$J_x \cos \omega t - J_y \sin \omega t = R^\dagger J_x R$$

que reduce la ecuación de Schrödinger a la forma

$$i\partial_t\Psi = -\Omega\left(J_z + gR^\dagger J_x R\right)\Psi \quad (5.5.2)$$

Definiendo

$$\Psi_R \equiv R\Psi$$

se comprueba que

$$\begin{aligned} i\partial_t\Psi_R &= \omega J_z\Psi_R - \Omega R\left(J_z + gR^\dagger J_x R\right)\Psi \\ &= \omega J_z\Psi_R - \Omega\left(J_z\Psi_R + gJ_x\Psi_R\right) \\ &= \left((\omega - \Omega)J_z - g\Omega J_x\right)\Psi_R \end{aligned}$$

El paso de Ψ a Ψ_R puede ser visto como el cambio del sistema de referencia de laboratorio a un sistema de referencia que gira con velocidad angular ω acompañando al campo magnético variable.

Se ha obtenido que el generador de evolución temporal de Ψ_R no depende del tiempo lo que hace trivial integrar la última ecuación

$$\Psi_R = e^{-i[(\omega - \Omega)J_z - g\Omega J_x]t}\Psi_0$$

Puesto que $\Psi = R^\dagger\Psi_R$ la solución para el problema H_1 es

$$\Psi = R^\dagger e^{-i[(\omega - \Omega)J_z - g\Omega J_x]t}\Psi_0$$

En el exponente de la segunda exponencial hay una combinación lineal de generadores de rotaciones, por lo tanto esta exponencial representa una rotación en torno a algún eje \hat{n} y de ángulo Wt en torno a dicho eje. Si se define $\hat{n} = \hat{i}\sin\phi + \hat{k}\cos\phi$ se cumple que

$$W\vec{J}\cdot\hat{n} = W(J_z\cos\phi + J_x\sin\phi)$$

que se exige que sea $(\omega - \Omega)J_z - g\Omega J_x$, lo que implica

$$\tan\phi = \frac{-g\Omega}{\omega - \Omega}, \quad W^2 = (\omega - \Omega)^2 + g^2\Omega^2$$

y

$$\sin \phi = -\frac{g\Omega}{\sqrt{(\omega - \Omega)^2 + g^2\Omega^2}}$$

$$\cos \phi = \frac{\omega - \Omega}{\sqrt{(\omega - \Omega)^2 + g^2\Omega^2}}$$

Si define el operador

$$T = e^{-iWt\hat{n}\cdot\vec{J}}$$

la solución Ψ al problema H_1 puede ser escrita en forma muy compacta

$$\Psi(t) = R^\dagger(\omega t) T(Wt) \Psi_0 \quad (5.5.3)$$

Se deja como ejercicio introducir, a partir de este punto, la interacción V_2 como perturbación.

Probabilidades de transición en el caso de spin $\frac{1}{2}$

En esta subsección se identifica

$$\vec{J} = \frac{\vec{\sigma}}{2}$$

y se supone que el estado inicial Ψ_0 es un estado propio de H_0 , es decir, de J_z . Este se caracteriza por la tercera componente de spin m ($m = \pm\frac{1}{2}$).

En lo que sigue se determina la probabilidad de encontrar al sistema en un estado m' un tiempo t después.

En el caso actual de spin $\frac{1}{2}$ el operador T es

$$\begin{aligned} T &= e^{-\frac{i}{2}Wt\hat{n}\cdot\sigma} \\ &= \cos \frac{Wt}{2} - i\frac{Wt}{2}\hat{n}\cdot\sigma \sin \frac{Wt}{2} \\ &= \cos \frac{Wt}{2} - i(\sigma_z \cos \phi + \sigma_x \sin \phi) \sin \frac{Wt}{2} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{Wt}{2} - i \cos \phi \sin \frac{Wt}{2} & -i \sin \phi \sin \frac{Wt}{2} \\ -i \sin \phi \sin \frac{Wt}{2} & \cos \frac{Wt}{2} + i \cos \phi \sin \frac{Wt}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

La amplitud de probabilidad de transición del sistema a un estado final caracterizado por m' es el elemento de matriz $\langle m' | \Psi(t) \rangle$. Se supondrá que Ψ_0 es $|m\rangle$ con lo cual la amplitud de la probabilidad es

$$\langle m' | R^\dagger(\omega t) T(Wt) | m \rangle = e^{im'\omega t} \langle m' | T(Wt) | m \rangle$$

Para calcular las probabilidades $p(m', m; t)$ de transición se debe tomar el módulo cuadrado de lo anterior, lo que elimina a la exponencial como m' . Sólo es necesario calcular los módulos cuadrados de los elementos de matriz de la matriz asociada a T que fue escrita más arriba:

$$p_{\frac{1}{2}}\left(\pm\frac{1}{2}, \mp\frac{1}{2}; t\right) = \sin^2 \phi \sin^2\left(\frac{Wt}{2}\right)$$

$$p_{\frac{1}{2}}\left(\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}; t\right) = \left| \cos\left(\frac{Wt}{2}\right) \mp i \cos \phi \sin\left(\frac{Wt}{2}\right) \right|^2$$

Usando las expresiones para las funciones de ϕ

$$p_{\frac{1}{2}}\left(\pm\frac{1}{2}, \mp\frac{1}{2}; t\right) = \frac{g^2 \Omega^2}{(\Omega - \omega)^2 + g^2 \Omega^2} \sin^2\left(\frac{Wt}{2}\right)$$

$$p_{\frac{1}{2}}\left(\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}; t\right) = 1 - \frac{g^2 \Omega^2}{(\Omega - \omega)^2 + g^2 \Omega^2} \sin^2\left(\frac{Wt}{2}\right)$$
(5.5.4)

Puesto que g es muy pequeño, cuando $\omega \rightarrow \Omega$ el efecto de la perturbación WgJ_x llega a ser muy grande, y, en el límite, con ancho $g\Omega$ (es muy angosta con g muy chico).

Si el problema hubiese sido tratado con el formalismo de perturbaciones se obtiene un resultado que, cerca de la resonancia, es muy malo.

5.6. El cuadro de interacción

Definición

Existe una forma algo más avanzada de abordar el caso de una perturbación dependiente del tiempo. Se supone que se conoce las soluciones

asociadas a un H_0 independiente del tiempo y se estudia el problema asociado a

$$H = H_0 + H_{\text{int}}(t)$$

Para hacer esto se define varios operadores de evolución. Si la evolución de la función de onda del problema asociado a H es $U(t)$ de modo que

$$\psi(t) = U(t) \psi_0$$

y, puesto que $i\hbar\partial_t\psi = H\psi$ es necesario que U satisfaga

$$\partial_t U = -\frac{i}{\hbar} H U$$

Se define además

$$U_0(t) = e^{-iH_0 t/\hbar}, \quad \partial_t U_0 = -\frac{i}{\hbar} H_0 U_0$$

y se define, para todo operador $A(t)$ del cuadro de Schrödinger, un operador en el *cuadro de interacción* por

$$A^I(t) = U_0^\dagger(t) A(t) U_0(t)$$

y además (ya no se escribe más la dependencia temporal)

$$\psi^I = U_0^\dagger \psi = U_0^\dagger U \psi_0$$

La ecuación tipo Schrödinger para esta nueva función de onda es

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \psi^I &= \frac{dU_0^\dagger}{dt} U \psi_0 + U_0^\dagger \frac{dU}{dt} \psi_0 \\ &= -\frac{i}{\hbar} U_0^\dagger (H - H_0) U \psi \\ &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \psi^I \end{aligned}$$

donde se ha definido en hamiltoniano de interacción en el cuadro de interacción por

$$\mathcal{H} \equiv H_{\text{int}}^I = U_0^\dagger H_{\text{int}} U_0$$

De todo esto resulta natural definir el operador de evolución en el cuadro de interacción por

$$U^I(t) = U_0^\dagger U$$

ya que

$$\psi^I(t) = U^I(t) \psi_0$$

También es fácil demostrar que

$$\frac{dU^I}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} U^I \quad (5.6.1)$$

Conección con formalismo elemental

Si se escribe

$$\psi^S(t) = \sum_n C_n^S(t) \Phi_n$$

La función de onda en el encuadro de interacción consecuentemente es

$$\begin{aligned} \psi^I &= U_0^\dagger \psi^S(t) \\ &= \sum_n C_n^S(t) U_0^\dagger \Phi_n \\ &= \sum_n C_n^S(t) e^{iE_n t/\hbar} \Phi_n \\ &= \sum_n C_n^I(t) \Phi_n \end{aligned}$$

desde se ha definido C^I tal que

$$C_n^S(t) = C_n^I(t) e^{-iE_n t/\hbar}$$

y de aquí que

$$\psi^S(t) = \sum_n C_n^I(t) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n$$

que es la expresión (5.1.2) con la que se comenzó.

Serie perturbativa de Dyson

La ecuación (5.6.1) para U^I es equivalente a la ecuación integral

$$U^I = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t') U^I(t') dt'$$

donde se ha usado la condición $U^I(0) = 1$. Esta ecuación integral puede ser vista como una ecuación telescópica que da origen a una serie

$$1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t \mathcal{H}(t') \int_0^{t'} \mathcal{H}(t'') dt'' dt' + \dots$$

El término de segundo orden en la serie de arriba es una doble integral que, en el plano (t'', t') , se hace sobre la zona achurada de la figura adjunta. Se hace notar que siempre, en este dominio se cumple $t' \geq t''$. Dyson hace notar que las dos integrales se pueden hacer en todo el rango desde 0 hasta t siempre que los dos factores \mathcal{H} estén ordenados con el factor que tiene el mayor argumento t a la izquierda. Es lo que se denomina el producto temporalmente ordenado de Dyson:

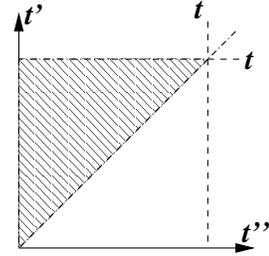


Figura 5.5: Dominios para la integración.

$$\mathsf{T}\{\mathcal{H}(t_1)\mathcal{H}(t_2)\} = \begin{cases} \mathcal{H}(t_1)\mathcal{H}(t_2) & \text{cuando } t_1 > t_2 \\ \mathcal{H}(t_2)\mathcal{H}(t_1) & \text{cuando } t_2 > t_1 \end{cases}$$

Usando este producto de Dyson el término de segundo orden puede escribirse en la forma

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t \int_0^t \mathsf{T}\{\mathcal{H}(t')\mathcal{H}(t'')\} dt'' dt'$$

y se puede demostrar que el n -ésimo término se puede escribir en la forma

$$\frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t \dots \int_0^t \mathsf{T}\{\mathcal{H}(t_1)\dots\mathcal{H}(t_n)\} dt_1 \dots dt_n$$

La suma de todos estos términos se llama la *serie de Dyson*.

Probabilidad de transición

En el contexto anterior se estudia a continuación la probabilidad de transición desde un estado inicial Ψ_p que es propio de H_0 a un estado

Φ_m un tiempo t despues: $P_{pm}(t)$. Bien se sabe que esta probabilidad se expresa en general en la forma

$$\begin{aligned} P_{pm} &= |\langle \Phi_m | \Psi^I(t) \rangle|^2 \\ &= |\langle \Phi_m | U^I(t) | \Phi_p \rangle|^2 \\ &= |C_{pm}^0 + C_{pm}^1 + C_{pm}^2 + \dots|^2 \end{aligned} \quad (5.6.2)$$

donde

$$\begin{aligned} C_{pm}^0 &= \langle \Phi_m | 1 | \Phi_p \rangle \\ C_{pm}^1 &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle \Phi_m | \mathcal{H}(t') | \Phi_p \rangle dt' \\ C_{pm}^2 &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle \Phi_m | \mathcal{H}(t') \mathcal{H}(t'') | \Phi_p \rangle \end{aligned}$$

Se debe destacar que las probabilidades de transición (5.6.2) se calculan con dos ingredientes: los estados $|\Phi_n\rangle$ del hamiltoniano libre y con el operador hamiltoniano de interacción en el cuadro de interacción: $\mathcal{H}(t)$.

La contribución de segundo orden

En la expresión para C_{pm}^2 se intercala un factor unidad usando que los Φ_n son un conjunto completo $\sum_n |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|$. Además los factores $\mathcal{H}(t)$ se reescriben usando su definición $\mathcal{H} = U_0^\dagger H_{\text{int}} U_0$ lo que da

$$\begin{aligned} C_{pm}^2 &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{mn}t'} e^{i\omega_{np}t''} \times \\ &\quad \langle \Phi_m | H_{\text{int}}(t') | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | H_{\text{int}}(t'') | \Phi_p \rangle \end{aligned}$$

La transición $p \rightarrow m$ aparece mediada por estados n . Un ejemplo notable es la transición, prohibida a primer orden en el átomo de hidrógeno, $1s \rightarrow 2s$.

Se se considera un H_{int} oscilante:

$$H_{\text{int}} = h_1 e^{-i\omega t}$$

se puede hacer las integrales temporales y se obtiene dos términos

$$\sum_n \frac{1}{\omega_{np} - \omega} \left\{ \frac{A_{mnp}}{\omega_{mp} - 2\omega} \left(e^{i(\omega_{mp} - 2\omega)t} - 1 \right) + \frac{B_{mnp}}{\omega_{mn} - \omega} \left(e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} - 1 \right) \right\} \quad (5.6.3)$$

El primero de los dos sumandos es resonante cuando $\omega = \frac{1}{2}\omega_{mp}$

Capítulo 6

Ecuaciones Relativistas

6.1. El primer paso

A partir de la ecuación de Schrödinger se demuestra que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

con

$$\rho = \psi^* \psi, \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

donde ρ es la densidad de probabilidad de presencia y \vec{j} es el flujo de densidad de probabilidad. Se destaca que

$$\rho > 0$$

Al pasar a relatividad se espera que $\rho \sim j^0$ de modo que j^μ sea un cuadrivector que satisfaga

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad \text{con } j^0 > 0$$

pero esto no es trivial.

NOTACIÓN:

$$\begin{aligned} (ct, x, y, z) &= (x^0, x^1, x^2, x^3) \\ \partial / \partial x^\mu &= \partial_\mu \\ \partial_i &= \nabla \\ -i\hbar \partial_i &\rightarrow p^i \quad \text{¡ojo!} \\ i\hbar \partial_0 &= (i\hbar/c) \partial_t \sim p^0 \end{aligned} \tag{6.1.1}$$

Para una partícula libre la notación es

$$p_0 = \frac{E}{c} = +\sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2} \quad (6.1.2)$$

En relatividad, una partícula libre satisface

$$p^2 = p_\mu p^\mu = (mc)^2$$

de donde se escribe

$$\underbrace{(-\hbar^2 \partial_0^2 + \hbar^2 \nabla^2)}_{-\hbar^2 \partial_\mu \partial^\mu} \phi = (mc)^2 \phi$$

Definiendo

$$\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu = \partial_0^2 - \nabla^2$$

la ecuación anterior queda

$$(\square + \mu^2) \phi = 0, \quad \mu = \frac{mc}{\hbar}$$

μ tiene dimensión inversa de longitud.

Si se define

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*)$$

se comprueba que se satisface $\partial_\mu j^\mu = 0$ pero no se desprende que $j^0 > 0$. En efecto

$$j^0 = \frac{i\hbar}{2mc} (\phi^* \partial_t \phi - \phi \partial_t \phi^*)$$

puede ser negativo. La presencia de lo que parece ser una densidad de probabilidad que puede ser negativa inhibió el uso de la ecuación de Klein-Gordon¹.

Si dos funciones f y g satisfacen: la ecuación de Klein-Gordon

$(\partial_0^2 - \nabla^2 + m^2) F = 0$ entonces la cantidad U

$$U = \int ((\partial_0 f) g - f (\partial_0 g)) d\vec{r}$$

es independiente del tiempo.

¹Oskar Klein y Walter Gordon, ambos suecos

6.2. Acoplamiento minimal

En el caso de partículas norelativistas de spin $\frac{1}{2}$ existe una forma diferente de incorporar el acoplamiento minimal. Se comienza con el término

$$\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2}{2m} \quad \left(= \frac{p^2}{2m} \right)$$

y en él se hace el reemplazo minimal,

$$\begin{aligned} & \left(\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e\vec{A}}{c} \right) \right)^2 \\ &= \left(\vec{p} + \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 + i\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e\vec{A}}{c} \right) \times \left(\vec{p} + \frac{e\vec{A}}{c} \right) \\ &= \left(\vec{p} + \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 + \frac{ie}{c} \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{A} + \vec{A} \times \vec{p}) \\ &= \left(\vec{p} + \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 + \frac{e\hbar}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \end{aligned}$$

donde se hizo uso de que $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ y que

$$\begin{aligned} (\vec{p} \times \vec{A} + \vec{A} \times \vec{p})f &= -i\hbar\nabla \times (\vec{A}f) - i\hbar\vec{A} \times \nabla f \\ &= -i\hbar(f\nabla \times \vec{A} - \vec{A} \times \nabla f + \vec{A} \times \nabla f) \\ &= -i\hbar\vec{B}f \end{aligned}$$

Incorporando el factor $1/2m$ se obtiene que $\frac{1}{2m} \left(\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e\vec{A}}{c} \right) \right)^2$ da origen a

$$H = \frac{1}{2m} \left(p + \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 + \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

que da el acoplamiento spin-órbita con el factor correcto ya que

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{mc} \vec{s}, \quad \vec{s} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

por lo que el último término puede ser escrito

$$\frac{e}{mc} \vec{s} \cdot \vec{B}$$

Por otro lado la primera parte del hamiltoniano H es

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{2mc} \left(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p} \right) + \mathcal{O}(A^2)$$

para el caso de un campo magnético uniforme se puede escoger

$$A_i = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} B_j x_k \quad B_k = \text{cte}$$

con lo cual

$$\begin{aligned} p_i A_i + A_i p_i &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} (B_j p_i x_k + B_j x_k p_i) \\ &= \frac{1}{2} B_j \epsilon_{jki} 2x_k p_i \\ &= \vec{B} \cdot \vec{L} \end{aligned}$$

con lo que ahora

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{2mc} \vec{B} \cdot (\vec{L} + 2\vec{s})$$

El factor 2 junto a \vec{s} corresponde al factor giromagnético ya conocido.

6.3. Ecuación de Dirac

Justificación

De la relación $E^2/c^2 - \vec{p}^2 = (mc)^2$ se puede escribir la ecuación de onda

$$\left(\frac{E}{c} - \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \right) \left(\frac{E}{c} + \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \right) \phi = (mc)^2 \phi$$

donde ϕ es un objeto de dos componentes y

$$E \rightarrow i\hbar c \partial_0, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$$

Se define

$$\begin{aligned} \phi^L &= \phi \\ \phi^R &= \frac{1}{mc} (i\hbar \partial_0 - i\hbar \vec{\sigma} \cdot \nabla) \phi^L \end{aligned}$$

Tomando esta definición y la ecuación de onda se obtiene

$$\begin{aligned} (i\hbar\partial_0 - i\hbar\vec{\sigma} \cdot \nabla) \phi^L &= mc \phi^R \\ (i\hbar\partial_0 + i\hbar\vec{\sigma} \cdot \nabla) \phi^R &= mc \phi^L \end{aligned} \quad (6.3.1)$$

Si estas ecuaciones se suman y se restan y se define

$$\psi_A = \phi^R + \phi^L, \quad \psi_B = \phi^R - \phi^L$$

se obtiene que el par de ecuaciones se puede escribir como una sola ecuación para un objeto de cuatro componentes,

$$\begin{pmatrix} i\hbar\partial_0 & i\hbar\vec{\sigma} \cdot \nabla \\ -i\hbar\vec{\sigma} \cdot \nabla & -i\hbar\partial_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = mc \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} \quad (6.3.2)$$

Se define las *matrices de Dirac* de 4×4

$$\gamma^0 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^j \equiv \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix}$$

con lo que la ecuación finalmente toma la forma

$$(i\hbar\gamma^0\partial_0 + i\hbar\gamma^j\partial_j) \psi = mc \psi$$

que es la ecuación de Dirac que se escribe

$$\boxed{(i\gamma^\mu\partial_\mu - \mu) \psi = 0} \quad (6.3.3)$$

Propiedades de las matrices de Dirac

El anticonmutador de las matrices γ da el $g^{\mu\nu}$ de relatividad

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$$

y todas estas matrices tienen traza nula

$$\text{Tr}\gamma^\mu = 0$$

Sobre hermiticidad

$$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0, \quad \gamma^{j\dagger} = -\gamma^j$$

pero

$$\bar{\gamma}^\mu = \gamma^\mu, \quad \text{en general: } \bar{A} \equiv \gamma^0 A^\dagger \gamma^0$$

$$\gamma^{0^2} = 1, \quad \gamma^{i^2} = -1$$

$$(\gamma^\mu a_\mu)^2 = a^\mu a_\mu$$

Se define γ_5 por

$$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

y su propiedad principal es

$$\{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0$$

Además

$$\gamma_5^\dagger = \gamma_5, \quad \gamma_5^2 = 1$$

La cuadridensidad de corriente

La ecuación de Dirac “daga” es

$$\begin{aligned} 0 &= \psi^\dagger \left(-i\gamma^{\mu\dagger} \overleftarrow{\partial}_\mu - \mu \right) \gamma^0 \\ &= \psi^\dagger \gamma^0 \left(-i\gamma^0 \gamma^{\mu\dagger} \gamma^0 \overleftarrow{\partial}_\mu - \mu \right) \\ &= \bar{\psi} \left(-i\gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu - \mu \right) \end{aligned}$$

La cuadricorriente definida por

$$j^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi, \quad \bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0$$

tiene diversas propiedades de interés.

$$\begin{aligned} j^{\mu\dagger} &= \psi^\dagger \gamma^{\mu\dagger} \gamma^0 \psi \\ &= \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \gamma^{\mu\dagger} \gamma^0 \psi \\ &= \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \\ &= j^\mu \end{aligned}$$

Con lo anterior se puede ver que

$$\partial_\mu j^\mu = \left(\bar{\psi} \gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu \right) \psi + \bar{\psi} (\gamma^\mu \partial_\mu \psi) = 0$$

y además

$$j^0 = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \psi = \|\psi\|^2 > 0$$

El hamiltoniano y sus propiedades

Si la ecuación de Dirac se multiplica por la izquierda por γ^0 resulta

$$\begin{aligned} 0 &= (i\partial_0 + i\gamma^0 \gamma^i \partial_i - \gamma^0 \mu) \psi \\ i\hbar \partial_t \psi &= (-i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2) \psi \end{aligned}$$

donde se ha definido las matrices

$$\vec{\alpha} = \gamma^0 \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \gamma^0$$

De esta notación se ve que el *hamiltoniano de Dirac* para una partícula libre es

$$H = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 \quad (6.3.4)$$

A continuación se demuestra que H no es invariante a meras rotaciones espaciales

$$\begin{aligned} [H, L_1] &= [c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2, x^2 p^3 - x^3 p^2] \quad \text{término } \beta \\ &= c \alpha^i [p^i, x^2] p^3 - c \alpha^i [p^i, x^3] p^2 \quad \text{no contribuye} \\ &= -i\hbar c (\alpha^2 p^3 - \alpha^3 p^2) \\ &= -i\hbar c (\vec{\alpha} \times \vec{p})^1 \end{aligned}$$

Puesto que H no conmuta con \vec{L} , el problema de separación de variables cuando hay un potencial central requiere un estudio más cuidadoso.

Si se calcula el conmutador de H con la matriz

$$\Sigma^i \equiv \gamma_5 \alpha^i = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix}$$

se observa primero que

$$[\gamma^0, \Sigma^i] = 0, \quad [\gamma_5, \Sigma^i] = 0$$

por lo cual

$$\begin{aligned}
 [H, \Sigma^j] &= [c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \Sigma^j] \\
 &= c[\gamma_5 \vec{\Sigma} \cdot \vec{p}, \Sigma^j] \\
 &= c\gamma_5 p^i [\Sigma^i, \Sigma^j] \\
 &= c\gamma_5 p^i 2i\varepsilon^{ijk} \Sigma^k \\
 &= 2ic\varepsilon^{kij} \alpha^k p^i \\
 &= 2ic(\vec{\alpha} \times \vec{p})^j
 \end{aligned}$$

esto es,

$$[H, \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}] = i\hbar c\vec{\alpha} \times \vec{p}$$

De aquí que

$$[H, \vec{J}] = 0$$

donde

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$$

El hamiltoniano de Dirac tiene la simetría $SU(2)$ generada por los J^i anteriores.

Propiedades de las soluciones

La ecuación en reposo

En reposo la ecuación de Dirac es

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \gamma^0 mc^2 \psi$$

que admite cuatro soluciones estacionarias independientes

$$\begin{aligned}
 \psi_1 &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-imc^2 t/\hbar}, & \psi_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-imc^2 t/\hbar} \\
 \psi_3 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{+imc^2 t/\hbar}, & \psi_4 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{+imc^2 t/\hbar}
 \end{aligned}$$

Los signos en las exponenciales se deben a los signos en la diagonal de γ^0 . Las dos últimas son soluciones de energía negativa. Más adelante se las reinterpreta como estados de antipartículas de energía positiva.

Inversión de paridad

El efecto de la inversión $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ en (6.3.1) es que la ecuación para ϕ^L la satisface ϕ^R y viceversa. Suponiendo que estas funciones son invariantes a inversión se obtiene que la inversión tiene por efecto

$$\begin{aligned}\psi_A &\rightarrow \psi_A \\ \psi_B &\rightarrow -\psi_B\end{aligned}\quad (6.3.5)$$

que es equivalente a decir que el efecto de la inversión es

$$\psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi'(\vec{r}, t) = \psi(-\vec{r}, t) = \gamma^0 \psi(\vec{r}, t) \quad (6.3.6)$$

Covariancia

Se debe exigir que la ecuación de Dirac transforme correctamente para que sea válida en cualquier sistema de referencia. Si se denomina Λ a la transformación de Lorentz genérica, sobre el espacio de Minkowski, $x' = \Lambda x$, se debe buscar las matrices $S(\Lambda)$, representación del grupo de Lorentz en el espacio de los espinores Ψ , tales que

$$\begin{aligned}x &\rightarrow x' = \Lambda x \\ \psi(x) &\rightarrow \psi'(x') = S(\Lambda) \psi(x)\end{aligned}\quad (6.3.7)$$

donde la propiedad fundamental de los Λ es

$$\Lambda_\mu^\nu \Lambda^\mu_\sigma = \delta_\sigma^\nu \quad (6.3.8)$$

y la ecuación de Dirac en el sistema de referencia “prima” debe tener la misma forma:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu' - \mu) \psi'(x') = 0$$

De (6.3.7)

$$\partial_\mu = \Lambda^\nu_\mu \partial_\nu'$$

El problema de encontrar los $S(\Lambda)$ se reducirá a encontrar los generadores infinitesimales de estas transformaciones espinoriales.

Por definición, las matrices $S(\Lambda)$ —representación del grupo de Lorentz sobre el espacio de los espinores ψ —son tales que

$$S^{-1}(\Lambda)\psi'(\Lambda x) = \psi(x) \quad (6.3.9)$$

Lo anterior se reemplaza en (6.3.3), y se multiplica por la izquierda por $S(\Lambda)$

$$\begin{aligned} 0 &= (S(i\gamma^\mu \Lambda^{\nu}_{\mu} \partial_{\nu}') S^{-1} - \mu) \Psi'(x') \\ &= \left(\underbrace{iS\gamma^\mu S^{-1} \Lambda^{\nu}_{\mu} \partial_{\nu}'} - \mu \right) \Psi'(x') \end{aligned}$$

y se exige que el producto marcado sea γ^ν , es decir, los γ^ν deben transformar de acuerdo al grupo de Lorentz:

$$S^{-1}\gamma^\nu S = \Lambda^{\nu}_{\mu} \gamma^\mu \quad (6.3.10)$$

El reto es encontrar estos S , pero en realidad basta con encontrarlos muy cerca de la identidad. Formalmente se escribe que un Λ^{ν}_{μ} muy cerca de la identidad en de la forma

$$\Lambda^{\nu}_{\mu} = \delta^{\nu}_{\mu} + \varepsilon^{\nu}_{\mu}$$

De esto y (6.3.8) se deduce que

$$\varepsilon^{\nu}_{\mu} = -\varepsilon_{\mu}^{\nu} \quad \Leftrightarrow \quad \varepsilon_{\mu\nu} = -\varepsilon_{\nu\mu}$$

Estos ε son seis parámetros, y son los seis parámetros del grupo de Lorentz.

S tiene que poder escribirse con estos mismos parámetros en forma exponenciada y para el caso infinitesimal es

$$S = 1 - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \varepsilon^{\mu\nu}$$

donde los $\sigma_{\mu\nu}$ son matrices de 4×4 por determinar.

La ecuación (6.3.10) toma la forma

$$\begin{aligned} -\frac{i}{4} \varepsilon^{\alpha\beta} (\gamma^{\nu} \sigma_{\alpha\beta} - \sigma_{\alpha\beta} \gamma^{\nu}) &= \varepsilon^{\nu}_{\mu} \gamma^{\mu} \\ &= \varepsilon^{\nu\beta} g_{\mu\beta} \gamma^{\mu} \\ &= \frac{1}{2} \varepsilon^{\alpha\beta} \left(\delta_{\alpha}^{\nu} g_{\mu\beta} \gamma^{\mu} - \delta_{\beta}^{\nu} g_{\mu\alpha} \gamma^{\mu} \right) \\ &= \frac{1}{2} \varepsilon^{\alpha\beta} \left(\delta_{\alpha}^{\nu} \gamma_{\beta} - \delta_{\beta}^{\nu} \gamma_{\alpha} \right) \end{aligned}$$

En ambos casos se tiene un objeto antisimétrico multiplicando al ε por lo que esos objetos pueden ser identificados. Resulta

$$[\gamma^\nu, \sigma_{\alpha\beta}] = 2i \left(\delta_\alpha^\nu \gamma_\beta - \delta_\beta^\nu \gamma_\alpha \right)$$

Se puede demostrar que la solución a esta exigencia es

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{i}{2} [\gamma_\alpha, \gamma_\beta]$$

Esto concluye el problema, ahora se conoce los $S(\Lambda)$.

Algunas propiedades:

- $\psi'(x') = S\psi(x) \Rightarrow \bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)\bar{S}$
donde $\bar{S} \equiv \gamma^0 S^\dagger \gamma^0$.
- $\bar{\sigma}_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}$
- $\bar{S} = S^{-1}$
- $\bar{\psi}' \gamma^\mu \psi' = \Lambda^\mu{}_\nu \bar{\psi} \gamma^\nu \psi$

La última propiedad dice que $\bar{\psi} \gamma^\mu \psi$ es un cuadrivector ordinario.

Del hecho que γ_5 anticonmuta con todos los γ^μ se desprende que γ_5 conmuta con los $\sigma_{\mu\nu}$ y por tanto

$$S^{-1} \gamma_5 S = \gamma_5$$

Esto es cierto siempre que S esté generado por los $\sigma_{\mu\nu}$, lo que implica que S es parte del grupo propio de Lorentz. Pero hasta llegar a (6.3.10) no se supuso que la transformación de Lorentz tuviese que ser propia. En particular, (6.3.10) tiene que ser válida si la transformación es una simple inversión espacial: $\Lambda = \mathbf{I}$ y $S = S_I$. En este caso (6.3.10) puede ser reescrita en la forma

$$S_I^{-1} (\gamma^0, \vec{\gamma}) S_I = (\gamma^0, -\vec{\gamma})$$

de donde se concluye que

$$S_I^{-1} \gamma_5 S_I = -\gamma_5$$

De aquí que

$$\bar{\psi} \gamma_5 \psi \quad \text{es un pseudoescalar.}$$

Soluciones de la ecuación de Dirac libre

Si la ecuación de Dirac

$$(i\gamma^\nu \partial_\nu - \mu) \psi = 0$$

se multiplica desde la izquierda por $(i\gamma^\lambda \partial_\lambda + \mu)$ se obtiene la ecuación de Klein-Gordon

$$(\partial_\nu \partial^\nu + \mu^2) \psi = 0$$

lo que hace esperar que haya soluciones tipo onda plana

$$\psi = u^\varepsilon(\vec{p}) e^{-i\varepsilon p_\nu x^\nu / \hbar}, \quad \varepsilon = \pm 1$$

con $p_0 = +\sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2}$ siempre. Para que esta función satisfaga la ecuación de Dirac es necesario que el espinor $u(p)$ satisfaga,

$$(\gamma_\nu p^\nu - \varepsilon mc) u^\varepsilon(p) = 0$$

El caso $\varepsilon = -1$ corresponde a las “soluciones con energía negativa” ya mencionadas en §6.3 y deberán ser reinterpretadas. Puesto que $p^2 > 0$ (tipo tiempo) los dos tipos de solución, de energía (positiva o negativa) permanecen como tales bajo el grupo de Lorentz.

Para distinguir a los espinores por su signo de energía se define

$$\Lambda^\varepsilon(\vec{p}) = \frac{\varepsilon p^\nu \gamma_\nu + mc}{2mc}$$

Propiedades:

$$\Lambda^\varepsilon(\vec{p}) u^{\varepsilon'}(\vec{p}) = \delta_{\varepsilon\varepsilon'} u^\varepsilon(\vec{p})$$

$$\Lambda^+ + \Lambda^- = 1$$

$$\Lambda^\varepsilon(\vec{p}) \Lambda^{\varepsilon'}(\vec{p}) = \Lambda^\varepsilon(\vec{p}) \delta_{\varepsilon\varepsilon'}$$

$$\bar{\Lambda}^\varepsilon(\vec{p}) = \Lambda^\varepsilon(\vec{p})$$

Se ve que Λ^ε es un proyector.

Es necesario aun otro índice para caracterizar las cuatro soluciones independientes que existen. Se define

$$\Xi(s) = \frac{1 - \gamma_5 \gamma^\nu s_\nu}{2} \quad \text{con} \quad s^\nu p_\nu = 0, \quad \& \quad s^2 = -1$$

El cuádrivector s tiene que ver con $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Es fundamental que satisfaga

$$[\Lambda^\varepsilon(\vec{p}), \Xi(s)] = 0$$

para poder tener autoespinores $u_s^\varepsilon(p)$ propios de los Λ y de Ξ .

El rol de s es el de distinguir la tercera componente del spin. En el sistema en reposo se lo define de modo que cuando $p = (mc, 0, 0, 0)$, $s = (0, 0, 0, \pm 1)$. Esto es, \vec{s} se escoge a lo largo del eje Z , tal como L_z y S_z . En tal sistema de referencia $\Xi(\pm 1)$ es diagonal y

$$\text{diag}\Xi(1) = (1, 0, 0, 1), \quad \text{diag}\Xi(-1) = (0, 1, 1, 0)$$

Propiedades generales:

$$\Xi^2 = \Xi, \quad \bar{\Xi} = \Xi$$

que muestran que Ξ es un proyector se lo usa para darle a los espinores el índice extra que se necesita:

$$\Xi(s)u_{s'}^\varepsilon = \delta_{ss'}u_{s'}^\varepsilon \quad \text{aquí } s = \pm$$

Normalización de espinores $u(\vec{p})$

El hamiltoniano de Dirac satisface $H^\dagger = H$ lo que asegura que los valores medios $u^\dagger H u$ son reales. Lo natural entonces es normalizar fijando el valor de $u^\dagger(\vec{p})u(\vec{p})$, pero sabemos que $u^\dagger u = \bar{u}\gamma^0 u$ es la componente temporal de un cuádrivector, de modo que suele normalizarse en la forma

$$u_s^\dagger(\varepsilon, \vec{p})u_{s'}(\varepsilon', \vec{p}) = \frac{\varepsilon p^0}{mc} \delta_{ss'} \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \quad (6.3.11)$$

pero acá se usará

$$\bar{u}_{s'}^{\varepsilon'}(\vec{p})u_s^\varepsilon(\vec{p}) = \varepsilon \delta_{ss'} \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \quad (6.3.12)$$

porque es una normalización propiamente escalar.

El límite norelativista de la ecuación de Dirac con campo electromagnético externo

En la ecuación de Dirac,

$$(i\gamma^\nu \partial_\nu - \mu) \psi = 0$$

se hace el reemplazo

$$i\hbar\partial_\nu \longrightarrow i\hbar\partial_\nu + \frac{e}{c}A_\nu$$

de donde

$$i\hbar\partial_i = -p^i \longrightarrow -p^i + \frac{e}{c}A_i = -p^i - \frac{e}{c}A^i$$

con lo que se obtiene

$$\begin{bmatrix} i\hbar\partial_0 + \frac{e}{c}A_0 - mc & -\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) \\ \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) - & -i\hbar\partial_0 - \frac{e}{c}A_0 - mc \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = 0$$

Se supondrá que $\psi = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$ con lo cual $i\hbar\partial_0 = E/c$. En tal caso la segunda de las ecuaciones da

$$\left(-\frac{E}{c} - \frac{e}{c}A_0 - mc\right) \psi_B + \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) \psi_A = 0 \quad (6.3.13)$$

De aquí se despeja ψ_B y se reemplaza en la primera ecuación, obteniéndose

$$\left(\frac{E}{c} + \frac{e}{c}A_0 - mc\right) \psi_A - \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) \frac{c}{E + eA_0 + mc^2} \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) \psi_A = 0$$

Para seguir se hará el reemplazo $E = E_{nr} + mc^2$,

$$E + eA_0 + mc^2 = 2mc^2 + E_{nr} + eA_0 = 2mc^2 \left(1 + \frac{E_{nr} + eA_0}{2mc^2}\right)$$

de donde se ve que

$$\frac{c}{E + eA_0 + mc^2} \approx \frac{1}{2mc^2} \left(1 - \frac{E_{nr} + eA_0}{2mc^2}\right)$$

y que, en lo que sigue, se reemplaza por $1/(2mc^2)$ con lo que se obtiene

$$(E_{nr} + eA_0) \psi_A - \frac{\left(\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right)^2}{2m} \psi_A = 0$$

Ya se ha visto que la fracción en el último término se reduce a

$$-\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc^2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

con lo cual finalmente la ecuación es

$$\left\{ \frac{\left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m} + \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + eA_0 \right\} \psi_A = E_{nr} \psi_A$$

que es la ecuación de Pauli para partículas no relativistas de spin $\frac{1}{2}$.

Además, de (6.3.13) se ve que

$$\psi_B \approx \frac{\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)}{2mc} \psi_A$$

que muestra que ψ_B , en el límite norelativista es mucho menor que ψ_A .

6.4. La ecuación de Dirac con potencial central

Clasificación de las soluciones

En esta sección se abordará el problema en que se agrega al hamiltoniano de Dirac un potencial central escalar,

$$H = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 + V(r)$$

Las soluciones deben poder separarse según si el spin del electrón es paralelo o antiparalelo al momento angular total. En el caso norelativista estos dos tipos de soluciones se distinguen por el autovalor de

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \cdot \vec{J} &= \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \right) = \vec{\sigma} \cdot \vec{L} + \frac{3\hbar}{2} \\ &= \frac{1}{\hbar} \left(J^2 - L^2 - \frac{3\hbar^2}{4} \right) + \frac{3\hbar}{2} \\ &= \frac{1}{\hbar} \left(J^2 - L^2 + \frac{3\hbar^2}{4} \right) \end{aligned}$$

Se ha usado que

$$J^2 = L^2 + \frac{3\hbar^2}{4} + \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{L}$$

Veremos que en este caso relativista existe otra forma de distinguir los casos. El papel central lo va a jugar un operador

$$K \equiv \beta \vec{\Sigma} \cdot \vec{J} - \frac{\hbar}{2} \beta \quad (6.4.1)$$

Se comienza con

$$[H, \beta \vec{\Sigma} \cdot \vec{J}] = [H, \beta] \vec{\Sigma} \cdot \vec{J} + \beta [H, \vec{\Sigma}] \cdot \vec{J}$$

pero

$$\begin{aligned} [H, \beta] &= c[\vec{\alpha} \cdot p, \beta] \\ &= c(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} \beta - \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \\ &= -2c\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \end{aligned}$$

Se usó que $\alpha^i \beta = -\beta \alpha^i$. De este último resultado sigue que

$$\begin{aligned} [H, \beta \vec{\Sigma} \cdot \vec{J}] &= -2c\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \vec{\Sigma} \cdot \vec{J} + 2ic\beta (\vec{\alpha} \times \vec{p}) \cdot \vec{J} \\ &= -2c\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \vec{\Sigma} \cdot \vec{J} + 2ic\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \times \vec{J} \end{aligned}$$

El primer término es

$$\begin{aligned} -2c\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \vec{\Sigma} \cdot \vec{J} &= -2c\beta \gamma_5 \vec{\Sigma} \cdot \vec{p} \vec{\Sigma} \cdot \vec{J} \\ &= -2c\beta \gamma_5 \left(\vec{p} \cdot \vec{J} + i\vec{\Sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{J}) \right) \\ &= -2c\beta \gamma_5 \vec{p} \cdot \vec{J} - 2ic\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \times \vec{J} \end{aligned}$$

El último término cancela al último término que se obtuvo para $[H, \beta \vec{\sigma} \cdot \vec{J}]$ por lo cual

$$\begin{aligned} [H, \beta \vec{\sigma} \cdot \vec{J}] &= -2c\beta \gamma_5 \vec{p} \cdot \vec{J} \\ &= -2c\beta \gamma_5 \vec{p} \cdot \left(\vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \right) \\ &= -c\beta \hbar \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \\ &= \frac{\hbar}{2} [H, \beta] \end{aligned}$$

de donde se deduce que

$$[H, K] = 0 \quad (6.4.2)$$

Ahora se va a dar otra expresión al operador K . Para ello se observa que

$$\vec{\Sigma} \cdot \vec{J} = \vec{\Sigma} \cdot \left(\vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \right) = \vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \frac{3\hbar}{2}$$

por lo cual

$$\begin{aligned} K &= \beta \left(\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar \right) \\ &= \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{L} + \hbar & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \cdot \vec{L} - \hbar \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.4.3)$$

En esto y lo que sigue conviene recordar que

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \beta \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \end{pmatrix} = -\vec{\Sigma} \beta$$

A continuación se calcula K^2

$$\begin{aligned} K^2 &= \left(\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar \right)^2 \\ &= \Sigma_i \Sigma_j L_i L_j + 2\hbar \vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar^2 \\ &= L^2 + i\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} \times \vec{L} + 2\hbar \vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar^2 \\ &= L^2 - \hbar \vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + 2\hbar \vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar^2 \\ &= L^2 + \hbar \vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar^2 \end{aligned}$$

pero como

$$J^2 = L^2 + \hbar \vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \frac{3\hbar^2}{4}$$

se concluye que

$$K^2 = J^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 \quad (6.4.4)$$

Si se llama $\hbar\kappa$ a los autovalores de K la relación anterior determina que

$$\kappa^2 = j(j+1) + \frac{1}{4} = \left(j + \frac{1}{2} \right)^2$$

esto es

$$\kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \quad (6.4.5)$$

Se ha visto que H conmuta con \vec{J} y con K lo que permite decir que se puede buscar funciones de onda ψ que sean autofunciones simultáneas de (H, K, J^2, J_3) .

Forma de las autofunciones

La forma que se dió a la función ψ cuando se construyó la ecuación de Dirac y el hecho que el autovalor de K sea $\hbar\kappa$ con duce a

$$K\psi = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{L} + \hbar & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \cdot \vec{L} - \hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \hbar\kappa \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$$

se ve que

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{L} + \hbar)\psi_A &= \hbar\kappa\psi_A \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{L} + \hbar)\psi_B &= -\hbar\kappa\psi_B \end{aligned} \quad (6.4.6)$$

Además se exige

$$\begin{aligned} J^2\psi &= \hbar^2 j(j+1)\psi \\ J_3\psi &= \hbar j_3\psi \end{aligned}$$

Observando que $L^2 = J^2 - \hbar\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} - \frac{3\hbar^2}{4}$ y que $\vec{\Sigma}$ tiene a $\vec{\sigma}$ en la diagonal, se puede establecer a nivel de matrices de 2×2 , es decir, en el espacio de ψ_A y ψ_B , que

$$\begin{aligned} L^2 &= J^2 - \hbar\vec{\sigma} \cdot \vec{L} - \frac{3\hbar^2}{4} \\ &= J^2 + \frac{\hbar^2}{4} - \hbar(\vec{\sigma} \cdot \vec{L} + \hbar) \end{aligned} \quad (6.4.7)$$

y como ψ_A y ψ_B son autovectores de $\vec{\sigma} \cdot \vec{L} + \hbar$, estos espinores son autovectores de L^2 aun cuando ψ no lo es:

$$\begin{aligned} L^2\psi_A &= \hbar^2 \left(\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \kappa \right) \psi_A \\ L^2\psi_B &= \hbar^2 \left(\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 + \kappa \right) \psi_A \end{aligned}$$

Estos autovalores para los dos espinores naturalmente deben ser llamados

$$\hbar^2\ell_A(\ell_A + 1), \quad \text{y} \quad \hbar^2\ell_B(\ell_B + 1)$$

Si se reemplaza κ por sus valores (6.4.5) se obtiene

	ℓ_A	ℓ_B
$\kappa = +j + \frac{1}{2}$	$j - \frac{1}{2}$	$j + \frac{1}{2}$
$\kappa = -j - \frac{1}{2}$	$j + \frac{1}{2}$	$j - \frac{1}{2}$

En la diagonal principal se cumple $j = \ell + \frac{1}{2}$ y fuera de la diagonal $j = \ell - \frac{1}{2}$.

Habiendo logrado esto se tiene todos los números cuánticos necesarios para poder escribir la forma de la solución ψ . Por ejemplo, la solución con $j, j_3, \kappa = j + \frac{1}{2}$ se escribe en la forma

$$\begin{aligned}\psi_A &= g(r) Y_{\ell=j-\frac{1}{2}}^m \\ \psi_B &= h(r) Y_{\ell=j+\frac{1}{2}}^m\end{aligned}$$

El libro de Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics* muestra cómo avanzar desde este punto hasta tener un ecuaciones para las partes radiales. Un trabajo largo pero no tan complicado conduce al espectro de energía

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(v + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}\right)^2}}}, \quad v = 0, 1, \dots$$

donde v se relaciona al n del caso no relativista por

$$n = v + j + \frac{1}{2}$$

En efecto, para $Z\alpha \ll 1$ se obtiene que

$$E \approx mc^2 - \frac{2mc^2Z^2\alpha^2}{(2v+2j+1)^2} + \mathcal{O}(Z^4\alpha^4)$$

6.5. Cambios

De clásica a cuántica

El paso de mecánica newtoniana a mecánica cuántica implica cambiar la descripción del estado actual de una partícula puntual por dos vectores: $(\vec{r}, \vec{v})_{t_0}$ a la descripción de ella por una función de onda $\psi(\vec{r}, t_0)$. En el primer caso se necesita seis números reales y en el segundo se necesita una función continua y diferenciable (infinitos números). Es un cambio muy profundo y aun se lucha por entender todo lo que esta nueva física implica.

Una cosa es clara. Mecánica cuántica de muchas partículas puede ser planteada sin dificultad. Por ejemplo, es trivial escribir el hamiltoniano asociado a Z electrones ligados al potencial Coulombiano debido a una carga Ze fija al origen.

El caso relativista

Si se considera dos partículas evolucionando debido a su mutua interacción (puede ser una estrella doble o una molécula de nitrógeno), cada una recibe el efecto de la otra con un cierto retraso. Para simplificar el razonamiento supondremos que la interacción llega exactamente a la velocidad de la luz, como es el caso tanto de las interacciones electromagnéticas como las gravitacionales.

¿Qué tipo de ecuaciones podría escribirse para un sistema de este tipo? Supongamos que para la partícula a se da su posición y velocidad en un instante t_0 . Para poder determinar su evolución inmediatamente posterior se necesita saber los datos de b en un instante *retardado* t_1 . Se podría pensar entonces que para resolver el problema se debe dar las condiciones iniciales de b en ese instante retardado t_1 . Pero esto no puede resultar, porque para poder saber como evoluciona b a partir de t_1 se necesita saber los datos de a en un instante aun anterior t_2 . Razonando de esta manera se puede ver que ni aun teniendo una infinitud de condiciones iniciales de este tipo el movimiento puede quedar determinado.

Se puede ver que el problema es complejo por muchas otras razones. Por ejemplo, si en un instante t_2 la partícula a sufre un cambio discontinuo de velocidad que produce un cambio de la energía de esa partícula y por lo tanto del sistema de dos, ¿qué ocurre con la partícula b ? Nada le puede ocurrir antes del instante t_1 necesario para que pueda llegar una señal de a a b , la que suponemos que viaja a la velocidad de la luz. Hay, entonces,

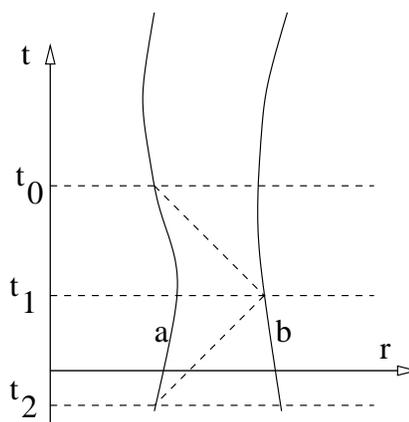


Figura 6.1: La evolución de dos partículas vistas en un diagrama de espacio-tiempo.

un lapso finito, posterior a t_2 en que nada diferente puede ocurrir a b . Sea t_1 el momento en que una señal—que partió de a a la velocidad de la luz—alcanza a b . Si en el instante t_2 la energía de a aumenta bruscamente, ¿que ocurre con b en t_1 ? En general su energía cambia.

¿Hay una energía potencial asociada a este sistema? Ya que a y b están interactuando debiera haber un V , pero ¿cuál es su argumento? No es posible que V sea sencillamente función de la distancia relativa $r_{ab} = \|\vec{r}_a - \vec{r}_b\|$ porque habría que especificar las posiciones que tienen las partículas en un tiempo definido, pero tal especificación resulta arbitraria. En el caso norelativista todo ocurre instantáneamente y este problema no se presenta. Se puede dar muchas vueltas buscando una salida a este dilema, pero no hay solución sencilla.

La forma en que se resuelve este problema relativista es tomando en cuenta que las interacciones no son a distancia, sino locales. Cada partícula interactúa tan solo con entes que estén en ese instante en ese mismo lugar. Si la interacción es electromagnética, la partícula a interactúa en cada instante t con el campo electromagnético que hay en $\vec{r}_a(t)$. En el caso actual el campo electromagnético que actúa sobre a tuvo su origen en la historia pasada de la partícula b , pero eso no importa. Para definir bien el problema de este sistema se debe tener presente que no tan solo evolucionan las dos partículas sino que también evoluciona el campo electromagnético como ente físico independiente. El sistema no puede ser planteado sencillamente como el de dos partículas sino el de *dos partículas y un campo*. El campo tiene infinitos grados de libertad.

El problema se debe plantear con ecuaciones diferenciales de cada partícula interactuando con un campo y además se debe escribir las ecuaciones de evolución del campo mismo, el cual tiene—al menos en parte— a las partículas como fuentes. Un ejemplo podría ser

$$\begin{aligned}\frac{dp_a^\mu}{d\tau} &= \frac{q_a}{c} F^{\mu\nu} u_{a,\nu} \\ \frac{dp_b^\mu}{d\tau} &= \frac{q_b}{c} F^{\mu\nu} u_{b,\nu} \\ \partial_\nu F^{\mu\nu} &= \frac{4\pi}{c} (j_a^\mu + j_b^\mu)\end{aligned}$$

donde q_a y q_b son las cargas de las dos partículas y las densidades de corriente j^μ son las que producen ellas dos. El problema recién planteado

es una mera ilustración y es demasiado complejo para intentar resolverlo.

Lo central que debe retenerse es que en relatividad no se puede ignorar la presencia de campos como entes dinámicos cuando se trata de sistemas con más de una partícula.

El gran atrevimiento de teoría cuántica de campos es suponer que tan solo existen los campos. No hay partículas y campos como entes separados, sino tan solo campos. Y eso que llamamos partículas no es sino una manifestación de los campos. Los fotones son un aspecto de las variables cuánticas electromagnéticas A^μ , los electrones son la manifestación de un campo fermiónico Ψ etc.

Capítulo 7

Pequeña introducción a campos cuánticos en una dimensión

7.1. Osciladores cuánticos

El caso de un oscilador cuántico 1D

El hamiltoniano del oscilador armónico es

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \quad (7.1.1)$$

Si se definen los operadores

$$a = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}} \left(\omega q + \frac{ip}{m} \right),$$
$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}} \left(\omega q - \frac{ip}{m} \right)$$

se comprueba que satisfacen

$$[a, a^\dagger] = 1$$

y que H se puede escribir

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (7.1.2)$$

lo que implica que

$$[H, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger \quad [H, a] = -\hbar\omega a$$

Si Ψ_E es una autofunción de H con autovalor E , es decir, $H\Psi_E = E\Psi_E$ entonces

$$\begin{aligned} H a \Psi_E &= (E - \hbar\omega) a \Psi_E \\ H a^\dagger \Psi_E &= (E + \hbar\omega) a^\dagger \Psi_E \end{aligned} \quad (7.1.3)$$

La primera relación dice que $a\Psi_E \propto \Psi_{E-\hbar\omega}$ mientras que la segunda dice que $a^\dagger\Psi_E \propto \Psi_{E+\hbar\omega}$. Pero $H \geq 0$, lo que implica que tiene que existir una autofunción ψ_0 tal que

$$a \psi_0 = 0 \quad (7.1.4)$$

y claramente, debido a (7.1.2), se tiene

$$H \psi_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \psi_0$$

es decir $\psi_0 = \Psi_{\hbar\omega/2}$ y la autoenergía es $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

Conociendo la autofunción ψ_0 , y sabiendo que $a^\dagger \psi_0$ es una función con energía $\hbar\omega$ superior, se define

$$\psi_1 = a^\dagger \psi_0$$

que tiene autovalor $E_1 = \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{2}$. En general, todas las autofunciones superiores se obtienen en la forma

$$\psi_n = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0 \quad (7.1.5)$$

las que tienen asociado los autovalores

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{con } n = 0, 1, \dots \quad (7.1.6)$$

La función explícita $\psi_0(q)$ se obtiene de resolver (7.1.4),

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} q + \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi_0(q) = 0$$

cuya solución es

$$\psi_0 = \left(\frac{2m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega q^2 / 2\hbar} \quad (7.1.7)$$

que se ha definido normalizada:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0|^2 dq = 1 \quad (7.1.8)$$

El ancho de ψ_0 es $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$.

La deslocalización Δ de la partícula en estado ψ se define por medio de

$$\Delta^2 \equiv \int q^2 |\psi|^2 dq - \left(\int q |\psi|^2 dq \right)^2$$

y en el caso de ψ_0 resulta ser

$$\Delta^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Frecuencias grandes y/o masas grandes dan deslocalización muy pequeña, es decir, en tales extremos el estado ψ_0 es muy localizado. En el caso del oscilador la posición media para cualquier estado es nula.

7.2. Cadena discreta

Modos normales

Consideremos el problema de una cadena unidimensional de partículas P_n de masa κ tal que cada partícula n está unida a la partícula $n+1$ por un resorte de largo natural a y constante elástica $k = \kappa \left(\frac{\kappa}{a}\right)^2$. Además cada partícula n está unida por otro resorte de longitud natural nula y constante elástica $\kappa\Omega^2$ al punto de coordenada $x_n = na$. El largo de la cadena es $L = Na$. Se tomará una cadena periódica, de N partículas, de modo que la partícula $n+N$ es idéntica a la partícula n y, la coordenada q_n debe satisfacer,

$$q_{N+n} = q_n \quad (7.2.1)$$

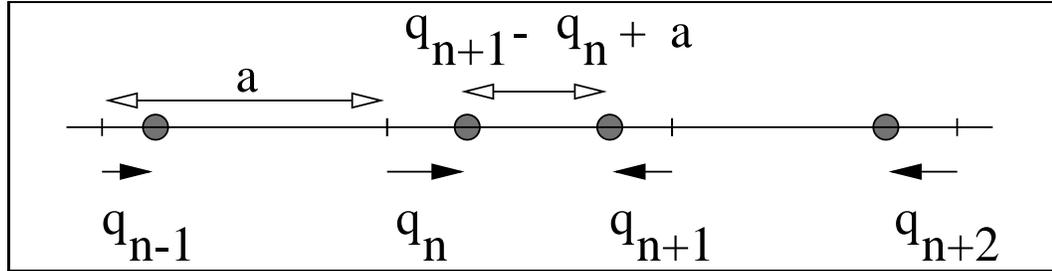


Figura 7.1: Cadena unidimensional de masas. La partícula n se desvía q_n de su punto de reposo x_n y $x_n - x_{n-1} = a$. La cadena tiene largo $L = Na$.

Para que el análisis resulte más sencillo se considerará N par, $N = 2M$.

El hamiltoniano de este sistema es

$$H = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{p_n^2}{2\kappa} + \frac{\kappa}{2} \left(\frac{c}{a} \right)^2 (q_{n+1} - q_n)^2 + \frac{\kappa}{2} \Omega^2 q_n^2 \right\} \quad (7.2.2)$$

y las correspondientes ecuaciones de movimiento son

$$\dot{q}_n = [q_n, H] = \frac{p_n}{\kappa} \quad (7.2.3)$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_n &= [p_n, H] \\ &= \kappa \left(\frac{c}{a} \right)^2 (q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}) - \kappa \Omega^2 q_n \end{aligned}$$

Repasaremos que la forma de oscilar de este sistema se puede descomponer en N *modos normales* de oscilación cada cual con una frecuencia propia.

Para obtener tales modos normales conviene hacer una transformación discreta de Fourier,

$$q_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k Q_k e^{ikna}, \quad p_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k P_k e^{-ikna} \quad (7.2.4)$$

Al imponer que se cumpla la condición de periodicidad (7.2.1) se obtiene que $e^{ikNa} = 1$ lo que implica que kNa tiene que ser un múltiplo entero de 2π , $kNa = 2\ell\pi$ con ℓ entero, con lo cual k puede tomar N valores

$$k = \frac{2\pi\ell}{L}, \quad \ell = 0, \pm 1, \dots, \pm(M-1), M \quad (7.2.5)$$

El rango de variación de k en (7.2.4) es de N valores consecutivos que a veces convendrá tomar simétricos en torno a cero particularmente porque la exigencia de que tanto los q_n como los p_n sean reales permite obtener que

$$Q_{-k}^\dagger = Q_k \quad \text{y} \quad P_{-k}^\dagger = P_k \quad (7.2.6)$$

De la relación $p_n = \kappa \dot{q}_n$ se obtiene que

$$P_k = \kappa \dot{Q}_k^\dagger \quad (7.2.7)$$

La forma $q_n(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k Q_k(t) e^{ikna}$ muestra que a medida que n va tomando sus valores desde 1 hasta su valor máximo N , la exponencial alcanza a tener el exponente $i2\pi\ell$, es decir, la exponencial toma ℓ veces el valor $e^{2i\pi} = 1$, lo que permite asociar al modo k una longitud de onda

$$\lambda = \frac{L}{\ell} \quad \Rightarrow \quad \text{un vector de onda} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\ell}{L} \quad (7.2.8)$$

En lo que sigue, muchas veces se hará uso de

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{2\pi i n r / N} = \delta_{0,r} \quad (7.2.9)$$

donde r es entero y $0 \leq r < N$.

Una forma de convencerse de la propiedad (7.2.9) se consigue tomado en cuenta los siguientes factores: $\zeta \equiv e^{i\alpha}$ es un número complejo sobre la circunferencia unitaria y que puede verse como una rotación del número 1 en un ángulo α en el plano complejo. La potencia ζ^r es una rotación en un ángulo $r\alpha$ del mismo número 1. Si α es una fracción entera de 2π , es decir, si $\alpha = 2\pi/N$, entonces $\zeta^N = 1$ y es fácil convencerse que el conjunto $\{\zeta^n\}_{n=1..N}$ es el conjunto de todas las soluciones de la ecuación $z^N = 1$. Puesto que estas raíces tienen la forma genérica $z_r = \zeta^r$, entonces $z_r^N = \zeta^{rN} = 1$. Además el conjunto $\{z_r^n\}_{n=1..N}$ también recorre (en general no todas las) raíces de $z^N = 1$.

Por otro lado, si se tiene una ecuación de la forma $\sum_{k=0}^N a_k z^k = 0$, la suma de todas las raíces z_j satisface $\sum z_j = -a_{N-1}$ y en nuestra ecuación $z^N - 1 = 0$ el coeficiente a_{N-1} es nulo, es decir $\sum_{n=1}^N \zeta^n = 0$. Pero como ζ^r también sirve como base para generar todas las raíces de $z^N = 1$ entonces más en general $\sum_{n=1}^N \zeta^{rn} = 0$. El único caso en que esto no es cierto es cuando $r = 0$, ya que en tal caso todos los sumandos valen la unidad y $\frac{1}{N} \sum_n \zeta^0 = 1$.

La propiedad (7.2.9) también será escrita en la forma

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i(k-k')na} = \delta_{k,k'} \quad (7.2.10)$$

entendiendo que los números k son del tipo (7.2.5).

Las relaciones inversas a (7.2.4) son

$$Q_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{-ikna} q_n \quad P_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{ikna} p_n \quad (7.2.11)$$

Los diferentes operadores Q_k conmutan entre sí y lo mismo ocurre entre los P_k , en cambio

$$\begin{aligned} [Q_k, P_{k'}] &= \frac{1}{N} \sum_{n,n'} e^{-ikna+ik'n'a} \underbrace{[q_n, p_{n'}]}_{i\hbar \delta_{nn'}} \\ &= \frac{i\hbar}{N} \sum_n e^{i(k'-k)na} \\ &= i\hbar \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (7.2.12)$$

H escrito en base a los modos normales

La energía cinética del sistema es

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2\kappa} \sum_n p_n^2 \\ &= \frac{1}{2\kappa N} \sum_n \sum_{k,k'} e^{-i(k+k')na} P_k P_{k'} \end{aligned}$$

Haciendo primero la suma sobre n se obtiene un $\delta_{k',-k}$ que permite eliminar la suma sobre k' colocando $k' = -k$ lo que da

$$K = \frac{1}{2\kappa} \sum_k P_k P_k^\dagger \quad (7.2.13)$$

De la energía potencial hay diversos tipos de contribuciones. Debiera ser obvio que $\sum_n q_n^2 = \sum_n q_{n+1}^2$ y es fácil ver que

$$\sum_n q_n^2 = \sum_s Q_s Q_s^\dagger \quad (7.2.14)$$

mientras que

$$\begin{aligned}\sum_n q_n q_{n+1} &= \frac{1}{N} \sum_n \sum_{k,k'} e^{ikna+ik'(n+1)a} Q_k Q_{k'} \\ &= \sum_k e^{-ika} Q_k Q_{-k}\end{aligned}\quad (7.2.15)$$

pero como $Q_k Q_{-k}$ no cambia si se hace el cambio $k \rightarrow -k$, se puede reemplazar el coeficiente e^{-ika} por $\frac{1}{2}(e^{ika} + e^{-ika}) = \cos ka$ y por tanto

$$\sum_n q_n q_{n+1} = \sum_k \cos ka Q_k Q_k^\dagger \quad (7.2.16)$$

El hamiltoniano H definido al comienzo tiene dos términos de energía potencial—sean V_1 y V_2 —que a continuación son evaluados separadamente. Primero

$$\begin{aligned}V_1 &= \frac{\kappa}{2} \left(\frac{c}{a}\right)^2 \sum_n (q_{n+1} - q_n)^2 \\ &= \kappa \left(\frac{c}{a}\right)^2 \sum_n (q_n^2 - q_n q_{n+1}) \\ &= \kappa \left(\frac{c}{a}\right)^2 \sum_k (1 - \cos ka) Q_k Q_k^\dagger \\ &= \kappa \left(\frac{c}{a}\right)^2 \sum_k 2 \sin^2 \frac{ka}{2} Q_k Q_k^\dagger \\ &= \frac{\kappa}{2} \left(\frac{c}{a}\right)^2 \sum_k \left(2 \sin \frac{ka}{2}\right)^2 Q_k Q_k^\dagger\end{aligned}\quad (7.2.17)$$

en cambio

$$\begin{aligned}V_2 &= \frac{\kappa}{2} \Omega^2 \sum_n q_n^2 \\ &= \frac{\kappa}{2} \Omega^2 \sum_k Q_k Q_k^\dagger\end{aligned}\quad (7.2.18)$$

Por lo tanto el hamiltoniano total puede ser separado en la suma independiente de hamiltonianos para cada modo normal k ,

$$\begin{aligned}H &= \sum_k H_k \\ H_k &= \frac{1}{2\kappa} P_k P_k^\dagger + \frac{\kappa}{2} \left\{ \left(\frac{c}{a}\right)^2 \left(2 \sin \frac{ka}{2}\right)^2 + \Omega^2 \right\} Q_k Q_k^\dagger\end{aligned}\quad (7.2.19)$$

Cada H_k tiene la forma (7.1.1) con frecuencias características ω_k dadas por

$$\omega_k^2 = \left(\frac{c}{a}\right)^2 \left(2 \sin \frac{ka}{2}\right)^2 + \Omega^2 \quad (7.2.20)$$

Este H_k implica que

$$\ddot{Q}_k = -\omega_k^2 Q_k$$

cuya solución genérica es

$$Q_k = Q_k(0) \cos \omega_k t + \frac{\dot{Q}_k(0)}{\omega_k} \sin \omega_k t \quad (7.2.21)$$

Breve incursión al límite continuo

Por un momento se considera el caso en que $N \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$ tal que $L = Na$ permanezca finito. En tal caso

$$\begin{aligned} \hbar \omega_k &\approx \sqrt{\left(\frac{\hbar c}{a} 2 \frac{ka}{2}\right)^2 + \hbar^2 \Omega^2} \\ &= \sqrt{\hbar^2 k^2 c^2 + \hbar^2 \Omega^2} \\ &= \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \end{aligned} \quad (7.2.22)$$

donde se usa $p = \hbar k$ y se define m tal que

$$\hbar \Omega = mc^2$$

Si se recuerda que también se ha usado $\mu \equiv \frac{mc}{\hbar}$ que tiene dimensiones inversas a longitud, se ve que

$$\Omega = \mu c$$

De modo que a la masa de una partícula se puede asociar naturalmente la longitud $\frac{\hbar}{mc}$ y el tiempo $\frac{\hbar}{mc^2}$.

Si bien este es un sistema no relativista es interesante observar que si se asocia a ω_k la energía $E_k = \hbar \omega_k$, al vector de onda k se le asocia el momentum lineal $p = \hbar k$ y a Ω la energía en reposo (la que subsiste cuando el momentum p es nulo), $\hbar \Omega = mc^2$ y (7.2.22) toma la forma $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$

Aunque este resultado pueda resultar sorprendente, es de una enorme generalidad. En física cuántica, las pequeñas excitaciones—en torno a un equilibrio estable—de sistemas de muchos grados de libertad, se comportan como partículas. Así surge el concepto de fonones en redes elásticas y en líquidos, como ondas localizadas de spin en materiales ferromagnéticos, etc. Y estas excitaciones que se comportan como partículas en general tienen masa no nula.

Como ya se discutió antes, los sistemas relativistas necesariamente deben tratar la dinámica de campos y surge la necesidad de describirlos cuánticamente. El primer atisbo de tal necesidad viene de la descripción de la radiación de cuerpo negro de Planck (1900) y Einstein y de la teoría del efecto fotoeléctrico de Einstein de 1905.

Operadores de subida y bajada

Si se introduce los operadores

$$\begin{aligned} a_k &= \sqrt{\frac{\kappa}{2\hbar\omega_k}} \left(\omega_k Q_k + \frac{i}{\kappa} P_k^\dagger \right) \\ a_k^\dagger &= \sqrt{\frac{\kappa}{2\hbar\omega_k}} \left(\omega_k Q_k^\dagger - \frac{i}{\kappa} P_k \right) \end{aligned} \quad (7.2.23)$$

se comprueba que satisfacen

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \quad (7.2.24)$$

y H puede ser reescrito como

$$H = \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right) \quad (7.2.25)$$

que es el hamiltoniano de N osciladores independientes rotulados k en su forma (7.2.19). Las energías propias de H pueden ser escritas como

$$E = \sum_k \hbar\omega_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \quad n_k = 0, 1, 2, \dots \quad (7.2.26)$$

donde la energía del estado fundamental (llamada también *energía de punto cero*) es $E_0 = \sum_k \frac{1}{2} \hbar\omega_k$ y es un número finito porque N es finito, en

el caso continuo diverge. E_0 corresponde al caso en que todos los n_k son nulos, es decir, cada uno de los osciladores independientes está en su estado fundamental. A este estado fundamental se lo llama *vacío* (carente de excitaciones).

La energía E queda caracterizada por el conjunto de enteros (n_1, n_2, \dots, n_N) . En lo sucesivo se usará la notación

$$\varepsilon_k \equiv \hbar\omega_k \quad (7.2.27)$$

y la autofunción Ψ asociada al autovalor (7.2.26) se debe denotar $\Psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}$ y, en analogía con (7.1.5), ella se puede relacionar al estado fundamental Ψ_0 por

$$\Psi_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \frac{1}{\sqrt{n_1! \dots n_N!}} \left(a_1^\dagger\right)^{n_1} \dots \left(a_N^\dagger\right)^{n_N} \Psi_0 \quad (7.2.28)$$

Una primera señal de que las excitaciones de estos sistemas pueden ser interpretadas como partículas proviene de constatar que los autovalores de H se componen de múltiplos enteros de las energías ε_s . Si se trata realmente de un sistema elástico vibrante, estas partículas son fonones. Puesto que las energías son aditivas, se trata de partículas que no interactúan. Más aun, el formalismo lleva incorporado que no hay forma de distinguir a partículas que tengan asociada la misma frecuencia, lo que implica (aunque no será visto) que estas partículas satisfacen la estadística de Bose-Einstein. Uno de los aspectos revolucionarios de estos sistemas de campos cuánticos es la pérdida de individualidad de las partículas: se trata de partículas indistinguibles. La noción de esta indistinguibilidad *bosónica* está en la base de la teoría del calor específico de sólidos a muy bajas temperaturas.

Expresión para q_n en base a los pares (a, a^\dagger)

La expresión para q_n dada en (7.2.4) puede ser escrita de otra forma haciendo uso de (7.2.21),

$$\begin{aligned} q_n &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \left(Q_k(0) \cos \omega_k t + \frac{\dot{Q}_k(0)}{\omega_k} \sin \omega_k t \right) e^{ikna} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \frac{1}{2\omega_k} \left[\left(\omega_k Q_k(0) - \frac{iP_k^\dagger(0)}{\kappa} \right) e^{i\omega_k t} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \left(\omega_k Q_k(0) + \frac{iP_k^\dagger(0)}{\kappa} \right) e^{-i\omega_k t} \Big] e^{ikna} \\
 = & \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k \kappa}} \left[a_k^\dagger(0) e^{i\omega_k t - ikna} \right. \\
 & \left. + a_k(0) e^{-i\omega_k t + ikna} \right] \\
 = & \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k \kappa}} \left[a_k^\dagger e^{i(\varepsilon_k t - px)/\hbar} + a_k e^{-i(\varepsilon_k t - px)/\hbar} \right]
 \end{aligned}
 \tag{7.2.29}$$

Para obtener la penúltima expresión se hizo uso de la igualdad $\sum_k Q_k e^{ikna} = \sum_k Q_k^\dagger e^{-ikna}$ y otra similar para P_k . La última es una forma atractiva que anticipa lo que será de interés en el límite continuo. El resultado final se puede resumir como

$$q_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k \kappa}} \left[a_k^\dagger e^{ipx/\hbar} + a_k e^{-ipx/\hbar} \right]
 \tag{7.2.30}$$

donde esta vez px se refiere al producto relativista.

7.3. Cadena abierta

Se ha estado estudiando en cierto detalle la cadena armónica unidimensional periódica de N partículas de masa κ y resortes con constantes elásticas $\kappa \left(\frac{c}{a}\right)^2$ y $\kappa \Omega^2$. A continuación se procederá a obtener la descripción de una cadena abierta a partir de lo que ya se sabe.

Se parte de la cadena usual con N par tal que $N = 2N_1 + 2$ y, de todos los movimientos posibles de esta cadena, se considerará solo aquellos que quedan determinados con condiciones iniciales tales que dos partículas: la $n = N_1 + 1$ y la $n = N = 2N_1 + 2$ se quedan todo el tiempo

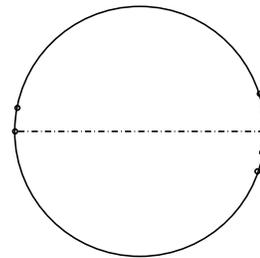


Figura 7.2: Se impone dos nodos a la cadena periódica

quietas,

$$q_{N_1+1}(t) = 0 \quad \text{y} \quad q_{2N_1+2}(t) = 0$$

La fuerza F_n sobre la partícula n tiene una parte que es proporcional a $q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}$ y otra proporcional a q_n . Puesto que si una partícula permanece en reposo necesariamente la fuerza sobre ella es nula, $F_n(t) = 0$, entonces, para que un cierto q_n permanezca nulo todo el tiempo necesariamente se debe tener que $q_{n+1} = -q_{n-1}$. En el caso que se ha definido arriba, para que la fuerza sobre la partícula $N_1 + 1$ sea nula es necesario que las vecinas se muevan satisfaciendo $q_{N_1+2} = -q_{N_1}$ todo el tiempo. Para que esto pueda ser cierto todo el tiempo, a su vez algo semejante debe ocurrir con las vecinas de estas vecinas. Con paciencia se puede demostrar que el movimiento más general con la restricción que imponen aquellos dos nodos es que

$$q_{N_1+1+n}(t) = -q_{N_1+1-n}(t)$$

equivalemente

$$q_n(t) = -q_{N-n}(t) \quad (7.3.1)$$

Tomando esta relación con $n = 0$ implica $q_{N_1+1} = 0$ que es una de las condiciones de nodo. Tomando $n = N_1 + 1$ implica $q_{2N_1+2} = 0$ que es el otro nodo.

La propiedad (7.3.1) sirve para ver que

$$\begin{aligned} Q_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N q_n e^{-ikna} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N_1} q_n e^{-ikna} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n'=N_1+2}^{2N_1+1} q_{n'} e^{-ikn'a} \end{aligned}$$

La suma originalmente sobre $N = 2N_1 + 2$ valores de n fue separada en dos sumas, sobre N_1 valores cada una. En la segunda se hace el cambio $n' = 2N_1 + 2 - n$ lo que permite demostrar que el rango ya dicho de n' se traduce en que $n = 1, \dots, N_1$ tal como en la primera suma. Además la exponencial es

$$e^{-ik(N-n)a} = e^{ikna}$$

Esta exponencial multiplica a $q_{n'} = q_{N-n} = -q_n$ que conduce a

$$Q_k(t) = \frac{-i\sqrt{2}}{\sqrt{N_1+1}} \sum_{n=1}^{N_1} q_n(t) \sin kna \quad (7.3.2)$$

Es obvio que $Q_0 = 0$. Veamos que $Q_{\ell=N_1+1}$ consta de la suma anterior con senos de argumento πn , los que son nulos, es decir, $Q_{\ell=N_1+1} = 0$. De (7.3.2) es directo ver que

$$Q_k = -Q_{-k} \quad (7.3.3)$$

que muestra que hay solamente N_1 funciones $Q_\ell(t)$ diferentes.

Conociendo esta simetría de los Q_k se vuelve a la conocida expansión de q_n en los Q_k y es fácil demostrar que

$$q_n = \frac{i\sqrt{2}}{\sqrt{N_1+1}} \sum_{k=k_1}^{k_{N_1}} Q_k(t) \sin kna$$

Puesto que los Q_k son imaginarios, los q_n son reales a pesar de las apariencias. Para demostrarlo se comienza desde $q_n = (1/\sqrt{N}) \sum_k Q_k e^{ikna}$ que es una suma con $N = 2N_1 + 2$ sumandos. Pero se sabe que dos son nulos: $k = 0$ y $k = \frac{\pi}{a}$. La suma sobre los $2N_1$ valores de k que quedan se puede separar en la suma sobre $k > 0$ y otra sobre los $k < 0$. Usando (7.3.3) se llega a lo ya dicho.

El hamiltoniano del sistema es el mismo (con o sin Ω) ya visto y su reducción en términos de los Q_k también es la misma. Se trata de un caso particular de lo ya visto y conocido. Se sabe que $H = \sum_k H_k$ con $N = 2N_1 + 2$ hamiltonianos H_k . En el caso actual dos de ellos son idénticamente nulos porque $Q_0 = 0$ y $Q_{N_1+1} = 0$. Además, debido a (7.3.3), $H_\ell = H_{N-\ell}$, entonces basta con sumar en la mitad del rango

$$H = \sum_k H_k \quad (7.3.4)$$

7.4. El efecto Casimir

Se estudiará la energía del estado fundamental E_0 del hamiltoniano completo en el caso $\Omega = 0$

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\hbar}{2} \sum_k \omega_k = \frac{\hbar c}{a} \sum_\ell \sin \frac{\pi \ell}{2(N_1+1)} \\ &= \frac{\hbar c}{a} \sum_\ell \Im \exp \frac{i\pi \ell}{2(N_1+1)} = \frac{\hbar c}{a} \Im \sum_\ell \left(e^{ib} \right)^\ell \end{aligned}$$

con $b = \frac{\pi}{2(N_1+1)}$. Se trata de una suma geométrica. La suma es

$$\sum_{\ell=1}^{N_1} (e^{ib})^\ell = \frac{e^{ib(N_1+1)} - e^{ib}}{e^{ib} - 1} \quad (7.4.1)$$

una vez que se usa la forma explícita de b se concluye que la parte imaginaria de la suma es

$$E_0 = \frac{\hbar c}{a} \frac{\sin \frac{\pi}{2(N_1+1)} + \cos \frac{\pi}{2(N_1+1)} - 1}{2 \left(1 - \cos \frac{\pi}{2(N_1+1)}\right)}$$

A continuación se hace los reemplazos $N_1 + 1 = \frac{L_1}{a}$ y se expande en a , lo que da que la energía del estado fundamental de la cadena abierta de largo $L_1 = (N_1 + 1)a$, cuando N_1 es muy grande, es

$$E_0(L_1) \approx \frac{2\hbar c L_1}{\pi a^2} - \frac{\hbar c}{2a} - \frac{\hbar c \pi}{24L_1} + \mathcal{O}\left(\frac{L_1}{N_1}\right)_{N_1 \rightarrow \infty, L_1 \text{ fijo}} \quad (7.4.2)$$

Un campo (por ejemplo el campo electromagnético) tiene, en cada punto del espacio, un cierto número de grados de libertad. Estos grados de libertad normalmente pueden oscilar en torno a su mínimo de energía. Macroscópicamente esas excitaciones pueden detectarse, entre otras formas, como ondas.

Clásicamente el mínimo absoluto de energía corresponde a campo nulo en todas partes (por ejemplo, la densidad energía electrodinámica en cada punto del espacio es una mezcla de E^2 y de B^2). Cuánticamente el mínimo es el estado fundamental, *el vacío*, corresponde a la energía E_0 descrita en nuestro sencillo caso 1D algo más arriba. Ese estado fundamental tiene las oscilaciones mínimas asociadas a cada frecuencia posible del sistema.

Si se tiene dos placas planas, paralelas (distancia x entre ellas) y conductoras en el vacío las oscilaciones del campo *tienen nodos en el conductor*, porque el campo eléctrico no penetra un conductor perfecto. Para

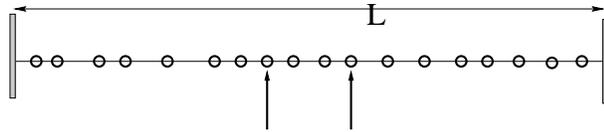


Figura 7.3: A una cadena armónica y cuántica de largo L se le impone (condición de borde) dos nodos a distancia x .

hacer el análisis lo más sencillo posible se supone que, efectivamente, se trata de dos placas paralelas perfectamente conductoras. Esta condición de borde altera el valor de la energía E_0 del estado fundamental del campo, y depende de la distancia x entre las placas, $E_0 = V(x)$. Puesto que un sistema, inicialmente en reposo, tiende a evolucionar en la dirección en que la energía disminuye, entonces se puede adivinar que existe una fuerza entre las placas y ella se relaciona con $-dE_0/dx$.

En lo que sigue se resuelve esto para el caso de la cadena 1D de osciladores cuánticos. Suponemos que se tiene un sistema \bar{S} de largo fijo L (ver figura) que consiste en una parte central de largo $L_1 = x$ y dos partes laterales de largo $L_2 = \frac{1}{2}(L - x)$. El sistema tiene dos partículas *forzadas* a estar quietas (son los nodos que, en el caso electromagnético, representan las placas conductoras). La energía de este sistema es separable en la suma las energías de cada una de sus partes. Se supone que $x \gg a$ y que el número de partículas en cada uno de los tres tramos es arbitrariamente grande.

La energía del sistema \bar{S} resulta ser

$$\begin{aligned}\bar{E}_0 &= 2E_0\left(\frac{L-x}{2}\right) + E_0(x) \\ &\approx \frac{2\hbar cL}{\pi a^2} - \frac{3\hbar c}{a} - \frac{\hbar c\pi}{24x} - \frac{\hbar c\pi}{6(L-x)}\end{aligned}\quad (7.4.3)$$

La fuerza entre los nodos separados por la distancia x es $F = -\frac{d\bar{E}_0}{dx}$ y, de la expresión anterior, tomando el límite $L \rightarrow \infty$ resulta

$$F = -\frac{\hbar c\pi}{24x^2}\quad (7.4.4)$$

Esta fuerza es finita en el límite al continuo y es atractiva.

En electrodinámica cuántica la presión—fuerza por unidad de área—entre dos grandes placas conductoras paralelas separadas por una distancia x es

$$P_{QED} = -\frac{\pi}{480} \frac{\hbar c}{x^4}$$

Fue Casimir quien en 1948 se dio cuenta por primera vez de la posibilidad de la existencia de esta presión:

H.B.G. Casimir, *Proc. Nederlands aka. Wetenschappen, Amsterdam* **60** 793 (1948)

H.B.G. Casimir, D. Polder, *Phys. Rev.* **73** 360 (1949).

Aparentemente esta fuerza fue medida hace mucho tiempo:

B.V. Deryagin, I.I. Abrikosava, *J. Exp. Theor. Phys.* **30** 993 (1956)

B.V. Deryagin, I.I. Abrikosava, E.M. Lifshitz, *Quart. Rev. Chem. Soc.* **10** 295 (1956)

J.A. Kitchnet, A.P. Prosser, *Proc. Roc. Soc. A* **242** 403 (1957).

Medición reciente:

S. K. Lamoreaux, *Physical Review Letters*, **78**, 5 (1997).

El efecto Casimir ha sido extendido a casos más allá de dos placas conductoras paralelas y para otros campos que el electromagnético. Por ejemplo, se puede tratar el caso de una caja conductora (cubo o esfera) y demostrar que hay una presión sobre estas paredes tendiente a disminuir el volumen de la caja. Una discusión pedagógica del fenómeno se encuentra en:

J.H. Cooke, *Am. J. Phys.* **66** 569 (1998).

7.5. Límite al continuo

Del caso de la cadena elástica anterior se obtendrá un caso continuo tomando un límite especial. Las coordenadas $x_n = na$ serán reemplazadas por la variable continua x , y se hará los reemplazos

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{\kappa c^2}{a}} q_n(t) &\rightarrow \phi(t, x) \\ a \sum_n &\rightarrow \int_{-L/2}^{L/2} dx \end{aligned} \quad (7.5.1)$$

de tal forma que, como $q_n \rightarrow 0$, los $\phi(t, x)$ son finitos. Esto permite ver que

$$\sum_n \frac{p_n^2}{2\kappa} = \sum_n \frac{\kappa c^2}{2c^2} \dot{q}_n^2 \rightarrow \frac{1}{2c^2} \int \dot{\phi}^2(x) dx \quad (7.5.2)$$

y similarmente

$$\sum_n \frac{\kappa}{2} \left(\frac{c}{a}\right)^2 (q_{n+1} - q_n)^2 \rightarrow \frac{1}{2} \int \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 dx \quad (7.5.3)$$

$$\sum_n \frac{\kappa}{2} \Omega^2 q_n^2 \rightarrow \frac{\Omega^2}{2c^2} \int \phi^2(x) dx = \frac{\mu^2}{2} \int \phi^2(x) dx$$

y que da como hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2} \int \left(\frac{1}{c^2} \dot{\phi}^2 + \phi'^2 + \mu^2 \phi^2 \right) dx \quad (7.5.4)$$

y el lagrangeano es

$$L = \frac{1}{2} \int \left(\frac{1}{c^2} \dot{\phi}^2 - \phi'^2 - \mu^2 \phi^2 \right) dx \quad (7.5.5)$$

pero la combinación $\frac{1}{c^2} \dot{\phi}^2 - \phi'^2$ es

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_0} \frac{\partial \phi}{\partial x_0} - \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \frac{\partial \phi}{\partial x_1} = \sum_{\mu=0}^1 g^{\mu\nu} \frac{\partial \phi}{\partial x^\mu} \frac{\partial \phi}{\partial x^\nu} = \partial^\mu \phi \partial_\mu \phi$$

lo que permite escribir la integral de acción $S = \int L dt$ como una integral invariante

$$S = \frac{1}{2c} \int (\partial^\mu \phi \partial_\mu \phi - \mu^2 \phi^2) dx_0 dx_1$$

El campo $\phi(x, t)$ es un campo escalar, invariante relativista, que satisface la ecuación de evolución,

$$(\partial^\nu \partial_\nu + \mu^2) \phi = 0 \quad (7.5.6)$$

que es una ecuación invariante relativista conocida como ecuación de Klein-Gordon.

Un elemento de 4-volumen transforma en la forma

$$d^4x' = \left[\frac{\partial \{x'^0, \dots, x'^3\}}{\partial \{x^0, \dots, x^3\}} \right] d^4x$$

donde el coeficiente es el Jacobiano usual. En el caso del espacio de Minkowsky las coordenadas en un sistema de referencia y en otro se relacionan por medio de una transformada de Lorentz

$$x'^\lambda = \Lambda^\lambda_{\nu} x^\nu$$

lo que permime ver que este Jacobiano es sencillamente el determinante $\det \Lambda$, el que debiéramos saber que vale 1. Es decir, $d^4x' = d^4x$.

La expresión para la integral S de acción lleva a definir la *densidad lagrangeana*, \mathcal{L}

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\partial^\lambda \phi \partial_\lambda \phi - \mu^2 \phi^2 \right) \quad (7.5.7)$$

Conociendo \mathcal{L} la ecuación de movimiento en general es

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi(x)} = \frac{\partial}{\partial x^\lambda} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\lambda \phi(x))} \right) \quad (7.5.8)$$

y pueden ser obtenidas mediante un principio variacional tal como siempre.

En el caso discreto las posiciones en la red son designadas por los índices n y

$$\sum_{n=1}^N \delta_{nm} = 1$$

Para llevar esta relación al caso continuo multiplicamos y dividimos por a ,

$$\sum_{n=1}^N a \frac{\delta_{nm}}{a} = 1$$

El factor a combinado con la suma se convierte en $\int dx$, mientras que la fracción que queda como integrando es nula si $n \neq m$ y diverge si $n = m$, ya que $a \rightarrow 0$. Además esta integral es la unidad. Esto permite agregar que

$$\frac{\delta_{nm}}{a} \rightarrow \delta(x - x') \quad (7.5.9)$$

con $na \rightarrow x$ y $ma \rightarrow x'$.

Definiendo

$$\varphi_k = \sqrt{\kappa c^2} Q_k \quad (7.5.10)$$

es inmediato ver que

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k \varphi_k e^{ikx} \quad (7.5.11)$$

y, heredan de los Q_k la propiedad

$$\varphi_k = \varphi_{-k}^\dagger \quad (7.5.12)$$

Además la propiedad (7.2.9) se puede reescribir como

$$\frac{1}{L} \sum_n e^{i(k-k')na} a = \delta_{kk'} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} e^{i(k-k')x} dx = \delta_{kk'} \quad (7.5.13)$$

Cuando se desee pasar al límite $L \rightarrow \infty$ se debe hacer la sustitución

$$\frac{1}{2\pi} \sum_n e^{i(k-k')na} a \longrightarrow \delta(k-k') \quad (7.5.14)$$

Se deja como ejercicio demostrar que el hamiltoniano es la forma

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \left(\frac{1}{c^2} \dot{\varphi}_k \dot{\varphi}_k^\dagger + \omega_k^2 \varphi_k \varphi_k^\dagger \right) \quad (7.5.15)$$

salvo por una constante.

7.6. Medio unidimensional cuántico

A partir de ahora se va a tomar unidades tales que

$$\hbar = 1, \quad c = 1.$$

El paso al caso continuo nuevamente se hace utilizando el cambio (7.5.1), se obtiene la misma integral de acción, la misma densidad lagrangeana y la ecuación de movimiento sigue siendo la ecuación de Klein-Gordon,

$$\left(\partial^\lambda \partial_\lambda + \mu^2 \right) \phi = 0 \quad (7.6.1)$$

La diferencia, con lo anterior, está en que las variables de campo $\phi(x)$ no conmutan con sus variables conjugadas

$$\pi(x) = \dot{\phi}(x)$$

En la relación de conmutación $[q_n, p_{n'}] = i\delta_{nn'}$ el factor q_n es reemplazado por $\sqrt{\frac{a}{\kappa}}\phi(x, t)$ y similarmente el factor $p_m = \kappa\dot{q}_m$ es reemplazado por $\kappa\sqrt{\frac{a}{\kappa}}\dot{\phi}(x, t)$ lo que deja para el lado izquierdo $a[\phi(x, t), \dot{\phi}(x', t)]$ y debe igualarse con $i\delta_{nm}$, pero antes se divide por a y se usa la identificación (7.5.9), lo que da

$$[\phi(x, t), \dot{\phi}(x', t)] = i\delta(x - x') \quad (7.6.2)$$

que va acompañada de

$$[\phi(x, t), \phi(x', t)] = 0, \quad [\dot{\phi}(x, t), \dot{\phi}(x', t)] = 0. \quad (7.6.3)$$

En el contexto relativista actual puede parecer extraño que las relaciones de conmutación estén dadas a tiempos iguales porque pareciera que se está privilegiando un sistema de referencia particular. Un poco más abajo se verá que el formalismo es perfectamente covariante.

A partir de las funciones

$$f_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi E_p}} e^{-iE_p t + i p x} \quad (7.6.4)$$

donde $E_p = \sqrt{p^2 + \mu^2}$ y tales que satisfacen una relación de ortonormalidad

$$i \int [f_p^*(x, t) \{\partial_0 f_{p'}(x, t)\} - \{\partial_0 f_p^*(x, t)\} f_{p'}(x, t)] dx = \delta(p - p') \quad (7.6.5)$$

se definen los operadores

$$\begin{aligned} a(p) &= i \int [f_p^*(x, t) \dot{\phi}(x, t) - \dot{f}_p^*(x, t) \phi(x, t)] dx \\ a^\dagger(p) &= -i \int [f_p(x, t) \dot{\phi}(x, t) - \dot{f}_p(x, t) \phi(x, t)] dx \end{aligned} \quad (7.6.6)$$

que, a continuación, se argumentará que no dependen del tiempo. En efecto, si se hace uso de la ecuación de evolución $\ddot{\phi} = \partial^2 \phi / \partial x^2 + \mu^2 \phi$, se

desprende que

$$\begin{aligned}
 \dot{a}_p &= i \int (\dot{f}_p^* \dot{\phi} + f_p^* \ddot{\phi} - \ddot{f}_p^* \phi - \dot{f}_p^* \dot{\phi}) dx \\
 &= i \int (f_p^* \ddot{\phi} - \ddot{f}_p^* \phi) dx \\
 &= i \int (f_p^* (\partial^2 - \mu^2) \phi - \ddot{f}_p^* \phi) dx
 \end{aligned} \tag{7.6.7}$$

En el último paso se usó la notación $\partial^2 = \partial^2 / \partial x^2$. De los tres términos del integrando aislamos

$$\begin{aligned}
 I &= i \int f_p^* \partial^2 \phi dx \\
 &= i \int \partial (f_p^* \partial \phi) dx - i \int \partial (f_p^*) \partial \phi dx
 \end{aligned} \tag{7.6.8}$$

pero el primer término es nulo porque es una integral de *superficie* en un dominio periódico. La última expresión se vuelve a integrar por partes y da,

$$I = i \int (\partial^2 f_p^*) \phi dx = i \int (-p^2 f_p^*) \phi dx$$

y como $\ddot{f}_p^* = -E_p^2 f_p^*$ el integrando final que expresa \dot{a}_p contiene el factor $-p^2 - \mu^2 + E_p^2$ que es nulo.

Puesto que ni $a(p)$ ni $a^\dagger(p)$ dependen del tiempo es fácil demostrar que

$$[a(p), a^\dagger(p')] = \delta(p - p') \tag{7.6.9}$$

$$[a(p), a(p')] = 0 \quad [a^\dagger(p), a^\dagger(p')] = 0$$

Con lo anterior se puede escribir $\phi(x, t)$ en la forma

$$\phi(x, t) = \int \left\{ a(p) f_p(x, t) + a^\dagger(p) f_p^*(x, t) \right\} dp \tag{7.6.10}$$

Capítulo 8

Campos cuánticos

8.1. El campo cuántico escalar en 3 + 1 dimensiones

8.2. Funciones base

Para expandir los campos se define las funciones base

$$f_{\vec{p}}^{(n)}(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega_p}} e^{-inpx} \quad (8.2.1)$$

con $\omega_p = \sqrt{\vec{p}^2 + \mu^2}$ y $px \equiv \omega_p x_0 - \vec{p} \cdot \vec{r}$, $n = \pm 1$.

En este espacio se define el producto escalar

$$(f, g) \equiv i \int (f^* \dot{g} - \dot{f}^* g) d^3 r \quad (8.2.2)$$

y es fácil demostrar que

$$\left(f_{\vec{p}}^{(n)}, f_{\vec{p}'}^{(n')} \right) = n \delta_{nn'} \delta^3(\vec{p} - \vec{p}') \quad (8.2.3)$$

Se demuestra a continuación que el producto escalar de dos soluciones arbitrarias de la ecuación de Klein-Gordon (que tiendan a cero en

infinito más rápido que r^{-2}) es una cantidad independiente del tiempo. Definiendo la integral

$$R = \int_V (f\dot{g} - \dot{f}g) d^3r$$

en un volumen finito que luego se hará crecer a infinito y se calcula

$$\begin{aligned} \dot{R} &= \int_V (\dot{f}\dot{g} + f\ddot{g} - \dot{f}\dot{g} - \ddot{f}g) d^3r \\ &= \int_V (f(\nabla^2 - \mu^2)g - g(\nabla^2 - \mu^2)f) d^3r \\ &= \int_{\partial V} (f\nabla g - g\nabla f) \cdot d\vec{S} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Se usó que las dos funciones satisfacen la ecuación de KG, en otro paso se hizo uso de que $\nabla \cdot (f\nabla g - g\nabla f) = f\nabla^2 g - g\nabla^2 f$ y finalmente se supuso que las funciones tienden a cero en infinito más rápidamente que r^{-2} para que la integral de superficie se anule cuando ∂V se va a infinito.

8.3. La expansión del campo

En mecánica cuántica básica se trata de sistemas con un número finito de grados de libertad. Un campo $\phi(\vec{r}, t)$ representa infinitos grados de libertad y es natural que la notación al tratarlo cuanticamente sufra algunos cambios.

A continuación se considerará un campo cuántico $\phi(\vec{r}, t)$ cuya evolución libre queda definida por la densidad lagrangeana,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left(\partial^\lambda \phi \partial_\lambda \phi - \mu^2 \phi^2 \right) \quad (8.3.1)$$

Así como en mecánica clásica el momento conjugado a una variable q_j es $p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}$, en el contexto actual se definen los momentos conjugados a ϕ , que se denotan π por

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \dot{\phi}, \quad (8.3.2)$$

Es natural entonces que la teoría sea contruida en base a las relaciones de conmutación

$$[\phi(\vec{r}, t), \dot{\phi}(\vec{r}', t)] = i\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \quad (8.3.3)$$

y todas las otras relaciones de conmutación a tiempos iguales son nulas.

El campo se expande

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \sum_n \int d^3 p a_{\vec{p}}^{(n)} f_{\vec{p}}^{(n)}(x) \\ &= \int \left\{ a(\vec{p}) f_{\vec{p}}(\vec{r}, t) + a^\dagger(\vec{p}) f_{\vec{p}}^*(\vec{r}, t) \right\} d^3 p \end{aligned} \quad (8.3.4)$$

donde debe entenderse que $a^{(+1)} = a$ y $a^{(-1)} = a^\dagger$.

En forma enteramente similar a como se vió antes, se cumple que

$$\begin{aligned} a(\vec{p}) &= i \int \left\{ f_{\vec{p}}^*(\vec{r}, t) \dot{\phi}(\vec{r}, t) - \dot{f}_{\vec{p}}^*(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) \right\} d\vec{r} \\ a^\dagger(\vec{p}) &= -i \int \left\{ f_{\vec{p}}(\vec{r}, t) \dot{\phi}(\vec{r}, t) - \dot{f}_{\vec{p}}(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) \right\} d\vec{r} \end{aligned} \quad (8.3.5)$$

En forma más compacta lo mismo se puede escribir

$$a_{\vec{p}}^{(n)} = n \left(f_{\vec{p}}^{(n)}, \phi \right) \quad (8.3.6)$$

De una propiedad ya vista del producto escalar se desprende que los $a^{(n)}$ no dependen del tiempo.

De lo anterior se puede ver que

$$\left[a_{\vec{p}}^{(n)}, a_{\vec{p}'}^{(n')} \right] = n \delta_{n, -n'} \delta^3(\vec{p} - \vec{p}') \quad (8.3.7)$$

que en forma más explícita es

$$\begin{aligned} [a(\vec{p}), a(\vec{p}')] &= 0 \\ [a^\dagger(\vec{p}), a^\dagger(\vec{p}')] &= 0 \\ [a(\vec{p}), a^\dagger(\vec{p}')] &= \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') \end{aligned} \quad (8.3.8)$$

8.4. H en base a los operadores de creación y destrucción

El hamiltoniano es

$$H = \frac{1}{2} \int \left(\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + (\nabla \phi)^2 + \mu^2 \phi^2 \right) d^3 r$$

Explotando la expansión (8.3.4) se obtiene fácilmente que

$$H = \frac{1}{2} \int d^3 p \omega_p \left(a_p a_p^\dagger + a_p^\dagger a_p \right)$$

Haciendo un corrimiento infinito de la energía se obtiene

$$H = \int d^3 p \omega_p a_p^\dagger a_p$$

8.5. La energía potencial entre dos nucleones

Al hamiltoniano libre de la sección anterior se agrega un término de interacción con dos partículas puntuales clásicas $H_I = \int d^3 r \mathcal{H}_I$,

$$\mathcal{H}_I = g \rho(\vec{r}) \phi(x)$$

donde

$$\rho(\vec{r}) = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}_1) + \delta^3(\vec{r} - \vec{r}_2)$$

El cambio de la energía, respecto a aquella del hamiltoniano libre H aproximadamente es $E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots$ donde $E_n^1 = \langle n | \mathcal{H}_I | n \rangle = g \rho(\vec{r}) \langle n | \phi | n \rangle = 0$ y

$$E_n^2 = \sum \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}$$

Se calcula la perturbación al estado fundamental

$$U \approx \int d^3 p \frac{|\langle 0 | V | \vec{p} \rangle|^2}{0 - \omega_p}$$

donde

$$\begin{aligned}
 V &= \int \mathcal{H}_1 d^3 r \\
 &= g \int d^3 r \sum_{i=1,2} \delta^3(\vec{r} - \vec{r}_i) \int d^3 p' \left(a_{p'} f_{p'}^+(\vec{r}) + a_{p'}^\dagger f_{p'}^-(\vec{r}) \right) \\
 &= \frac{g}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_i \int \frac{d^3 p'}{\sqrt{2\omega_{p'}}} \left(a_{p'} e^{-i(\vec{p}' \cdot \vec{r}_i - \omega_{p'} t)} + a_{p'}^\dagger e^{i(\vec{p}' \cdot \vec{r}_i - \omega_{p'} t)} \right)
 \end{aligned}$$

pero $\langle 0 | a_{p'}^\dagger | \vec{p} \rangle = 0$ y $\langle 0 | a_{p'} | \vec{p} \rangle = \delta^3(\vec{p} - \vec{p}')$ por lo tanto

$$\begin{aligned}
 \langle 0 | V | \vec{p} \rangle &= \frac{g}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sum_i \int \frac{d^3 p'}{\sqrt{2\omega_{p'}}} \delta^3(\vec{p} - \vec{p}') e^{-i(\vec{p}' \cdot \vec{r}_i - \omega_{p'} t)} \\
 &= \frac{g}{\sqrt{(2\pi)^3} 2\omega_p} \left(e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}_1} + e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}_2} \right) e^{-i\omega_p t} \quad (8.5.1)
 \end{aligned}$$

y entonces

$$|\langle 0 | V | \vec{p} \rangle|^2 = \frac{g^2}{(2\pi)^3 2\omega_p} \left(2 + e^{-i\vec{p} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} + e^{i\vec{p} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \right)$$

El 2 en el paréntesis da un término divergente pero constante por lo que se bota (no contribuye a la fuerza). Denotando $\vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ se obtiene

$$\begin{aligned}
 U &= -\frac{g^2}{2(2\pi)^2} \int \frac{d^3 p}{\omega_p^2} \left(e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} + e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \right) \\
 &= -\frac{g^2}{(2\pi)^3} \int d^3 p \frac{\cos \vec{p} \cdot \vec{r}}{p^2 + \mu^2} \quad (8.5.2)
 \end{aligned}$$

A continuación se trabaja la integral (la otra da el mismo resultado)

$$\begin{aligned}
 I &= \int \frac{d^3 p}{p^2 + \mu^2} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}} \\
 &= 2\pi \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{p^2 + \mu^2} \int_{-1}^1 du e^{-ipru} \\
 &= 2\pi \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{p^2 + \mu^2} \frac{e^{-ipr} - e^{ipr}}{-ipr} \\
 &= \frac{2\pi}{ir} \int_0^\infty \frac{p dp}{p^2 + \mu^2} (e^{ipr} - e^{-ipr})
 \end{aligned}$$

En la segunda de estas dos integrales se hace un cambio de variable $p \rightarrow -p$ obteniéndose para I

$$I = \frac{2\pi}{ir} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p dp e^{ipr}}{(p+i\mu)(p-i\mu)}$$

integral que puede hacerse por residuos integrando sobre el semiplano superior, lo que toma el residuo del polo $p = i\mu$, lo que da

$$\begin{aligned} I &= \frac{2\pi}{ir} (2\pi i) \frac{i\mu e^{-\mu r}}{2i\mu} \\ &= 2\pi^2 \frac{e^{-\mu r}}{r} \end{aligned}$$

De donde, finalmente se obtiene

$$U = -\frac{g^2}{4\pi} \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad (8.5.3)$$

que es el potencial de Yukawa. El potencial de Yukawa es el potencial entre dos nucleones debido a la presencia del campo de piones pero en ausencia de partículas-piones.

8.6. Relaciones de conmutación a tiempos distintos

A continuación se calculará las relaciones de conmutación

$$[\phi(\vec{r}, t), \phi(\vec{r}', t')]$$

y, entre otras cosas, se verá que el formalismo es covariante. Para calcular esta relación de conmutación se hace uso de (8.3.4),

$$\begin{aligned} [\phi(\vec{r}, t), \phi(\vec{r}', t')] &= \sum_{n,n'} \int d^3p d^3p' [a_p^n, a_{p'}^{n'}] f_p^n f_{p'}^{n'} \\ &= \sum_{n,n'} \int d^3p d^3p' n \delta_{n,-n'} \delta^3(\vec{p} - \vec{p}') f_p^n f_{p'}^{n'} \\ &= \int d^3p (f_p(x) f_p^*(x') - f_p^*(x) f_p(x')) \\ &= -i \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 \omega_p} \sin(p(x-x')) \\ &\equiv i\Delta(x-x'; \mu^2) \end{aligned} \quad (8.6.1)$$

En la última línea se ha definido una función Δ .

En las próximas líneas se demuestra que la siguiente función explícitamente invariante da $i\Delta$:

$$\int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{-ipx} \varepsilon(p_0) 2\pi \delta(p^2 - \mu^2)$$

donde $\varepsilon(p_0)$ es la función signo de p_0 . La delta de Dirac está garantizando que el cuadrado del cuadvectores de momento es el correcto. Este delta se puede escribir

$$\delta(p^2 - \mu^2) = \delta(p_0^2 - \omega_p^2) = \frac{\delta(p_0 - \omega_p) + \delta(p_0 + \omega_p)}{2\omega_p}$$

Al hacer uso de los δ la integral original se convierte en

$$\int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3 2\omega_p} e^{-i\omega_p t + i\vec{p}\cdot\vec{r}} - \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3 2\omega_p} e^{i\omega_p t + i\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

En la segunda integral se hace el cambio $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ lo que finalmente reduce la suma de ambas a

$$-i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3 \omega_p} \sin px$$

que es la forma como originalmente se definió $i\Delta(x; \mu^2)$.

Con esto se ha demostrado que el conmutador $[\phi(x), \phi(x')]$ en un invariante lo que hace muy satisfactorio el formalismo desde el punto de vista de su covariancia.

Si se tiene que $x^2 < 0$, existe un sistema de referencia en el cual $x_0 = 0$, es decir, donde los eventos x y x' son simultáneos. Pero ya se sabe, de (7.6.3) que los campos en tal caso conmutan, es decir, Δ con x_0 nulo se anula. Se desprende que los campos evaluados en eventos separados por una distancia tipo espacio conmutan, lo que se relaciona con causalidad.

8.7. Rompimiento espontáneo de la simetría: bosones de Goldstone

Para ilustrar la noción de rompimiento espontáneo de la simetría y bosón de Goldstone se usará una densidad lagrangeana con un ϕ de

dos componentes reales,

$$\vec{\phi} = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$$

y se comienza con

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} \left(\vec{\phi}_{,v} \cdot \vec{\phi}^{,v} + \mu^2 \vec{\phi} \cdot \vec{\phi} - h (\vec{\phi} \cdot \vec{\phi})^2 \right) \quad (8.7.1)$$

que tiene su mínimo de potencial para $\|\phi\| = \sqrt{\frac{\mu^2}{2h}}$. Se hace el cambio de variables siguiente

$$\vec{\phi} = e^{i\theta\sigma_2} \begin{pmatrix} 0 \\ \rho \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \sin \theta \\ \rho \cos \theta \end{pmatrix} \quad (8.7.2)$$

Así se ha pasado de las variables ϕ_i a las variables (ρ, θ) . Con estas variables la densidad lagrangeana original resulta ser

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0 &= \frac{1}{2} (\rho_{,v} \rho^{,v} + \rho^2 \theta_{,v} \theta^{,v} + \mu^2 \rho^2 - h \rho^4) \\ &= \frac{1}{2} (\rho_{,v} \rho^{,v} + \mu^2 \rho^2) + \frac{1}{2} (\rho^2 \theta_{,v} \theta^{,v} - h \rho^4) \end{aligned}$$

La ecuación de campo para ρ es

$$\partial_v \partial^v \rho - \mu^2 \rho^2 + 2h \rho^3 = 0$$

que admite la solución constante $\rho_0 = \sqrt{\frac{\mu^2}{2h}} \equiv \eta$. Esto sugiere hacer el cambio de variable

$$\rho = \eta + R, \quad \theta = \frac{1}{\eta} T \quad (8.7.3)$$

de donde

$$\rho^2 = \eta^2 + 2\eta R + R^2, \quad \rho_{,v} = R_{,v}$$

con lo cual

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} \left(R_{,v} R^{,v} - (\sqrt{2}\mu)^2 R^2 + T_{,v} T^{,v} + \dots \right)$$

donde los términos no escritos son cúbicos o de más alto orden, es decir, representan interacciones. El resultado obtenido es que el campo R

tiene asociada una masa $m_R = \sqrt{2}\mu$ mientras que el campo T no tiene masa. Este último, por no tener masa, se denomina *bosón de Goldstone*. El campo R representa las oscilaciones radiales y T las oscilaciones tangenciales, ambas en el mínimo degenerado del fondo degenerado del potencial original.

En la sección que sigue se verá que si se agrega un campo asociado a la invariancia de gauge del sistema (acoplamiento minimal) existen nuevas variables de campo tales que desaparece el bosón de Goldstone y aparece un término de masa para el campo de gauge. Esto es lo que se conoce como mecanismo de Higgs-Kibble.

8.8. Mecanismo de Higgs-Kibble

Se define una nueva densidad lagrangeana \mathcal{L} a partir de aquella definida en (8.7.1) introduciendo el acoplamiento minimal

$$\partial_\nu \vec{\phi} \rightarrow \left(\partial_\nu - \frac{ie}{c} \mathbf{A}_\nu \right) \vec{\phi}$$

donde

$$\mathbf{A}_\nu \equiv \sigma_2 A_\nu$$

obteniéndose

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2} \left(\left(\partial_\nu - \frac{ie}{c} \mathbf{A}_\nu \right) \vec{\phi} \cdot \left(\partial^\nu - \frac{ie}{c} \mathbf{A}^\nu \right) \vec{\phi} \right) \\ & + \frac{1}{2} \left(\mu^2 \vec{\phi} \cdot \vec{\phi} - h \left(\vec{\phi} \cdot \vec{\phi} \right)^2 \right) \\ & - \frac{1}{4} F_{\nu\lambda} F^{\nu\lambda} \end{aligned} \quad (8.8.1)$$

Si se define

$$U = e^{i\Lambda\sigma_2}$$

donde $\Lambda = \Lambda(x)$ se puede verificar que \mathcal{L} es invariante a la transformación simultánea

$$\begin{aligned} \vec{\phi} & \rightarrow U \vec{\phi} \\ \mathbf{A}_\nu & \rightarrow \mathbf{A}_\nu + \frac{c\sigma_2}{e} \Lambda_{,\nu} \end{aligned} \quad (8.8.2)$$

Para demostrar esta invariancia es útil notar que

$$U^{-1}\partial_\nu U = i\Lambda_{,\nu}\sigma_2$$

A continuación se muestra cómo transforma la derivada de gauge:

$$\left(\partial_\nu - \frac{ie}{c}\mathbf{A}_\nu\right)\vec{\phi} \rightarrow \left(\partial_\nu - \frac{ie}{c}\mathbf{A}_\nu - i\sigma_2\Lambda_{,\nu}\right)U\vec{\phi}$$

La primera contribución a la derecha es

$$\begin{aligned}\partial_\nu U\vec{\phi} &= (\partial_\nu U)\vec{\phi} + U\partial_\nu\vec{\phi} \\ &= U(i\sigma_2\Lambda_{,\nu})\vec{\phi} + U\partial_\nu\vec{\phi} \\ &= U(\partial_\nu + i\sigma_2\Lambda_{,\nu})\vec{\phi}\end{aligned}$$

de donde resulta ahora directo, ver que

$$\left(\partial_\nu - \frac{ie}{c}\mathbf{A}_\nu\right)\vec{\phi} \rightarrow U\left(\partial_\nu - \frac{ie}{c}\mathbf{A}_\nu\right)\vec{\phi}$$

En otras palabras, la derivada de gauge de $\vec{\phi}$ transforma igual que $\vec{\phi}$ mismo. El resto es trivial.

Existe un cambio de gauge (una transformación U) que hace que el campo $\vec{\phi}$ escrito en su forma (8.7.2) sea puramente real. En efecto, escogiendo $\Lambda = -\theta$

$$U = e^{-i\theta\sigma_2}$$

se obtiene

$$\vec{\phi} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ \rho \end{pmatrix}$$

Esta transformación implica

$$A_\nu \rightarrow B_\nu = A_\nu - \frac{c}{e}\theta_{,\nu}$$

Si, junto con hacer este cambio de gauge se hace el cambio (8.7.3) se obtiene un expresión para la densidad lagrangeana donde el campo de Goldstone θ (o T) ha desaparecido y, en cambio aparece un término de masa para B_ν . Se puede además ver que no aparecen términos lineales

en los campos. Los términos cinéticos de la densidad lagrangeana final son

$$-\frac{1}{4}F_{\nu\lambda}F^{\nu\lambda} - \frac{e^2\mu^2}{16h}B_\nu B^\nu + \frac{1}{2}\left(R_{,\nu}R^{,\nu} - \left(\sqrt{2}\mu\right)^2 R^2\right)$$

el resto son términos cúbicos o de más alto orden.

La densidad \mathcal{L} inicial formalmente tenía dos grados de libertad debido a $\vec{\phi}$ y dos debido al campo de gauge (sin masa) A_ν . El sistema final tiene un grado de libertad en R y tres debido al campo vectorial masivo B_ν .

8.9. Hacia el modelo de Weinberg y Salam

Este modelo tiene muchos más ingredientes que los anteriores. No solo incluye partículas escalares, sino también espinoriales y se introduce un acoplamiento minimal asociado a la simetría de gauge que la densidad \mathcal{L}_0 tiene.

Se define los espinores dobles con

$$L = \frac{1 - \gamma_5}{2} \begin{pmatrix} \psi_{\nu_e} \\ \psi_e \end{pmatrix}, \quad R = \frac{1 + \gamma_5}{2} e$$

además se define el campo escalar complejo

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_+ \\ \phi_0 \end{pmatrix}$$

Con ellos se define una densidad lagrangeana

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0 = & i\bar{R}\gamma^\nu \partial_\nu R + i\bar{L}\gamma^\nu \partial_\nu L - G_e \left\{ \bar{L}\phi R + \bar{R}\phi^\dagger L \right\} \\ & + \phi_{,\nu} \phi^{,\nu} - M_1^2 \phi^\dagger \phi - h \left(\phi^\dagger \phi \right)^2 \end{aligned}$$

Se destaca que en este modelo $M_1^2 < 0$ y $h > 0$ lo que garantiza que hay un boson de Goldstone que desaparece cuando se hace el acoplamiento minimal que completa al modelo.

En \mathcal{L}_0 debe entenderse que

$$\begin{aligned} \phi^\dagger L &= \frac{1 - \gamma_5}{2} \left(\phi_+^\dagger, \phi_0^\dagger \right) \begin{pmatrix} \psi_{\nu_e} \\ \psi_e \end{pmatrix} \\ &= \frac{1 - \gamma_5}{2} \left(\phi_+^\dagger \psi_{\nu_e} + \phi_0^\dagger \psi_e \right) \end{aligned}$$

Se puede demostrar que esta densidad lagrangeana es invariante bajo las transformaciones del grupo $U(2)$ de cuatro parámetros:

$$\begin{aligned} L &\rightarrow e^{i(\alpha + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma})/2} L \\ R &\rightarrow e^{i\alpha} R \\ \phi &\rightarrow e^{i(-\alpha + \vec{\alpha} \cdot \vec{\sigma})/2} \phi \end{aligned}$$

Arriba $\vec{\sigma}$ se refiere a las matrices de Pauli.

Para definir el modelo W-S se debe introducir el acoplamiento minimal con cuatro campos de gauge. Las derivadas de gauge (acoplamiento minimal) consiste en

$$\begin{aligned} i\partial_\nu R &\rightarrow \nabla_\nu R \equiv (i\partial_\nu - g' B_\nu) R \\ i\partial_\nu L &\rightarrow \nabla_\nu L \equiv \left(i\partial_\nu - \frac{g'}{2} B_\nu - \frac{g}{2} \mathbf{A}_\nu \right) L \\ i\partial_\nu \phi &\rightarrow \nabla_\nu \phi \equiv \left(i\partial_\nu - \frac{ig'}{2} B_\nu + \frac{ig}{2} \mathbf{A}_\nu \right) \phi \end{aligned} \quad (8.9.1)$$

donde $\mathbf{A}_\nu = \sum_i A_{i\nu} \sigma_i = \vec{A}_\nu \cdot \vec{\sigma}$. Es fácil verificar que las derivadas de gauge ∇ transforman de igual forma que el campo al cual afectan.

Al hacer el reemplazo de las derivadas ∂_ν por las derivadas ∇_ν se obtiene la densidad lagrangeana \mathcal{L} que, luego de hacer uso del mecanismo de Higgs-Kibble se convierte en la densidad lagrangeana de Weinberg y Salam.

De los cuatro campos de gauge tres adquieren términos de masa:

$$\begin{aligned} W_\nu &= \frac{1}{\sqrt{2}}(A_{1\nu} + iA_{2\nu}) \quad \text{complejo: cuenta por dos} \\ Z_\nu &= \frac{1}{\sqrt{g^2 + g'^2}}(gA_{3\nu} + \frac{g'}{2}B_\nu) \end{aligned} \quad (8.9.2)$$

mientras que

$$A_\nu = \frac{1}{\sqrt{g^2 + g'^2}}(gA_{3\nu} - \frac{g'}{2}B_\nu)$$

queda sin masa y es identificado con el campo electromagnético.

Los W y Z son conocidos como los bosones intermediarios de las interacciones electrodébiles. Los términos de masa asociados a los bosones intermediarios se expresan en término de constantes conocidas lo que hizo fácil saber donde buscarlas. Fueron observadas en 1983 en CERN

precisamente con la masa que el modelo W-S afirma (80,4 y 91,2 [GeV]), esto es, son casi cien veces más pesadas que el protón.