



$$\bullet |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

### Teoría Formal de Suma de Momentos Angulares

Sea de sumar dos momentos  $J_1, J_2$

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{1k}$$

$$[J_{2i}, J_{2j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{2k}$$

$$[J_{1k}, J_{2l}] = 0$$

Relaciones  
de  
conmutación

$$\vec{J} = \vec{J}_1 \otimes \mathbb{1}_2 + \mathbb{1}_1 \otimes \vec{J}_2 \equiv \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

El momento total  $\vec{J}$  cumple que:

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 \cdot J_2$$

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_{1z} J_{2z} + J_{1+} J_{2-} + J_{1-} J_{2+}$$

Vemos que  $[J_1^2, J^2] = 0$ ;  $[J_2^2, J^2] = 0$ ;  $[J_{1z}, J_{2z}] = 0$

$$\text{pero } [J^2, J_{1\pm}] \neq 0$$

Esto deja dos opciones para elegir un CCOC:

$J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}$ $ j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ base desacoplada	$J_1^2, J_2^2, J^2, J_z$ $ j_1, j_2; j, m\rangle$ base acoplada
------------------------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------

Se puede pasar de una base a otra con una  $\mathbb{I}$  apropiada:

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \underbrace{\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; j, m\rangle}_{= C_{m_1, m_2}^j}$$

$$1. |j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1, m_2}^j |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

$$\begin{aligned} -j_1 &\leq m_1 \leq j_1 \\ -j_2 &\leq m_2 \leq j_2 \end{aligned}$$

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \sum_{j, m} |j_1, j_2; j, m\rangle \underbrace{\langle j_1, j_2; j, m | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle}_{= C_{m_1, m_2}^{j*}}$$

$$2. |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \sum_{j, m} C_{m_1, m_2}^{j*} |j_1, j_2; j, m\rangle$$

$$\begin{aligned} -j &\leq m \leq j \\ \text{con } j &\neq \infty \end{aligned}$$

Desde los  $C_{m_1, m_2}^j$  son los coeficientes de Clebsch-Gordan. En 2 la  $\Sigma$  sería en  $j \rightarrow \infty$ , pero veamos la relación que hace algunos  $C_{m_1, m_2}^j = 0$ . Ante todo, abreviaremos suprimiendo los índices  $j_1, j_2$ , con lo cual:

$$C_{m_1, m_2}^j = \langle m_1, m_2 | j, m \rangle$$

• Restricciones para la no nulidad de los coeficientes

$$(\mathcal{J}_z - \mathcal{J}_{1z} - \mathcal{J}_{2z}) |j, m\rangle = (\hbar m - \hbar m_1 - \hbar m_2) |j, m\rangle = 0 \rightarrow$$

$$\langle m_1, m_2 | \mathcal{J}_z - \mathcal{J}_{1z} - \mathcal{J}_{2z} |j, m\rangle = 0$$

$$\hbar(m - m_1 - m_2) \langle m_1, m_2 | j, m \rangle = 0 \Rightarrow$$

$$\langle m_1, m_2 | j, m \rangle \neq 0 \Leftrightarrow m = m_1 + m_2$$

A su vez, en la suma de  $\mathcal{J}_1$  y  $\mathcal{J}_2$  resultan los  $j$  acotados por una desigualdad triangular

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

Asimismo los  $C_{m_1, m_2}^j$  se toman reales  $\rightarrow C_{m_1, m_2}^{j*} = C_{m_1, m_2}^j$ . Juntando todo se tiene

$$\begin{array}{l} \langle m_1, m_2 | j, m \rangle \neq 0 \Leftrightarrow m = m_1 + m_2 \\ \langle j, m | m_1, m_2 \rangle \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \end{array}$$

Ambas bases tienen la misma dimensión:

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

Recordemos que cada  $j$  tiene  $2j+1$  estados posibles (los  $m$  correspondientes a cada  $j$ )  
Si sumamos  $j_1=1$ ,  $j_2=3/2$  tendremos:

$$\dim = 2 \oplus 4 \oplus 6 = 3 \oplus 4 = 12$$

$$j = 1/2, 3/2, 5/2$$

$$m_1 = -1, 0, 1$$

$$m = -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2$$

$$m_2 = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$$

Podemos ver a ojo que:

$$|j=5/2, m=5/2\rangle = |m_1=1, m_2=3/2\rangle$$

$$|j=5/2, m=-5/2\rangle = |m_1=-1, m_2=-3/2\rangle$$

Luego con el  $\mathcal{J}_+$ ,  $\mathcal{J}_-$  podemos construirnos los siguientes (utilizando ortogonalidad)

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm}$$

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j', m' | m_1, m_2 \rangle \langle m_1, m_2 | j, m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm}$$

$$\sum_{m_1, m_2} \langle m_1, m_2 | j, m \rangle^2 = 1 \quad \text{ortogonalidad}$$

• Relación de Recurrencia

$$\mathcal{J}_{\pm} |j, m\rangle = (\mathcal{J}_{1\pm} + \mathcal{J}_{2\pm}) \sum_{m_1, m_2} |m_1, m_2\rangle \langle m_1, m_2 | j, m \rangle$$

$$\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle m_1, m_2 | j, m \rangle (\mathcal{J}_{1\pm} |m_1, m_2\rangle + \mathcal{J}_{2\pm} |m_1, m_2\rangle)$$

metiendo un bra  $\langle m_1, m_2 |$  se llega a la relación de recurrencia:

$$\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle m_1, m_2 | j, m \pm 1 \rangle = \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle m_1 \mp 1, m_2 | j, m \rangle + \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle m_1, m_2 \mp 1 | j, m \rangle$$

• Suma de  $\vec{L}$  y  $\vec{S}$

Sea sumar  $\vec{L} + \vec{S} \rightarrow j_1 = l \quad j_2 = s = 1/2 \rightarrow |l - 1/2| \leq j \leq l + 1/2$   $j = \begin{cases} l - 1/2 \\ l + 1/2 \end{cases}$  2 valores  
 $m_1 = m_l \quad m_2 = m_s = \pm 1/2 \quad m = m_l \pm 1/2$

$dim = (2l+1) \otimes 2 = 4l+2$

$m_l = m + 1/2, m - 1/2$   
 $m_s = 1/2, -1/2$

Habrán solo cuatro  $C_{m_1, m_2}^j \neq 0$  que serán:

- $\langle m + 1/2, -1/2 | l - 1/2, m \rangle$
- $\langle m + 1/2, -1/2 | l + 1/2, m \rangle$
- $\langle m - 1/2, +1/2 | l - 1/2, m \rangle$
- $\langle m - 1/2, +1/2 | l + 1/2, m \rangle$

los coeficientes linken solo los estados con  $j = l - 1/2, j = l + 1/2$   
 Podemos construir una matriz de  $2 \times 2$  para este caso

Esto tórnase práctico para acoplamiento spin-órbita.

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

$\vec{L} \cdot \vec{S} |l, s, j, m\rangle = \frac{1}{2} (j(j+1)\hbar^2 - l(l+1)\hbar^2 - s(s+1/2)\hbar^2) |l, s, j, m\rangle$   
 $= \frac{1}{2} (j(j+1) - l(l+1) - 3/4) \hbar^2 |l, s, j, m\rangle$

$\vec{L} \cdot \vec{S} |l, s, j, m\rangle = \begin{cases} \frac{l\hbar^2}{2} |l, s, j, m\rangle & \text{si } j = l + 1/2 \\ -\frac{(l+1)\hbar^2}{2} |l, s, j, m\rangle & \text{si } j = l - 1/2 \end{cases}$

■ Operadores Vectoriales

Queremos analizar como transforma un operador vectorial  $\hat{v}$  bajo rotaciones en QM.  
 En mecánica clásica:

$V_i = R_{ij} V_j$

con R matriz ortogonal

En QM tenemos que al rotar

$|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}(R) |\alpha\rangle$

Pediremos que  $\langle V \rangle_\alpha$  transforme como un vector; entonces será:

$\langle \alpha | V_i | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | \mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) | \alpha \rangle = R_{ij} \langle \alpha | V_j | \alpha \rangle$

$\mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) = R_{ij} V_j \quad \text{①}$

Calculando la expresión anterior <sup>①</sup> llegamos que debe valer:

$$\boxed{[V_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} V_k} \quad \leftarrow \text{Un operador vectorial } \vec{V} \text{ transforma de esta manera}$$

(Podemos probar un caso simple de una rot. infinitesimal en  $\hat{z}$  y ver que vale)

### Operadores Tensoriales

En mecánica clásica:

$$\boxed{T_{ij} = R_{i'j'} R_{j''i''} T_{i'j''}} \quad \leftarrow \text{tensor de 2º rango (dos índices)}$$

Esto es un tensor cartesiano. Su problema es que no es IRREDUCIBLE, entonces puede descomponerse en objetos que transforman diferente ante rotaciones. Sea la díada

$U_i V_j$ , tensor de rango dos, que puede escribirse como:

$$U_i V_j = \underbrace{\frac{\vec{U} \cdot \vec{V}}{3} \delta_{ij}}_{\substack{\text{escalar} \\ \text{no transforma}}} + \underbrace{\frac{1}{2} (U_i V_j - U_j V_i)}_{\substack{\text{tensor antisimétrica} \\ \text{transforma como } \vec{U} \times \vec{V}}} + \underbrace{\left[ \frac{1}{2} (U_i V_j + U_j V_i) - \frac{\vec{U} \cdot \vec{V}}{3} \delta_{ij} \right]}_{\text{tensor simétrico con traza nula}}$$

Hemos reducido el tensor cartesiano en tensores irreducibles. Podemos asociar esta descomposición con las multiplicidades de objetos con momento angular  $l=0, l=1, l=2$

escalar	=	$l=0$	singlete	(1 elem. indep.)
vector	=	$l=1$	triplete	(3 " " )
tensor de traza nula	=	$l=2$	quintuplete	(5 " " )

Se define:

$$\boxed{T_{q}^{(k)}} \quad \text{tensor esférico de rango } k \text{ y } \# \text{ magnéticos } q$$

Un tensor esférico transforma como:

$$\boxed{\mathcal{D}(\mathcal{R}) T_{q}^{(k)} \mathcal{D}^{\dagger}(\mathcal{R}) = \mathcal{D}_{qq'}^{(k)} T_{q'}^{(k)}} \quad \textcircled{2}$$

Tendremos:

$$T_0^{(0)} \quad (\text{escalar}) \quad \text{tensor esférico de rango 0 } (l=0)$$

$$(T_{+1}^{(1)}, T_0^{(1)}, T_{-1}^{(1)}) \quad (\text{vector}) \quad \text{tensor esférico de rango 1 } (l=1)$$

En muchos casos se puede escribir un tensor esférico como armónica esférica:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = Y_l^m(\hat{n}) \Rightarrow \text{pase } \hat{n} \rightarrow \vec{v} \quad Y_l^m(\vec{v}) = \boxed{Y_{lq}^m(\vec{v}) \rightarrow T_{q}^{(k)}}$$

$$\hat{n} = (n_x, n_y, n_z) = \left( \frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r} \right) \rightarrow \vec{v} = (r \cdot n_x, r \cdot n_y, r \cdot n_z)$$

$$\hat{n} = (\cos \varphi \cdot \sin \theta, \sin \varphi \cdot \sin \theta, \cos \theta)$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} n_z \rightarrow T_0^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} V_z$$

$$Y_{\pm 1}^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{n_x \pm i n_y}{\sqrt{2}} \rightarrow T_{\pm 1}^{(1)} = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x \pm i V_y)$$

Calculando en ②, cosa que podemos hacer para -por ej.- una rotación infinitesimal, llegamos a las relaciones de conmutación para tensores.

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)}$$

$$[J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}$$

### Teorema de Wigner-Eckart

Es importante para el cálculo de transiciones evaluar elementos de matriz de operadores tensoriales.

Los elementos matriciales de operadores tensoriales respecto de autoestados de momento satisfacen:

$$\langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = \underbrace{\langle j, k; m, q | j, k; j', m' \rangle}_{\downarrow} \cdot \frac{\langle \alpha', j' || T^{(k)} || \alpha, j \rangle}{(2j+1)}$$

un coeficiente que no depende de  $q, m, m'$

↑ coeficiente de Clebsh-Gordan de sumar momentos  $j, k$  con  $\begin{cases} m_1 = m \\ m_2 = q \\ m_1 + m_2 = m' \end{cases}$

#### regla de selección

$$\langle \alpha', j', m' | [J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = \langle | J_z T_q^{(k)} - T_q^{(k)} J_z - \hbar q T_q^{(k)} | \rangle$$

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

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

$$\text{si } m' \neq m + q \rightarrow \langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = 0$$

#### idea demostración del teorema

$$\langle \alpha', j', m' | [J_{\pm}, T_q^{(k)}] | \alpha, j, m \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j, m \rangle \Rightarrow$$

$$\sqrt{(j \pm m')(j \mp m' + 1)} \langle \alpha', j', m' \pm 1 | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \rangle - \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_{q \mp 1}^{(k)} | \alpha, j, m \pm 1 \rangle$$

$$= \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j, m \rangle$$

Es la misma relación de recurrencia que la de los coeficientes de Clebsh-Gordan; si reemplazamos

$$m' = m, \quad j = j_1, \quad m = m_1$$

$$j' = j, \quad k = j_2, \quad q = m_2$$

Como ambas relaciones son lineales, sus resultados serán proporcionales. Se puede asociar:

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 \pm 1 | j_1, j_2; j, m \rangle \propto \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j, m \rangle$$

$$\langle j, k; m, q \pm 1 | j, k; j', m' \rangle \propto \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j, m \rangle$$

Logramos la igualdad metiendo una constante independiente de  $m, q, m'$ .

#### Reglas de Selección

Como se tiene a  $\langle T_q^{(k)} \rangle \propto$  coeficientes de Clebsh-Gordan, serán válidas las mismas reglas de selección.

$$m' = m + q$$

$$|j - k| \leq j' \leq j + k$$

## Ejemplos de Elementos Matriciales de Tensores

Sea un escalar (tensor de rango cero):

$$\langle \alpha' j' m' | T_0^{(0)} | \alpha j m \rangle \propto \langle j 0, m 0 | j 0, j' m' \rangle = \delta_{j' j} \delta_{m' m}$$

$q=0$   
 $k=0$

$m+q=m' \rightarrow m=m'$   
 $|j-0| \leq j' \leq j+0 \rightarrow j=j'$

No varían  $j, m$  en los estados  
No conecta estados con  $j, m$  diferentes un escalar

Sea un vector (tensor de rango uno):

$$\langle \alpha' j' m' | T_1^{(1)} | \alpha j m \rangle \propto \langle j 1, m' | j 1, j' m' \rangle$$

$q=1, 0, -1$   
 $k=1$

$m + \begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix} = m' \rightarrow m - m' = \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$   
 $|j-1| \leq j' \leq j+1$   
 $-1 \leq j' - j \leq 1 \rightarrow j - j' = \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$

Conecta estados que están separados por un "j" y un "m"

## Teorema de Proyección

Consideremos lo que sucede en el teorema de Wigner-Eckart si  $j=j'$  y se lo aplicamos a un operador vectorial  $T_1^{(k=1)} = V_q$

$$\langle \alpha' j m' | V_q | \alpha j m \rangle = \frac{\langle \alpha' j m | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha j m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j m' | J_q | j m \rangle$$

Como caso especial, si  $\alpha' = \alpha$  [estoy en un subespacio donde coinciden los # cuánticos] se tiene:

$$\vec{V} = \frac{\langle \vec{J} \cdot \vec{V} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \vec{J}$$

## Aplicación del Teorema de Proyección

Sea un  $H_0$  esféricamente simétrico  $[H_0, \vec{J}] = 0$ ,  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{r}$$

$$|E, l, s, j, m\rangle$$

$\begin{matrix} \hbar & \hbar & \hbar & \hbar & \hbar \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ H & L^2 & S^2 & (L+S)^2 & L_z + S_z \\ & & & j^2 & j_z \end{matrix}$

$2j+1$  degenerados

CCOC:  $H, L^2, S^2, J^2, J_z$

si le meto un campo  $B$  en  $\hat{z}$  tendré:

$$H = H_0 + H_1 = H_0 - \frac{\mu_B B}{\hbar} (L_z + 2S_z)$$

Esto debería romper la degeneración

$$L_z + 2S_z = \frac{\langle \vec{J} \cdot \vec{L} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} J_z + 2 \frac{\langle \vec{J} \cdot \vec{S} \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} J_z$$

Pero no puedo poner este nuevo operador que mete el campo  $B$  en el CCOC directamente  $\Rightarrow$  uso teorema de proyección.

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

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

Entonces tengo todo expresado en función de  $J_z$  que sí forma parte de mi CCOC

### ■ Simetrías en Mecánica Cuántica

En mecánica clásica tenemos el teorema de Noether:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{d}{dt} (p_i) = 0 \quad \Rightarrow \quad p_i = \text{constante}$$

$H, \mathcal{L}$  no cambian con la transformación  $q_i \rightarrow q_i + \delta q_i$

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{d}{dt} (p_i) = 0 \quad \Rightarrow \quad p_i = \text{constante}$$

En mecánica cuántica definiremos un operador unitario  $\mathcal{S}$  asociado a traslación/rotación. Pensemos en una transformación infinitesimal dada por  $\mathcal{S}$

$$\mathcal{S} = \mathbb{1} - \frac{i \epsilon}{\hbar} G, \quad G = \text{generador hermitico (de la transf.)}$$

Sea el  $H$  invariante frente a  $\mathcal{S} \Rightarrow$

$$\mathcal{S}^\dagger H \mathcal{S} = H \quad \Rightarrow \quad [H, \mathcal{S}] = 0 \Rightarrow [H, G] = 0 \Rightarrow \frac{dG}{dt} = 0 \Rightarrow G \text{ es constante de movimiento}$$

Esto significa que el autovalor no varía con el tiempo. Como  $[H, G] = 0$  se tiene

- si no hay degeneración:  $G|n\rangle = k|n\rangle$  pes  $H(G|n\rangle) = E_n(G|n\rangle)$
- invariancia frente a traslaciones  $G = \vec{p}$
- invariancia frente a rotaciones  $G = \vec{J}$

### ■ Simetría de Paridad

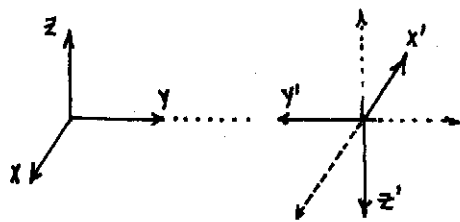
Transforma RHS en LHS. Es decir que hace:

$$\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$$

Solicitaremos un operador unitario llamado paridad que verifique:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \pi |\alpha\rangle = |\alpha\rangle$$

$$\begin{aligned} \pi &\text{ es unitario y} \\ \pi^2 &= \mathbb{1} \Rightarrow \\ \pi &\text{ es hermitico} \end{aligned}$$



Querremos que refleje el  $\langle \hat{x} \rangle$

$$\langle \alpha' | \hat{x} | \alpha \rangle = - \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle$$

$$\langle \alpha | \pi^\dagger \hat{x} \pi | \alpha \rangle = - \langle \alpha | \hat{x} | \alpha \rangle \Rightarrow$$

$$\pi^\dagger \hat{x} \pi = -\hat{x} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\{\hat{x}, \pi\} = 0}$$

Anticonmuta con  $\hat{x}$

Debido a ello:

$$\pi |\hat{x}'\rangle = |-\hat{x}'\rangle$$

$$\pi^2 \equiv \mathbb{1}$$

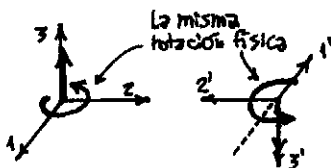
autovalores  $\pm 1$   
 $\pi$  unitario y hermitico

Como  $\hat{\pi}$  no depende del tiempo

$$\pi^\dagger \vec{p} \pi = \pi^\dagger \frac{d\hat{x}}{dt} \pi = \frac{d}{dt} (\pi^\dagger \hat{x} \pi) = \frac{d}{dt} (-\hat{x}) \Rightarrow \boxed{\{\vec{p}, \pi\} = 0}$$

Anticonmuta con  $\vec{p}$

$\hat{x}, \vec{p}$  son operadores impares. En cambio  $\vec{L} = \hat{x} \wedge \vec{p}$  es un operador par  $\Rightarrow$



$$\begin{aligned} 1 \times 2 = 3 \\ 1 \times 3 = 2 \\ \hat{x} \wedge \vec{p} = \vec{L} \end{aligned} \quad \begin{aligned} \downarrow \\ 3 \\ \text{por RHS} \rightarrow \text{LHS} \end{aligned}$$

$$\boxed{[\vec{L}, \pi] = 0}$$

∴

$$\boxed{[\vec{J}, \pi] = 0}$$



Que conmuta con  $\hat{J}$  puede verse de pedirte que:

$$[\pi, \hat{Q}(R)] = 0 \Rightarrow [\pi, \hat{J}] = 0$$

cosa que vale en mecánica clásica  $\rightarrow R(\text{paridad}) R(\text{rotación}) = R(\text{rotación}) R(\text{paridad})$

$\pi^+ \vec{O} \pi = \begin{cases} +\vec{O} & \text{par} \\ -\vec{O} & \text{impar} \end{cases}$	par (pseudovector) vector axial
$\pi^+ \square \pi = \begin{cases} +\square & \text{par} \\ -\square & \text{impar} \end{cases}$	escalar pseudoescalar

$$\begin{aligned} \pi^+ \vec{s} \cdot \vec{x} \pi &= \pi^+ \vec{s} \cdot \pi \cdot \pi^+ \vec{x} \pi \\ \pi^+ \vec{s} \cdot \vec{x} \pi &= \vec{s} \cdot (-\vec{x}) = -\vec{s} \cdot \vec{x} \end{aligned}$$

$\vec{s} \cdot \vec{x}$  pseudoescalar

### • función de onda bajo paridad

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

$$\Psi_\alpha(x') = \langle x' | \pi | \alpha \rangle = \langle x' | \alpha' \rangle = \langle -x' | \alpha \rangle \Rightarrow$$

$$\Psi_{\alpha'}(x') = \Psi_\alpha(-x')$$

$$\Psi_\alpha(x') \xrightarrow{\pi} \Psi_\alpha(-x')$$

función de onda de un estado al que se le aplicó paridad

Sea  $|\alpha\rangle$  autoestado de paridad  $\rightarrow \pi |\alpha\rangle = \pm |\alpha\rangle$  (los autovalores serán  $\pm 1$ )

$$\langle x' | \alpha' \rangle = \pm \langle x' | \alpha \rangle = \langle -x' | \alpha \rangle$$

$$\Psi_\alpha(-x') = \begin{cases} + \Psi_\alpha(x') & \text{función de onda par} \\ - \Psi_\alpha(x') & \text{función de onda impar} \end{cases}$$

$$\vec{x} \rightarrow -\vec{x} \Rightarrow \begin{aligned} r &\rightarrow r \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta \\ \phi &\rightarrow \phi + \pi \end{aligned}$$

No toda función de onda tiene paridad bien definida

$$\langle x' | \alpha, l, m \rangle = R_\alpha(r) \cdot Y_l^m(\theta, \phi) \Rightarrow \text{con } \vec{x} \rightarrow -\vec{x} \text{ será}$$

$$Y_l^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$\pi |\alpha, l, m\rangle = (-1)^l |\alpha, l, m\rangle$$

Como  $[\hat{L}, \hat{\pi}] = 0$  un autoestado de  $\hat{L}$  es autoestado de  $\pi$

### • Teorema

Sea  $[H, \pi] = 0$  y  $|n\rangle$  autoestados no degenerados de  $H$   
 $\Rightarrow |n\rangle$  es autoestado de  $\pi$

• demostración

$$\left(\frac{1 \pm \pi}{2}\right) |n\rangle = \left(\frac{\pi \pm \pi}{2}\right) |n\rangle = \pi \cdot \left(\frac{\pm 1 \pm \pi}{2}\right) |n\rangle = \pm \pi \left(\frac{1 \pm \pi}{2}\right) |n\rangle \rightarrow \text{es autoestado de paridad con autovalor } \pm 1$$

$$H \left(\frac{1 \pm \pi}{2}\right) |n\rangle = \frac{1}{2} E_n |n\rangle \pm \frac{E_n}{2} \pi |n\rangle = E_n \left[\left(\frac{1 \pm \pi}{2}\right) |n\rangle\right] \rightarrow \text{es autoestado de } H$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1 \pm \pi}{2}\right) |n\rangle = |n\rangle \Rightarrow |n\rangle \text{ es autoestado de paridad}$$

$$\frac{1}{2} |n\rangle \pm \frac{\pi}{2} |n\rangle = |n\rangle$$

$$\pm \frac{\pi}{2} |n\rangle = \pm \frac{1}{2} |n\rangle \Rightarrow \pi |n\rangle = \pm |n\rangle$$

### • caso donde falla el teorema

$[H, \pi] = 0$  con  $H = \frac{p^2}{2m}$  pero  $|p'\rangle$  no es autoestado de  $\pi$  por la degeneración  $|p'\rangle, |-p'\rangle$  son ambos correspondientes al autovalor  $\frac{p'^2}{2m}$ .

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} |p'\rangle = \frac{p'^2}{2m} |p'\rangle$$

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} |-p'\rangle = \frac{p'^2}{2m} |-p'\rangle$$

$\pi |p'\rangle = |-p'\rangle$ ;  $|p'\rangle$  No es autoestado de  $\pi$

### ■ Reglas de Selección de Paridad II

Sean  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$  autoestados de paridad

$$\pi|\alpha\rangle = \epsilon_\alpha |\alpha\rangle, \quad \pi|\beta\rangle = \epsilon_\beta |\beta\rangle \quad \Rightarrow$$

$$\langle \beta | \vec{O} | \alpha \rangle = \begin{cases} \text{impar} \\ \text{par} \end{cases} \begin{aligned} & \langle \beta | \pi^\dagger \vec{O} \pi | \alpha \rangle = -\epsilon_\alpha \epsilon_\beta \langle \beta | \vec{O} | \alpha \rangle \\ & + \langle \beta | \pi^\dagger \vec{O} \pi | \alpha \rangle = +\epsilon_\alpha \epsilon_\beta \langle \beta | \vec{O} | \alpha \rangle \end{aligned}$$

Si el operador  $\vec{O}$  es impar (como  $\hat{x}, \hat{p}$ )  $\Rightarrow \epsilon_\alpha = 1, \epsilon_\beta = -1$  ó bien  $\epsilon_\alpha = -1, \epsilon_\beta = 1$

- Operadores impares solo conectan estados de paridad opuesta

Si el operador  $\vec{O}$  es par (como  $\hat{L}, \hat{S}$ )  $\Rightarrow \epsilon_\alpha = 1, \epsilon_\beta = 1$  ó  $\epsilon_\alpha = -1, \epsilon_\beta = -1$

- Operadores pares solo conectan estados de la misma paridad

$$\langle \beta | \hat{x} | \alpha \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \iint dx' dx'' \langle \beta | x'' \rangle \langle x'' | \hat{x} | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \langle \beta | x' \rangle x' \langle x' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi_\beta^*(x') x' \psi_\alpha(x')$$

### ■ Inversión Temporal [Reversión de Movimiento]

En mecánica clásica sería "pasar la película hacia atrás". En sistemas sin fuerzas disipativas se tiene:

$$t \rightarrow -t$$

$$m \ddot{x} = -\frac{d}{dx} V(x)$$

$$t \rightarrow -t \Rightarrow m \ddot{x} = -\frac{d}{dx} V(x)$$

$x(t)$  y  $x(-t)$  son soluciones de  $\vec{F} = m \vec{a}$  pues

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = \frac{d^2 x(-t)}{dt^2}$$

En mecánica cuántica tendremos:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi(x,t)$$

$$t \rightarrow -t$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,-t)}{\partial t} = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \Psi(x,t) \Rightarrow \Psi(x,-t) \text{ no es solución de Schrödinger}$$

Pero notamos que  $\Psi^*(x,-t)$  cumple la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial t} = -i\hbar \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial t} =$$

Entonces necesitaremos un operador que respete esta característica. Necesitaremos el producto interno conjugado

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

$$\psi_\alpha^*(x) = \langle x | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | x \rangle$$

El operador involucrado no será unitario.

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \hat{\Theta} |\alpha\rangle, \quad |\tilde{\beta}\rangle = \hat{\Theta} |\beta\rangle$$

Si  $\hat{\Theta}$  unitario se conserva el producto interno:

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \hat{\Theta}^\dagger \hat{\Theta} | \alpha \rangle = \langle \beta | \mathbb{1} | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle$$

Pediremos antiunitariedad y antilinealidad al operador  $\hat{\Theta}$

- $\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$  ← antiunitariedad →
- $\hat{\Theta} [c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle] = c_\alpha^* \hat{\Theta} |\alpha\rangle + c_\beta^* \hat{\Theta} |\beta\rangle$  ← antilinealidad

Todo operador antiunitario y antilineal puede escribirse como producto

$$\hat{\Theta} = U \cdot K, \quad \text{donde } U \text{ es unitario, } K \text{ es la conjugación } \mathbb{C}$$

$K$  no cambia los autoestados, porque en base canónica un autoestado tiene un solo elemento (1) que no es 0.

$$K(|\alpha\rangle) = c^* K|\alpha\rangle = c^* K \left( \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \right) = c^* \sum_{a'} \langle a' | \alpha \rangle^* K|a'\rangle = c^* \sum_{a'} \langle a' | \alpha \rangle^* |a'\rangle$$

Veamos que  $U \cdot K$  es antiunitario

$$|\tilde{\alpha}\rangle = UK|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle a' | \alpha \rangle^* U|a'\rangle$$

$$|\tilde{\beta}\rangle = UK|\beta\rangle = \sum_{a''} \langle a'' | \beta \rangle^* U|a''\rangle$$

$$\langle \tilde{\beta} | = \sum_{a''} \langle a'' | \beta \rangle \langle a'' | U^\dagger \Rightarrow$$

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \left( \sum_{a''} \langle a'' | \beta \rangle \langle a'' | U^\dagger \right) \left( \sum_{a'} \langle a' | \alpha \rangle^* U|a'\rangle \right) = \sum_{a''} \langle a'' | \beta \rangle \langle a' | \alpha \rangle^* \underbrace{\langle a'' | U^\dagger U | a' \rangle}_{\delta_{a'' a'}} = \sum_{a'} \langle a' | \beta \rangle \langle a' | \alpha \rangle^* = \sum_{a'} \langle \beta | a' \rangle^* \langle a' | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* \Rightarrow \text{Es } UK \text{ antiunitario}$$

Notemos que: NO SE DEFINE  $\hat{\Theta}^\dagger$  actuando sobre bras. La demostración anterior esperó a quitarse de encima  $K$  para hacer dual conjugado al  $|\tilde{\beta}\rangle$ .

### Operadores ante $\hat{\Theta}$

Usaremos la notación

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \hat{\Theta} |\alpha\rangle$$

Sería razonable esperar que:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\alpha} | \hat{P} | \tilde{\alpha} \rangle &= -\langle \alpha | \hat{P} | \alpha \rangle \\ \langle \tilde{\alpha} | \hat{X} | \tilde{\alpha} \rangle &= \langle \alpha | \hat{X} | \alpha \rangle \end{aligned}$$

**NOTA**  
 $\hat{\Theta}^\dagger \hat{\Theta} \neq \mathbb{1}$  pues  
 $\hat{\Theta}^\dagger$  no está definido

Sea  $\hat{\Theta}$  un operador hermitico

$$\langle \alpha | \hat{\Theta} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \gamma \rangle \rightarrow \begin{cases} \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\gamma} \rangle^* = \langle \alpha | \gamma \rangle \Rightarrow \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\gamma} \rangle = \langle \gamma | \alpha \rangle \\ \langle \tilde{\alpha} | \hat{\Theta} | \gamma \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \hat{\Theta} | \alpha \rangle \end{cases}$$

Luego metemos un  $\hat{\Theta}^{-1} \hat{\Theta} = \mathbb{1}$

$$\langle \tilde{\alpha} | \hat{\Theta} \hat{\Theta}^{-1} \hat{\Theta} | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \hat{\Theta} \hat{\Theta}^{-1} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \alpha | \hat{\Theta} | \alpha \rangle$$

Notamos que no se aplica  $\hat{\Theta}$  sobre bra alguno y tenemos  $\hat{\Theta}$  no unitario. Entonces requeriremos:

$$\left. \begin{aligned} \hat{\Theta} \hat{P} \hat{\Theta}^{-1} &= -\hat{P} \\ \hat{\Theta} \hat{J} \hat{\Theta}^{-1} &= -\hat{J} \\ \hat{\Theta} \hat{X} \hat{\Theta}^{-1} &= \hat{X} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} \hat{\Theta} \hat{P} &= -\hat{P} \hat{\Theta} \Rightarrow \{\hat{\Theta}, \hat{P}\} = 0 \\ \hat{\Theta} \hat{X} &= \hat{X} \hat{\Theta} \Rightarrow [\hat{\Theta}, \hat{X}] = 0 \end{aligned}$$

$\hat{P}, \hat{J}$  operadores impares

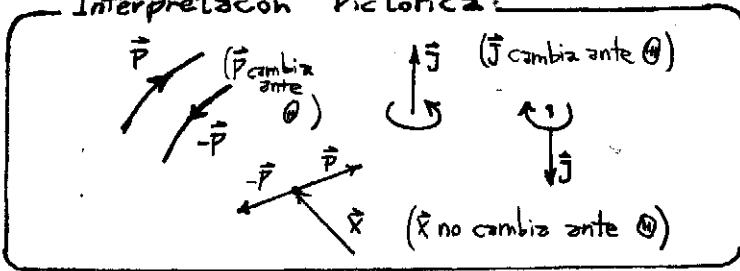
$\hat{X}$  operador par

Los operadores pares conmutan con  $\hat{\Theta}$

$$\Theta |\vec{x}'\rangle = |\vec{x}'\rangle$$

$$\Theta |\vec{p}'\rangle = -|\vec{p}'\rangle$$

Interpretación Pictórica:



Estamos pidiendo que se obtenga el mismo estado:

- si revertimos el movimiento y evolucionamos en  $\Delta t$
- si evolucionamos hacia atrás ( $-\Delta t$ ) y revertimos el movimiento

Hamiltoniano ante reversión de movimiento  
Veamos la reversión de un sistema en estado  $|\alpha\rangle$

$$|\alpha, t = \Delta t\rangle = \left( \mathbb{1} - i \frac{\Delta t H}{\hbar} \right) |\alpha\rangle$$

Si el hamiltoniano es invariante ante reversión temporal debería ser lo mismo:

$$U_{(+\Delta t)} \Theta |\alpha\rangle = \Theta U_{(-\Delta t)} |\alpha\rangle$$

Veamos que esto vale

$$\left( \mathbb{1} - i \frac{\Delta t H}{\hbar} \right) \Theta |\alpha\rangle = \Theta \left( \mathbb{1} + i \frac{\Delta t H}{\hbar} \right) |\alpha\rangle$$

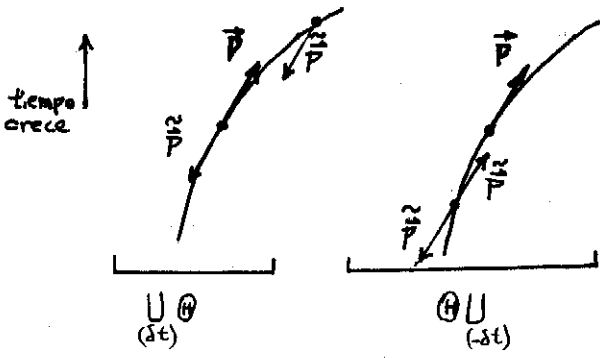
$$-i \frac{\Delta t H}{\hbar} \Theta |\alpha\rangle = \Theta i \frac{\Delta t H}{\hbar} |\alpha\rangle$$

$$-i H \Theta |\alpha\rangle = \Theta (i H |\alpha\rangle) \Rightarrow$$

$$[H, \Theta] = 0$$

Lo conjugará y se simplifica

Si  $\Theta$  era unitario tendríamos la relación de anticonmutación  $\{H, \Theta\} = 0$  lo cual lleva a absurdos.



Si  $\{H, \Theta\} = 0 \rightarrow$

$$\Theta^{-1} \frac{p^2}{2m} \Theta = -\frac{p^2}{2m} < 0 \quad \text{partícula libre con energía negativa}$$

$\Rightarrow$  H debe ser par frente a  $\Theta$

función de onda

Sea en  $t=0$  un sistema en el estado  $|\alpha\rangle$

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

$$\Theta |\alpha\rangle = \int dx' \langle x' | \alpha \rangle^* \Theta |x'\rangle = \int dx' \langle x' | \alpha \rangle^* |x'\rangle \Rightarrow$$

$$\Psi_\alpha(x') \xrightarrow{\Theta} \Psi_\alpha^*(x')$$

Esto era lo que "vimos" en la ecuación de Schrödinger

Reversión de Movimiento sobre  $\vec{j}$

$\Theta |j\rangle$  no tiene sentido porque  $J_x, J_y, J_z$  no conmutan entre ellos. Analizaremos  $|l, m\rangle$

$$Y_l^m(\theta, \phi) \xrightarrow{\Theta} Y_l^{m*}(\theta, \phi) = Y_l^{-m}(\theta, \phi) \cdot (-1)^m$$

$$\Theta |l, m\rangle \equiv (-1)^m |l, -m\rangle$$

Lo que hace  $\Theta$  es invertir la componente de  $\hat{z}$  y alterar la fase. Se ve que  $\Theta^2 = \mathbb{1}$

Reversión para sistemas de spin 1/2

Sea un estado general up de spin  $|\hat{n}; +\rangle$

se obtiene con dos rotaciones

$$\hat{S} \cdot \hat{n} |\hat{n}; +\rangle = \frac{\hbar}{2} |\hat{n}; +\rangle \Rightarrow e^{-i \frac{\alpha}{\hbar} S_z} e^{-i \frac{\beta}{\hbar} S_y} |+\rangle \equiv |\hat{n}; +\rangle$$

$$\Theta |h; +\rangle = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar} S_z} \cdot e^{-i\frac{\beta}{\hbar} S_y} \Theta |+\rangle = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar} S_z} \cdot e^{-i\frac{\beta}{\hbar} S_y} \eta |-\rangle =$$

$$\Theta |h; +\rangle = \eta |h; -\rangle$$

pero  $|h; -\rangle = e^{-i\frac{\alpha}{\hbar} S_z} \cdot e^{-i(\frac{\pi+\beta}{\hbar}) S_y} |+\rangle$  dado que  $e^{-i\frac{\pi}{\hbar} S_y} |+\rangle = |-\rangle$

$$\Theta |h; +\rangle = \eta e^{-i\frac{\alpha}{\hbar} S_z} e^{-i\frac{\beta}{\hbar} S_y} e^{-i\frac{\pi}{\hbar} S_y} |+\rangle$$

$$\Theta |+\rangle = \eta |-\rangle$$

$$\Theta |-\rangle = \eta (-|+\rangle)$$

$\Theta = \eta \cdot e^{-i\frac{\pi}{\hbar} S_y}$

← Para sistemas de spin 1/2

$$\Theta^2 = -1$$

$$\Theta^2 (c|+\rangle + c|-\rangle) = \Theta (c^* \eta |-\rangle - c^* \eta (-|+\rangle)) = -c^* \eta |-\rangle - c^* \eta |+\rangle = -(c|+\rangle + c|-\rangle)$$

$\Theta |j, m\rangle = i^{2m} |j, -m\rangle = (-1)^m |j, -m\rangle$

\*  $j$  entero o semientero

### Teorema

Sea  $H$  invariante ante  $\Theta$  y los  $|h\rangle$  no degenerados  $\Rightarrow$  la autofunción de energía puede hacerse real tomando una fase apropiada.

• demostración:

$$H \Theta |h\rangle = \Theta H |h\rangle = \Theta E_h |h\rangle = E_h (\Theta |h\rangle) \Rightarrow \Theta |h\rangle = \delta |h\rangle$$

$$\psi_n = \langle \hat{x} | n \rangle \Rightarrow \psi_n^*(\hat{x}) = \langle \hat{x} | \hat{n} \rangle = \langle n | \hat{x} \rangle = \psi_n^*(\hat{x}) \quad (\text{Esto por ser } \Theta)$$

$$\psi_n^*(\hat{x}) = \langle \hat{x} | \Theta | n \rangle = \delta \langle \hat{x} | n \rangle = \delta \cdot \psi_n(\hat{x}) \quad \text{sea } \delta = 1 \Rightarrow \psi_n^* = \psi_n \rightarrow \psi_n(\hat{x}) \in \mathbb{R}$$

Commutación entre observables  $\rightarrow [L, S] = 0$

$$\Rightarrow [L, S] = 0$$

$$[L, S] = 0$$

Si se aplica al sistema transformaciones dadas por operadores que conmutan con el  $H$  no lo sacamos del autoestado en que se encuentra con el paso del tiempo.

En ese sistema solo será razonable medir variables representadas por esos operadores, puesto que de lo contrario estamos alterando el sistema y nos es imposible saber donde ha quedado.

## Métodos Perturbativos

$$H = H_0 + \lambda V$$

$$\lambda \ll 1$$

$\lambda \equiv$  parámetro para controlar la perturbación

con  $H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$  (el problema sin perturbar)

$$H |n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |n(\lambda)\rangle$$

Esto sería la solución exacta

Como esto es hartocomplicado podemos desarrollar en serie

$$E_n(\lambda) \cong E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2$$

$$|n(\lambda)\rangle \cong |0_n\rangle + \lambda |1_n\rangle + \lambda^2 |2_n\rangle$$

$n =$  autoestado correspondiente  
 $(0, 1, 2) =$  órdenes del desarrollo perturbativo

$$(H_0 + \lambda V) \left[ \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |i_n\rangle \right] = \left( \sum_{j=0}^{\infty} \lambda^j E_n^{(j)} \right) \left( \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i |i_n\rangle \right)$$

$$\sum_{i=0}^{\infty} H_0 \lambda^i |i_n\rangle + \lambda V \lambda^i |i_n\rangle = \sum_{i,j} \lambda^j E_n^j \lambda^i |i_n\rangle \Rightarrow$$

aproximando a los 1er términos

$$H_0 |0_n\rangle + H_0 \lambda |1_n\rangle + H_0 \lambda^2 |2_n\rangle + V \lambda |0_n\rangle + V \lambda^2 |1_n\rangle + \dots =$$

$$E_n^0 |0_n\rangle + E_n^0 \lambda |1_n\rangle + E_n^0 \lambda^2 |2_n\rangle + E_n^1 \lambda |0_n\rangle + E_n^1 \lambda^2 |1_n\rangle + E_n^1 \lambda^3 |2_n\rangle + E_n^2 \lambda^2 |0_n\rangle$$

Ahora igualamos orden a orden y resulta:

$$\lambda^0 \text{ ----- } H_0 |0_n\rangle = E_n^{(0)} |0_n\rangle$$

$$\lambda^1 \text{ ----- } H_0 |1_n\rangle + V |0_n\rangle = E_n^{(0)} |1_n\rangle + E_n^{(1)} |0_n\rangle$$

$$\lambda^2 \text{ ----- } H_0 |2_n\rangle + V |1_n\rangle = E_n^{(0)} |2_n\rangle + E_n^{(1)} |1_n\rangle + E_n^{(2)} |0_n\rangle$$

Pediremos una normalización a cada orden; y considerando  $\langle 0_n | n(\lambda) \rangle \in \mathbb{R}$

$$\left( \langle 0_n | + \lambda \langle 1_n | + \lambda^2 \langle 2_n | \right) \left( |0_n\rangle + \lambda |1_n\rangle + \lambda^2 |2_n\rangle \right) =$$

$$\langle 0_n | 0_n \rangle + \lambda \langle 1_n | 0_n \rangle + \lambda^2 \langle 2_n | 0_n \rangle$$

$$\lambda \langle 0_n | 1_n \rangle + \lambda^2 \langle 1_n | 1_n \rangle + \lambda^3 \langle 2_n | 1_n \rangle$$

$$\lambda^2 \langle 0_n | 2_n \rangle + \lambda^3 \langle 1_n | 2_n \rangle + \lambda^4 \langle 2_n | 2_n \rangle$$

$\lambda^0$

$\lambda^1$

$\lambda^2$

$\lambda^3$

$$\langle 0_n | 0_n \rangle = 1$$

$$= 1 \rightarrow \langle 0_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 0_n \rangle + \langle 0_n | 1_n \rangle = 1 \rightarrow \langle 1_n | 0_n \rangle = -\langle 0_n | 1_n \rangle$$

$$\langle 0_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 0_n \rangle + \langle 0_n | 1_n \rangle + \langle 2_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 1_n \rangle + \langle 0_n | 2_n \rangle = 1$$

... ..

En un mismo autoestado ( $n$ ) los órdenes diferentes ( $i$ ) no son necesariamente ortogonales

# • Resolución

A orden cero será:

$$(H_0 - E_n^{(0)}) |0_n\rangle = 0 \quad \text{y se define} \quad |0_n\rangle \equiv |\varphi_n\rangle$$

$|0_n\rangle$  es dato porque es el estado no perturbado

A orden uno tenemos:

$$(H_0 - E_n^{(0)}) |1_n\rangle + (V - E_n^{(1)}) |0_n\rangle = 0$$

$$\underbrace{\langle \varphi_n | H_0 - E_n^{(0)} |1_n\rangle}_{=0} + \langle \varphi_n | V - E_n^{(1)} |0_n\rangle = 0$$

$$\langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle = E_n^{(1)} \quad \text{Energía a orden 1}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle \quad \leftarrow \text{Energía hasta orden uno}$$

Veamos el autoestado a orden uno. Podemos poner (no hay degeneración)

$$|1_n\rangle = \sum_p \langle \varphi_p | 1_n \rangle |\varphi_p\rangle$$

sea  $p \neq n \rightarrow$

$$\langle \varphi_p | H_0 - E_n^{(0)} |1_n\rangle + \langle \varphi_p | V - E_n^{(1)} | \varphi_n \rangle = 0$$

$$(E_p^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle \varphi_p | 1_n \rangle + \langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle = E_n^{(1)} \underbrace{\langle \varphi_p | \varphi_n \rangle}_{=0}$$

A un mismo orden (ceros) diferentes autoestados son ortogonales

$$\langle \varphi_p | 1_n \rangle = \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_p^{(0)})}$$

sea  $p = n \rightarrow$

$$\langle \varphi_n | 1_n \rangle = \langle 0_n | 1_n \rangle = 0 \quad (\text{ya lo vimos antes, en la normalización})$$

$$|n(\lambda)\rangle = |0_n\rangle + \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_p^{(0)})} |\varphi_p\rangle \quad \leftarrow \text{autoestado hasta orden uno}$$

A orden dos tenemos:

$$(H_0 - E_n^{(0)}) |2_n\rangle + (V - E_n^{(1)}) |1_n\rangle - E_n^{(2)} |0_n\rangle = 0$$

$$\underbrace{\langle \varphi_n | H_0 - E_n^{(0)} |2_n\rangle}_{=0} + \langle \varphi_n | V - E_n^{(1)} |1_n\rangle - \langle \varphi_n | E_n^{(2)} |0_n\rangle = 0$$

$$\langle \varphi_n | V | 1_n \rangle = E_n^{(2)} \underbrace{\langle \varphi_n | 0_n \rangle}_{=0} + E_n^{(1)} \underbrace{\langle \varphi_n | 1_n \rangle}_{=0}$$

$$E_n^{(2)} = \langle \varphi_n | V | 1_n \rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_p^{(0)})} \langle \varphi_n | V | \varphi_p \rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_p^{(0)})} \quad \text{energía a orden 2}$$

Veamos el autoestado a orden dos.

$$|2_n\rangle = \sum_p \langle \varphi_p | 2_n \rangle |\varphi_p\rangle$$

sea  $p \neq n$

$$\langle \varphi_p | H_0 - E_n^{(0)} |2_n\rangle + \langle \varphi_p | V - E_n^{(1)} |1_n\rangle = \langle \varphi_p | E_n^{(2)} |0_n\rangle$$

$$(E_p^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle \varphi_p | 2_n \rangle + \langle \varphi_p | V | 1_n \rangle - E_n^{(1)} \langle \varphi_p | 1_n \rangle = E_n^{(2)} \underbrace{\langle \varphi_p | 0_n \rangle}_{=0}$$

$$\langle \varphi_p | Z_n \rangle = \frac{E_n^{(1)} \langle \varphi_p | 1_n \rangle - \langle \varphi_p | V | 1_n \rangle}{(E_p^{(0)} - E_n^{(0)})}$$

$$\sum_k \frac{\langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle \langle \varphi_p | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle}{(E_p^{(0)} - E_n^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} + \langle \varphi_p | V \left( \sum_k \frac{\langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} | \varphi_k \rangle \right)$$

$$\langle \varphi_p | Z_n \rangle = \frac{\langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle \langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{(E_p^{(0)} - E_n^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_p^{(0)})} + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle}{(E_n^{(0)} - E_p^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})}$$

sea  $p=n$

$$\frac{\langle 0_n | 0_n \rangle}{1} + \frac{\langle 1_n | 0_n \rangle}{0} + \frac{\langle 0_n | 1_n \rangle}{0} + \langle Z_n | 0_n \rangle + \langle 1_n | 1_n \rangle + \langle 0_n | Z_n \rangle = 1$$

$$\langle Z_n | 0_n \rangle + \langle 0_n | Z_n \rangle = -\langle 1_n | 1_n \rangle$$

$$\langle 0_n | Z_n \rangle = -\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle$$

$$-\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle = \sum_k \frac{1}{2} \langle 1_n | 0_k \rangle \langle 0_k | 1_n \rangle$$

$$-\frac{1}{2} \langle 1_n | 1_n \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k | V | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} = \langle 0_n | Z_n \rangle$$

$$|Z_n\rangle = \sum_{p \neq n} \left( \frac{-V_{nn} V_{pn}}{(E_p^{(0)} - E_n^{(0)})^2} \right) |\varphi_p\rangle + \sum_{\substack{p \neq n \\ k \neq n}} \frac{V_{pk} V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_p^{(0)}) (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} |\varphi_p\rangle - \frac{1}{2} \sum_p \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} |\varphi_p\rangle$$

$$|n(\lambda)\rangle = |0_n\rangle + \sum_{p \neq n} \frac{V_{pn}}{\Delta E_{np}^{(0)}} |\varphi_p\rangle + |Z_n\rangle$$

Autoestado hasta orden dos

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle|^2}{(E_n^{(0)} - E_p^{(0)})^2}$$

Energía hasta orden dos

### ■ Caso Degenerado

Sea que hay degeneración de orden  $g$  en el autoestado  $N$  (a orden cero)

$$H_0 |\varphi_N^k\rangle = E_N^{(0)} |\varphi_N^k\rangle \quad k=1, 2, \dots, g$$

Suponemos  $\exists$  CL:

$$|0_N^j\rangle = \sum_k a_{jk} |\varphi_N^k\rangle$$

para escribir un estado degenerado en función de los otros.



$$(H_0 - E_N^{(0)}) |1_N^j\rangle + (V - E_N^{(1j)}) |0_N^j\rangle = 0$$

$$\underbrace{\langle 0_N^i | H_0 - E_N^{(0)} | 1_N^j \rangle}_{=0} + \langle 0_N^i | V - E_N^{(1j)} | 0_N^j \rangle = 0$$

$$\sum_k \langle 0_N^i | (V - E_N^{(1j)}) | \varphi_N^k \rangle = 0$$

$$\sum_k a_k^j \langle 0_N^i | V - E_N^{(1j)} | 0_N^k \rangle = 0$$

$$\sum_k a_k^j \langle 0_N^i | V | 0_N^k \rangle = \sum_k a_k^j \langle 0_N^i | E_N^{(1j)} | 0_N^k \rangle$$

$$\sum_k a_k^j \langle 0_N^i | V | 0_N^k \rangle = \sum_k a_k^j E_N^{(1j)} \delta_{ik}$$

$$\sum_k a_k^j \langle 0_N^i | V | 0_N^k \rangle = a_k^j E_N^{(1j)}$$

$$\sum_k \langle 0_N^i | V | 0_N^k \rangle a_k^j = E_N^{(1j)} a_k^j$$

Esto último es una ecuación de autovalores y autovectores de la forma:

$$(V - E_N^{(1j)} \mathbb{1}) \vec{a} = 0 \rightarrow \det[V - E_N^{(1j)} \mathbb{1}] = 0$$

nos dará los comentarios de la energía a primer orden, y los autoestados  $|1_N^j\rangle$  serán los autovectores del problema.

### ■ Efecto Stark

Sea un átomo de H con  $|n, l, m\rangle$ , sin spin, y con  $n=2$ . Será

$$0 \leq l < n \quad -l \leq m \leq l \Rightarrow \quad l=0,1 \quad m=-1,0,1$$

Tengo cuatro estados

$$\begin{bmatrix} |2, 0, 0\rangle \\ |2, 1, 1\rangle \\ |2, 1, 0\rangle \\ |2, 1, -1\rangle \end{bmatrix} \quad \text{todos con la misma energía } E_2$$

Metemos un campo eléctrico en  $\hat{z} \Rightarrow V = -e z |\vec{E}|$ . Luego

$$\langle n, l', m' | V | n, l, m \rangle = (-e |\vec{E}|) \langle n, l', m' | z | n, l, m \rangle$$

$$\Rightarrow \langle n, l, m | z | n, l, m \rangle = 0$$

$$\Rightarrow \langle n, l, m' | z | n, l, m \rangle = 0$$

$\hat{z}$  es impar ante paridad  $\Rightarrow$   
vincula estados de paridad diferente  
 $\Rightarrow$  diagonal nula

con  $m' \neq m \Rightarrow$  igual  $l$  tienen la misma paridad

$$\pi |2, l=1, m\rangle = -|2, l=1, m\rangle \quad \text{impares}$$

$$\pi |2, l=0, 0\rangle = |2, l=0, 0\rangle \quad \text{par}$$

Se tendrá:

$$V = \begin{pmatrix} |211\rangle & |21-1\rangle & |210\rangle & |200\rangle \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma |\vec{E}| \\ 0 & 0 & \gamma |\vec{E}| & 0 \end{pmatrix}$$

Puede diagonalizar y obtengo:

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma |\vec{E}| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma |\vec{E}| \end{pmatrix}$$

En este caso no se rompe la degeneración por completo.

$$\begin{array}{l} \text{deg}=4 \begin{cases} |A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|210\rangle + |200\rangle) \\ \text{deg}=2 \quad |2,1,\pm 1\rangle \\ |B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|210\rangle - |200\rangle) \end{cases} \end{array}$$

### ■ Corrimiento de la energía a orden 2 (con degeneración)

Sea que a 1<sup>er</sup> orden se rompe toda la degeneración.

$$(H_0 - E_N^{(0)}) |2_N^j\rangle + (V - E_N^{(1)j}) |1_N^j\rangle - E_N^{(2)j} |0_N^j\rangle = 0$$

Entonces la corrección a 2<sup>do</sup> orden de la energía será:

$$\underbrace{\langle 0_N^j | H_0 - E_N^{(0)} | 2_N^j \rangle}_{=0} + \langle 0_N^j | V - E_N^{(1)j} | 1_N^j \rangle = E_N^{(2)j}$$

$$\boxed{\langle 0_N^j | V | 1_N^j \rangle = E_N^{(2)j}} \quad \text{pues } \langle 0_N^j | 1_N^j \rangle = 0$$

Pero

$$|1_N^j\rangle = \sum_{k \neq N} b_k^{(j)} |\varphi_k^i\rangle + \sum_i b_N^{(j)} |\varphi_N^i\rangle$$

$$\langle 0_N^j | 1_N^j \rangle = 0 = \sum_{k \neq N} b_k^i \langle 0_N^j | \varphi_k^i \rangle + \sum_i b_N^i \langle 0_N^j | \varphi_N^i \rangle$$

falta desarrollo

$$\boxed{E_N^{(2)j} = \sum_{\substack{p \neq N \\ \text{posibles}}} \frac{|\langle 0_N^j | V | \varphi_p^i \rangle|^2}{E_N^{(0)} - E_p^{(0)}}$$

donde  
N es un estado  
degenerado

### ■ Estructura fina del átomo de hidrógeno

La solución tradicional del átomo de H usa el potencial coulombiano. Esto desemboca en las funciones  $|n, l, m\rangle$ , sin embargo la introd. de ajustes como "perturbaciones" rompe algo la degeneración.

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

$$E_n = -\frac{\alpha^2 m_e c^2}{2n^2}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

$a_0$  = radio de Bohr

$\alpha$  = constante de estructura fina.

$$\frac{v}{c} = \frac{p}{mc} = \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

#### a) Corrección cinemática (relativista)

$$E = c \sqrt{p^2 + m_e^2 c^2} = m_e c^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m_e^2 c^2}} \stackrel{\text{Taylor}}{\approx} m_e c^2 \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_e^2 c^2} + \frac{3}{8} \frac{p^4}{m_e^2 c^4} \right)$$

$$E \approx m_e c^2 + \frac{p^2}{2m_e} + \frac{3p^4}{8m_e^3 c^2}$$

Esta corrección va como:

$$\boxed{\frac{W_{mv}}{H_0} \sim \alpha^2}$$

b) Acoplamiento spin-orbita

Se puede pensar considerando un e<sup>-</sup> en reposo con un protón orbitando que genera un  $\vec{B}_{eff}$

$$W_{so} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\vec{L} \cdot \vec{S}}{R^3}$$

La corrección va como:

$$\frac{W_{so}}{H_0} \approx \alpha^2$$

$$W_{so} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_{eff}$$

c) Término de Darwin o de contacto

$$W_D = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla^2 V(r)$$

va como

$$\frac{W_D}{H_0} \approx \alpha^2$$

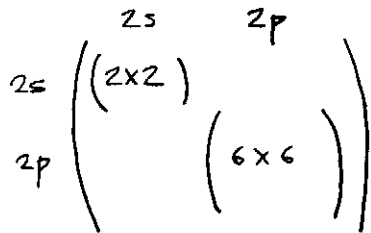
Hay otras correcciones, hiperfinas, que provienen del spin del electrón y del spin del protón. Pero van como  $(\alpha^2/2000)$ .

Si consideramos el sistema con  $n=2$   $l=0$   $m_l = 1, 0, -1$   $m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$  Serán 8 estados

$|n, l, m_l, m_s\rangle$  base desocupada

$$W = \underbrace{W_{mv}}_{\sim p^4} + \underbrace{W_{so}}_{\sim \vec{L} \cdot \vec{S}} + \underbrace{W_D}_{\sim |\delta|^4}$$

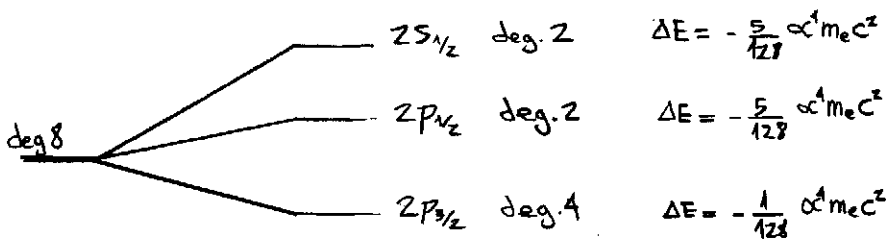
$\Rightarrow$  W es par ante  $\pi \Rightarrow$  solo habrá elementos de matriz  $\neq 0$  que sean de misma paridad.



$|2s\rangle$  es par ( $l=0$ )  $|2p\rangle$  es impar ( $l=1$ )

$\Rightarrow |2s\rangle, |2p\rangle$  no están conectados

Entonces hay 8 estados  $|n=2, l, m_l, s, m_s\rangle$  que al calcular esta perturbación W resultan

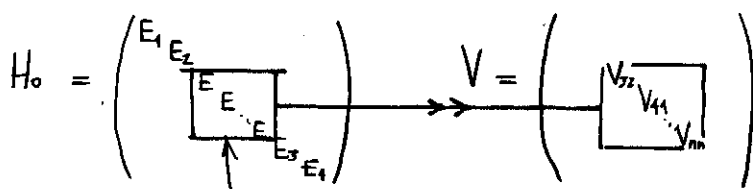


El cálculo para las correcciones hiperfinas no condice la experiencia. Se necesita aquí mecánica cuántica relativista. Los dos primeros niveles tienen misma  $\Delta E$  porque en MCR se ve que:

$$E = E(n, j)$$

es decir que no depende directamente de  $l, s$ .

■ Notas Métodos Perturbativos



bloque de energías degeneradas en el  $H_0$

Se diagonalizará el bloque correspondiente en la matriz del V perturbativo

**Picture de Interacción & Perturbación dependiente del tiempo**

Puedense estudiar perturbaciones dependientes del tiempo.

$$H = H_0 + V(t)$$

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad \text{con } |n\rangle \text{ No dependen del tiempo}$$

Se estudiarán transiciones entre autoestados del  $H_0$  (que son estacionarios). Un autoestado permanece en el tiempo como tal pero con fase oscilante.

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0, t\rangle_S &= e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle_S \\ &= e^{-i\frac{H_0}{\hbar}(t-t_0)} e^{-i\frac{V(t)}{\hbar}(t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle_S \\ &= \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} e^{-i\frac{V(t)}{\hbar}t} |n\rangle \langle n | \alpha, t_0\rangle_S \quad t_0 \equiv 0 \end{aligned}$$

$$|\alpha, t_0, t\rangle_S = \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} |n\rangle e^{-i\frac{V(t)}{\hbar}t} \langle n | \alpha, t_0\rangle_S$$

$$e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_S = \sum_n \underbrace{[e^{-i\frac{V(t)}{\hbar}t} \langle n | \alpha, t_0\rangle_S]}_{\equiv C_n(t)} |n\rangle = |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_S$$

- $C_n(t)$  evoluciona por  $V(t)$
- $e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$  evoluciona por  $H_0$

Esto introduce la "picture" de interacción de Dirac; en la cual los estados evolucionan con  $V(t)$ .

	Dirac	Schrödinger	Heisenberg
estados $ \alpha\rangle$	evolucionan con $V(t)$	evolucionan con $H$	fijos
operadores	evolucionan con $H_0$	fijos	evolucionan con $H$
base $ \alpha\rangle$	fijos	fijos	evolucionan

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I) = H e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$-\cancel{i\hbar \left(\frac{iH_0}{\hbar}\right) e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I} + i\hbar e^{-iH_0 t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$H_0 e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I + V(t) e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$i\hbar e^{-iH_0 t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V(t) e^{-iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

Ecuación de evolución de Kets

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_I = V_I(t) |\alpha, t_0, t\rangle_I$$

Pediremos asimismo  $\langle \hat{A}_S \rangle_S = \langle \hat{A}_I \rangle_I$

$$\langle \alpha, t_0, t | \hat{A}_I | \alpha, t_0, t \rangle_I = \langle \alpha, t_0, t | e^{-iH_0 t/\hbar} \hat{A}_I e^{iH_0 t/\hbar} | \alpha, t_0, t \rangle_S = \langle \alpha, t_0, t | \hat{A}_S | \alpha, t_0, t \rangle_S$$

Los operadores evolucionan  $\rightarrow \hat{A}_I = e^{iH_0 t/\hbar} \hat{A}_S e^{-iH_0 t/\hbar}$

$$\frac{d\hat{A}_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_I, \hat{H}_0]$$

← igual que la ecuación de Heisenberg pero con  $\hat{H}_0$  en lugar de  $H$

Los kets base permanecen fijos, porque así lo hacen en Schrödinger, entonces:

$$|n, t_0, t\rangle_S = e^{-iHt/\hbar} |n, t_0\rangle_S$$

en realidad oscila su fase

$$|n, t_0, t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} \left( e^{-iHt/\hbar} |n, t_0\rangle_S \right) = e^{-iV t/\hbar} |n, t_0\rangle_S = e^{iH_0 t/\hbar} |n, t_0, t\rangle_S$$

$$|n, t_0, t\rangle_I = e^{iE_0 t/\hbar} |n, t_0, t\rangle_S$$

$$e^{-iV t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar}$$

• Evolución de los coeficientes

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = \sum_n |n\rangle \langle n | \alpha, t_0, t\rangle_I = \sum_n C_n(t) |n\rangle$$

$$C_n(t) = e^{-iV t/\hbar} \langle n | \alpha, t_0\rangle_I$$

$$\langle m | \alpha, t_0, t\rangle_I = C_m(t) \quad \text{con } |n\rangle, |m\rangle \text{ autoestados de } H_0$$

Le pegó un  $\langle n |$  a la ecuación de evolución de kets.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n | \alpha, t_0, t\rangle_I = \langle n | V_I(t) | \alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$= \sum_m \langle n | V_I(t) | m\rangle \langle m | \alpha, t_0, t\rangle_I$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) = \sum_m C_m(t) \cdot \langle n | V_I(t) | m\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [C_n(t)] = \sum_m C_m(t) \cdot \langle n | V_S(t) | m\rangle \cdot e^{i\frac{t}{\hbar}(E_n - E_m)}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) = \sum_m V_{nm}(t) \cdot e^{i\omega_{nm} t} \cdot C_m(t)$$

Esta es la ecuación que cumplen los coeficientes, donde  $|C_n(t)|^2$  es la probabilidad de hallar al sistema en el autoestado  $|n\rangle$

$$\text{con } V_{nm}(t) \equiv \langle n | V(t) | m\rangle$$

$$\omega_{nm} \equiv \frac{E_n - E_m}{\hbar}$$

Esto puede ser de difícil resolución

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \\ \vdots \\ \dot{C}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} e^{i\omega_{12} t} \\ V_{21} e^{i\omega_{21} t} & V_{22} \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_N \end{pmatrix}$$

• Método Perturbativo (dependiente del tiempo)

Pensemos en una serie perturbativa.

$$C_n(t) = C_n^{(0)}(t) + C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t) + \dots$$

El evolucionador temporal en la picture de interacción cumple:

$$|\alpha, t_0, t\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_I$$

que viene de

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = V_I(t) \cdot U_I(t, t_0)$$

$$\text{con } U(t_0, t_0) = \mathbb{1}$$

resolviendo llegamos a

$$U_I(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt'$$

Esto lleva a la serie de Dyson:

$$U_I(t, t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') dt' + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t V_I(t') \int_{t_0}^{t'} V_I(t'') dt'' dt' + \dots$$

$$+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \int_{t_0}^{t''} dt''' \dots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} V_I(t') V_I(t'') \dots V_I(t^{(n)}).$$

• Transiciones entre autoestados del hamiltoniano  $H_0$

$$|i, t_0=0, t\rangle_I = U_I(t, 0) |i\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n| U_I(t) |i\rangle$$

ya lo vimos antes

$$|i, t\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle = \sum_n (\langle n| U_I(t) |i\rangle) |n\rangle$$

La amplitud de transición será:

$$c_n(t) = \langle n| U_I(t) |i\rangle \rightarrow \text{con } |i\rangle, |n\rangle \text{ autoestados de } H_0$$

Sea  $\tilde{c}_n(t) = \langle n| U_S(t) |i\rangle \rightarrow$  consigamos una expresión

$$|\alpha, t_0, t\rangle_S = e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0, t\rangle_S$$

$$= e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_S$$

$$|\alpha, t_0, t\rangle_S = e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t, t_0) e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\alpha, t_0\rangle_I = U_I(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_I$$

Notar que  $\hat{U}$  no obedece la ley de transformación de operadores

$$e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{U}_S e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} = \hat{U}_I$$

$$c_n(t) = \langle n| e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} U_S(t, t_0) e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} |i\rangle$$

$$c_n(t) = e^{+\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)} t - E_i^{(0)} t_0)} \langle n| U_S(t, t_0) |i\rangle$$

$$c_n(t) = e^{+\frac{i}{\hbar}[E_n^{(0)} t - E_i^{(0)} t_0]} \tilde{c}_n(t) \rightarrow |c_n(t)|^2 = |\tilde{c}_n(t)|^2$$

Para transiciones entre autoestados del  $H_0$  los coeficientes dan la misma probabilidad (evaluados con el evolucionador de Dirac que con el de Schrödinger).

Veamos las transiciones a los tres

orden 0:

$$c_n^{(0)}(t) = \langle n| \mathbb{1} |i\rangle = \delta_{ni}$$

$$V_{ni} \equiv \langle n| V(t) |i\rangle$$

orden 1:

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni} t'} V_{ni}(t') dt'$$

orden 2:

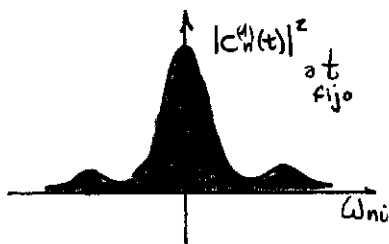
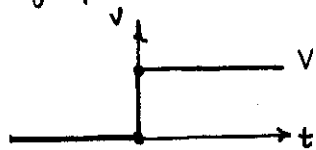
$$c_n^{(2)}(t) = \sum_m \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t'} V_{nm}(t') e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_i)t''} V_{mi}(t'')$$

$$P_{i \rightarrow n}^{(2)} = |c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t)|^2$$

Probabilidad de ir desde  $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$  hasta orden 2

● Ejemplo: Potencial constante encendido abruptamente

Notemos que  $V \neq V(t)$ . Dependerá de cualquier otra cosa.



$$C_n^{(0)}(t) = 0$$

$$C_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{\frac{i(E_n - E_i)t'}{\hbar}} V_{ni} dt' = \frac{V_{ni}}{E_n - E_i} (1 - e^{i\omega_{ni}t})$$

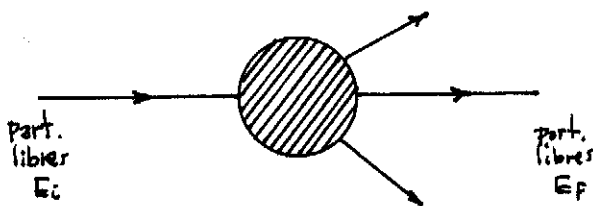
$$|C_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \text{sen}^2\left(\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar}\right) \quad [1]$$

Es máxima la probabilidad cuando  $\Delta E \rightarrow 0$ . En ese caso las transiciones son a estados de la misma energía. A tiempo largo la prob. es no nula para aquellos estados  $t \sim \frac{2\pi}{\omega_{ni}}$ . Hay probabilidad de transición  $i \rightarrow n$  apreciable con  $\Delta E \sim 0$ .

■ Scattering: Orden 1

Este último ejemplo puede aplicarse a colisiones elásticas. Tenemos y apogamos un potencial que es el masacote al cual impactamos partículas libres. Entonces  $E_n - E_i \sim 0$  y

colisiones elásticas. Tenemos y apogamos un potencial. De entrada hay part. libres y de salida (lejos del V) consideraremos lo que sucede a tiempos largos. Interesará la prob. total de transicionar a estados de energías similares a  $E_i$ . Por ello se considera:



$$\sum_n |C_n^{(1)}|^2 \Rightarrow \int dE_n \rho(E_n) |C_n^{(1)}|^2$$

# de estados dentro de un intervalo de energías  $(E, E+dE)$

En tiempos muy largos la expresión [1] tiende a una delta de Dirac y se integra fácil

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int dE \rho(E_n) |C_n^{(1)}(t)|^2 = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) |V_{ni}|^2 \rho(E_n) t \Big|_{E_n \approx E_i}$$

La probabilidad de transición es proporcional a t. Se suele definir una tasa de transición (prob. de transición por unidad de tiempo).

$$\frac{d}{dt} \left( \sum_n |C_n^{(1)}|^2 \right) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \rho(E_n) = \omega_{i \rightarrow n}^{(1)} \quad \text{con } E_n \approx E_i$$

↳ Regla de Oro de Fermi

■ EL Método Variacional

Se puede usar para aproximar la energía del estado fundamental. (El estado de energía mínima)

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H | \Psi \rangle &= \sum_{n,m} \langle \Psi | n \rangle \langle n | H | m \rangle \langle m | \Psi \rangle = \sum_{n,m} E_n \langle \Psi | n \rangle \langle n | m \rangle \langle m | \Psi \rangle = \sum_{n,m} E_n C_n^* \langle n | m \rangle C_m \\ &= \sum_n E_n |C_n|^2 \geq \sum_n E_0 |C_n|^2 = E_0 \sum_n |C_n|^2 = E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle \end{aligned}$$

Usamos

$$|\Psi\rangle = \sum_n \langle n | \Psi \rangle |n\rangle$$

$$\langle \Psi | = \sum_n \langle \Psi | n \rangle \langle n |$$

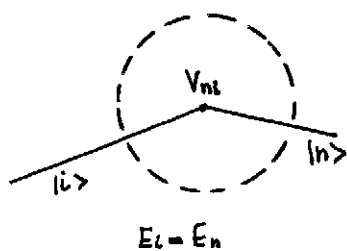
$$\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0$$

■ Scattering: Orden 2 y OFPT

Continuando con el orden 2<sup>do</sup> de scattering por un  $V \neq V(t)$  se tiene:

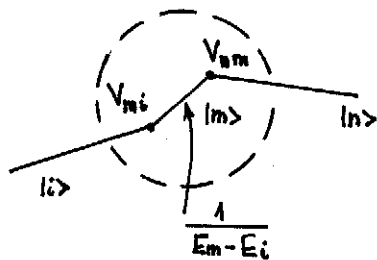
$$\omega_{i \rightarrow n}^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{ni} + \sum_{m \neq i} \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_i - E_m} \right|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_n \approx E_i}$$

Para obtener los siguientes términos dentro del  $| \cdot |^2$  podemos emplear un ardid gráfico conocido como Old Fashioned Perturbation Theory.



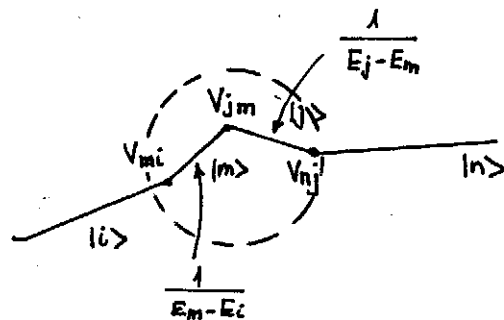
no hay propagador

$$V_{ni}$$



un propagador  $|m\rangle$

$$\sum_{m \neq i} \frac{V_{mi} V_{nm}}{E_m - E_i}$$



dos propagadores  $|m\rangle, |j\rangle$

$$\sum_{\substack{m \neq i \\ m \neq j}} \frac{V_{mi} V_{jm}}{E_m - E_i} \frac{V_{jm} V_{nj}}{E_j - E_m}$$

Fijese que en los estados intermedios estados virtuales  $|m\rangle, |j\rangle$  no se conserva la energía. Son propagadores.

### ■ Perturbación Armónica

Sea un potencial armónico y hermitico

$$V(t) = V \cdot e^{i\omega t} + V^\dagger \cdot e^{-i\omega t}, \quad V \neq V(t)$$

Quiero ver prob. de transición a orden 1.

$$C_n^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t (V_{ni} e^{i\omega t'} + V_{ni}^\dagger e^{-i\omega t'}) \cdot e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

$$C_n^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \left[ V_{ni} \int_0^t e^{it'(\omega_{ni} + \omega)} dt' + V_{ni}^\dagger \int_0^t e^{it'(\omega_{ni} - \omega)} dt' \right]$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \left[ V_{ni} \frac{(e^{it(\omega_{ni} + \omega)} - 1)}{i(\omega_{ni} + \omega)} + V_{ni}^\dagger \frac{(e^{it(\omega_{ni} - \omega)} - 1)}{i(\omega_{ni} - \omega)} \right]$$

$$C_n^1(t) = \frac{V_{ni}}{\hbar} \frac{(1 - e^{it(\omega_{ni} + \omega)})}{(\omega_{ni} + \omega)} + \frac{V_{ni}^\dagger}{\hbar} \frac{(1 - e^{it(\omega_{ni} - \omega)})}{(\omega_{ni} - \omega)}$$

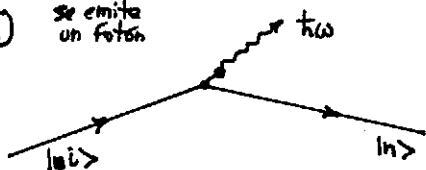
$$\lim_{t \rightarrow \infty} C_n^1(t) = \frac{1}{\hbar} [V_{ni} \cdot \delta(\omega_{ni} + \omega) + V_{ni}^\dagger \cdot \delta(\omega_{ni} - \omega)]$$

Luego será no nulo sólo si

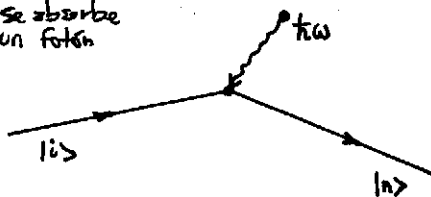
$$\omega_{ni} = \omega \rightarrow \frac{E_n - E_i}{\hbar} = -\omega \rightarrow E_n = E_i - \hbar\omega \quad (1)$$

$$\omega_{ni} = -\omega \rightarrow \frac{E_n - E_i}{\hbar} = \omega \rightarrow E_n = E_i + \hbar\omega \quad (2)$$

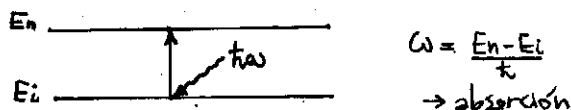
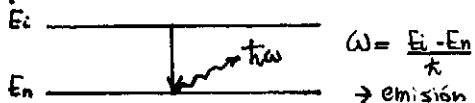
(1) se emite un fotón



(2) se absorbe un fotón



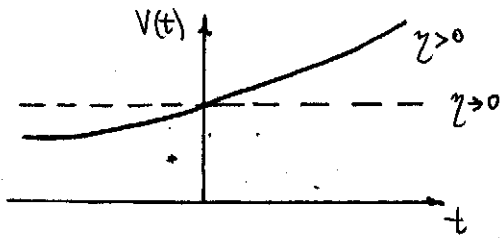
Luego  $\lim_{t \rightarrow \infty} C_n^1(t)$  representa la probabilidad de emitir o absorber fotones en una interacción. Se puede asociar  $V$  crea fotones y  $V^\dagger$  destruye fotones. Para un átomo se tiene:





## ■ Despoblamiento de Estados Iniciales

Queremos ver con cuál  $\vec{j}$  se despoblan los  $|i\rangle$ . Para ello me construyo un potencial "suave"



$$\lim_{\eta \rightarrow 0} V(t) = e^{\eta t} \cdot V, \quad V \text{ constante}$$

$\eta$  será un parámetro regularizador.

$$c_n^{(1)}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{ni} e^{\eta t'} e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \frac{e^{\eta t + i\omega_{ni} t}}{\eta + i\omega_{ni}}$$

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2}$$

$$\frac{d}{dt} |c_n^{(1)}(t)|^2 = \left( 2\eta \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} \right)$$

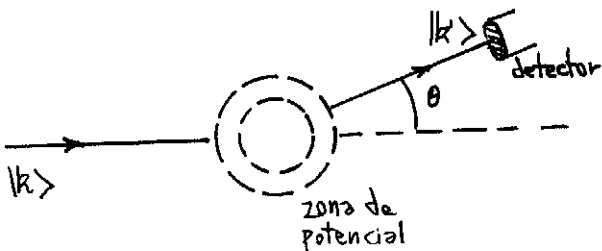
tomando el límite será  $\eta \rightarrow 0$

$$= \frac{2|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{\eta}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} = \begin{cases} 0 & \text{si } \omega_{ni} \neq 0 \\ \infty & \text{si } \omega_{ni} = 0 \end{cases}$$

Llegamos a la regla de oro de Fermi.

$$\boxed{\frac{d}{dt} |c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{2|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{ni}) \pi}$$

## ● Scattering [sección eficaz]



$|k\rangle, |k'\rangle$  son autoestados de momento. (Partículas libres)

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'|$$

se conserva la energía. Consideraremos la aproximación más baja (aproximación de Born).

$$\omega_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \int \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E' - E) |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 \rho(E') dE'$$

Queremos calcular la densidad de estados de energía entre  $(E, E+dE)$ . Pensamos en una partícula libre en una caja 1D de long  $L$ .

$$N \cdot e^{i k_x x} ; \text{ con } k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$

pidiendo normalización unitaria  $\langle k | k \rangle = 1$  se tiene:

$$\frac{e^{i k_x x}}{\sqrt{L}}$$

Con  $L \rightarrow \infty$ ;  $n_x, k_x$  son continuas

$$dk_x = \frac{2\pi}{L} dn_x \Rightarrow \boxed{dn_x = \frac{L}{2\pi} dk_x}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 n^2 \rightarrow n^2 = \frac{L^2}{(2\pi)^2} k^2 =$$

$$dn = \frac{L}{2\pi} dk, \quad \boxed{dE = \frac{\hbar^2}{m} \cdot k \cdot dk} \Rightarrow dn = \frac{L}{2\pi} \frac{m}{\hbar^2 k} dE$$

$$\boxed{n^2 \cdot dn \cdot d\Omega = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{m \cdot k}{\hbar^2} dE d\Omega}$$

donde  $n^2 dn d\Omega$  es la densidad de estados de energía  $(E, E+dE)$  en  $d\Omega$

$$n^2 dn d\Omega = \rho(E') \cdot dE'$$

Con esto sale la integral obteniéndose:

$$\omega_{\vec{k}-\vec{k}'} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^3} |\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle|^2 k' d\Omega$$

Esta es la probabilidad de transición entre los impulsos  $\vec{k}, \vec{k}'$ . Es # de partículas en la unidad de tiempo por unidad de área.

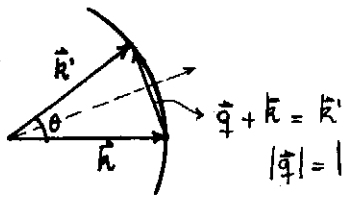
$$\text{Sección eficaz} \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\# \text{ part. en } d\Omega \text{ en la unidad de } t}{\# \text{ part. incidentes en la unidad de } t \text{ por unidad de área}}$$

Un elemento de matriz  $\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle$  será:

$$\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \int d^3x' \langle \vec{k}' | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | V | \vec{k} \rangle = \int d^3x' \frac{1}{L^3} e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}')$$

La transformada de Fourier del potencial es, amén de constantes, la amplitud  $\approx 1^{\text{er}}$  orden

$$|\vec{k}' - \vec{k}| = 2k \cdot \text{sen}(\theta/2) \quad \text{con } k = k'$$



$$|\vec{q}| = |\vec{k}' - \vec{k}| = 2k \cdot \text{sen}(\theta/2)$$

Entonces para cualquier potencial esféricamente simétrico se puede hacer la integral

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \left( \frac{Zm}{4\pi\hbar^2} \right)^2 \int d^3x' V(x) e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}'} \right|^2$$

Expresamos todo en función de  $q = q(\theta)$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| - \frac{Zm}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{q} \int_0^\infty r V(r) \cdot \text{sen}(q) \cdot dr \right|^2$$

Utilizando un potencial de Yukawa  $\dagger$  primero y tomando el límite para llegar al de Coulomb tenemos la sección eficaz de Rutherford

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Zn^2 e^4}{\hbar^4} \frac{1}{16 k^4 \cdot \text{sen}^4(\theta/2)}$$

$\dagger$  Hay que tomar el pot. de Yukawa y luego el límite porque el de Coulomb diverge de entrada

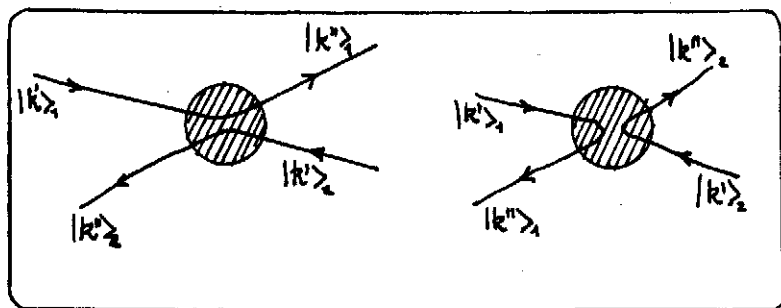
## ■ Partículas Idénticas

Más apropiado sería partículas indistinguibles. Si en algún punto del espacio se solapan las funciones de onda (interfieren) de dos partículas del mismo tipo (dos  $e^-$  por ejemplo) no podremos distinguir cual es cual. Sean dos estados  $|k'\rangle, |k''\rangle$  con  $k^{(i)}$  índice colectivo. En la zona de interferencia es:

$$|k'\rangle_1 \otimes |k''\rangle_2 \quad \text{ó} \quad |k''\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2$$

$$|k'\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2$$

identifica a la partícula



donde ambos estados son ortogonales. Entonces un estado general será:

$$|K\rangle = c_1 |k'\rangle_1 \otimes |k''\rangle_2 + c_2 |k''\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2$$

$$\text{con } |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

Esto es la "degeneración de intercambio"

### ● Permutación

Definimos este operador como:

$$P_{12} (|k'\rangle_1 \otimes |k''\rangle_2) = |k''\rangle_1 \otimes |k'\rangle_2$$

$$P_{12} = P_{21} \quad P_{12}^2 = \mathbb{1} \quad P_{12}^\dagger = P_{12} \quad P_{12} P_{12}^\dagger = \mathbb{1} \quad \text{autor. } \pm 1$$

Su función es la de intercambiar etiquetas, NO el orden de las partículas.

Sean operadores  $\hat{A}_1, \hat{A}_2$  que actúan sobre las partículas 1, 2, es decir

$$\hat{A}_1 \equiv \hat{A}_1 \otimes \mathbb{1}_2 \quad , \quad \hat{A}_2 \equiv \mathbb{1}_1 \otimes \hat{A}_2$$

$$\hat{A}_1 |a'\rangle |a''\rangle = a' |a'\rangle |a''\rangle$$

$$\hat{A}_2 |a'\rangle |a''\rangle = a'' |a'\rangle |a''\rangle$$

$$P_{12} \hat{A}_1 P_{12}^{-1} P_{12} |a'\rangle |a''\rangle = P_{12} a' |a'\rangle |a''\rangle_2 = a' |a''\rangle_1 |a'\rangle_2$$

$$P_{12} \hat{A}_1 P_{12}^{-1} |a''\rangle_1 |a'\rangle_2 = a' |a''\rangle_1 |a'\rangle_2$$

$$\hat{A}_2 |a''\rangle_1 |a'\rangle_2 = a' |a''\rangle_1 |a'\rangle_2 \Rightarrow$$

$$P_{12} \hat{A}_1 P_{12}^{-1} = \hat{A}_2$$

$$\rightarrow P_{12} \hat{A}_1 - \hat{A}_2 P_{12} = 0$$

$$\text{Luego } \hat{A} \text{ es simétrica si: } [P_{12}, \hat{A}_{12}] = 0$$

Sea  $[P_{12}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow$  es  $P_{12}$  constante de movimiento y  $P_{12} |\alpha\rangle = \pm |\alpha\rangle$

$$\text{Sea } H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(|x_1 - x_2|) + V_e(\vec{x}_1) + V_e(\vec{x}_2) \rightarrow P_{12} H =$$

$m_1 = m_2 \equiv m$  si las partículas son idénticas

Defino dos estados:

$$|k' k''\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 + |k''\rangle_1 |k'\rangle_2)$$

$$|k' k''\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 - |k''\rangle_1 |k'\rangle_2)$$

$$\text{con } \begin{cases} P_{12} | \rangle_s = + | \rangle_s \\ P_{12} | \rangle_a = - | \rangle_a \end{cases}$$

Puedo introducir operadores de simetrización y antisimetrización

$$\hat{S}_{12} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} + \hat{P}_{12})$$

$$\hat{A}_{12} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} - \hat{P}_{12})$$

$$S^2 = S, \quad A^2 = A$$

$$SA = AS = 0$$

$$[S, A] = 0$$

$$\hat{S}_{12} (c_1 |k'\rangle |k''\rangle + c_2 |k''\rangle |k'\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_1 + c_2) (|k'\rangle |k''\rangle + |k''\rangle |k'\rangle) \quad \text{es simétrica}$$

$$\hat{A}_{12} (c_1 |k'\rangle |k''\rangle + c_2 |k''\rangle |k'\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_1 - c_2) (|k'\rangle |k''\rangle - |k''\rangle |k'\rangle) \quad \text{es antisimétrica}$$

En general se complica bastante con más de dos partículas.

$$P_{ij} (|k'_1\rangle |k''_2\rangle \dots |k'_i\rangle \dots |k^j\rangle \dots |k^i\rangle) = (|k'_1\rangle |k''_2\rangle \dots |k^j\rangle \dots |k^i\rangle)$$

pues tenemos:

$$[P_{ij}, P_{kl}] \neq 0 \quad \text{en general}$$

Las permutaciones para tres partículas pueden descomponerse:

$$P_{123} = P_{12} P_{13} \rightarrow P_{123} |k'\rangle |k''\rangle |k'''\rangle =$$

$$P_{12} |k''\rangle |k'\rangle |k'''\rangle =$$

$$|k''\rangle |k'''\rangle |k'\rangle$$

Con 3 partículas hay 3! estados:

$$\begin{cases} 1 & \text{totalmente simétrico} & | \rangle_s \\ 1 & \text{totalmente antisimétrico} & | \rangle_a \\ 4 & \text{sin simetría definida} & \end{cases}$$

Estos estados simétricos serán:

$$|k' k'' k'''\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{6}} (|k' k'' k'''\rangle + |k'' k'' k'\rangle + |k'' k' k'''\rangle$$

$$\pm |k'' k' k'''\rangle \pm |k' k'' k'''\rangle \pm |k'' k'' k'\rangle)$$

donde el  $| \rangle_a$  tiene el signo (-) en las permutaciones anticíclicas y el (+) en las cíclicas

$$| \psi \rangle_a = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} |k'\rangle |k''\rangle |k'''\rangle \\ |k'\rangle |k''\rangle |k'''\rangle \\ |k'\rangle |k''\rangle |k'''\rangle \end{vmatrix}$$

Existe un determinante de Slater como método mnemotécnico de obtener los estados  $| \rangle_a$

La obtención de estos estados corresponde a aplicar:

$$A_{123} = \frac{1}{\sqrt{3!}} (\mathbb{1} + P_{231} + P_{312} - P_{213} - P_{132} - P_{321})$$

$$(\mathbb{1} + P_{23} P_{21} + P_{31} P_{32} - P_{21} P_{23} - P_{13} P_{12} - P_{32} P_{31})$$

Si dos  $k^{(i)}$  coinciden ya no hay estado antisimétrico posible.

## Postulado de Simetrización

Permitirá romper la degeneración de intercambio. Postulamos que toda partícula es de uno de los tipos de acuerdo a su simetría.

Sistemas de N partículas idénticas	función de onda <u>simétrica</u> $P_{ij}  N \text{ bosones}\rangle = +  N \text{ bosones}\rangle$	⇒ Estadística Bose-Einstein	<u>spín entero</u>
	función de onda <u>antisimétrica</u> $P_{ij}  N \text{ fermiones}\rangle = -  N \text{ fermiones}\rangle$	⇒ Estadística Fermi-Dirac	<u>spín semi-entero</u>

En la naturaleza no ocurren simetrías mixtas.

### Principio de Exclusión de Pauli

Para fermiones superponer sistema de 2 partículas idénticas:

$$|\psi\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle_1 |k''\rangle_2 - |k''\rangle_1 |k'\rangle_2) \Rightarrow \text{si } \boxed{k'=k''} \Rightarrow \boxed{|\psi\rangle_A = 0}$$

No es posible tener dos fermiones con iguales # cuánticos. Por el contrario los bosones sí pueden tener iguales # cuánticos.

### Sistema de dos e<sup>-</sup> de spín 1/2

Sistema de dos electrones con spín 1/2. Son fermiones. Sea que  $[\hat{H}, \hat{S}] = 0$   
con  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ . Se tendrá:

$$|\psi\rangle^{\text{SIST}} = |\psi\rangle^{\text{SPA}} \otimes |\psi\rangle^{\text{SPIN}}$$

Como  $|\psi\rangle^{\text{SIST}}$  es simétrica tendremos:

$$P_{12} |\psi\rangle^{\text{SIST}} = - |\psi\rangle^{\text{SIST}}$$

$$P_{12} |\psi\rangle^{\text{SIST}} = P_{12} |\psi\rangle^{\text{SPA}} \otimes P_{12} |\psi\rangle^{\text{SPIN}}$$

Pero para dos e<sup>-</sup> con spín 1/2 se tiene

$$\begin{aligned} &|\uparrow\uparrow\rangle \\ &|\downarrow\downarrow\rangle \\ &\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned}$$

triplete  
S=1

estados  
simétricos

singlete  
S=0

estado  
antisimétrico

$$j_1 + j_2 \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} 0 \leq j \leq 1 \\ |m_1| \leq j_1 \\ |m_2| \leq j_2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} 0 \leq S \leq 1 \\ |m_{S_1}| \leq S_1 \\ |m_{S_2}| \leq S_2 \end{aligned} \right\}$$

$$\text{Entonces } \begin{cases} S=0 \Rightarrow |\psi\rangle^{\text{SPA}} \text{ es simétrica} \\ S=1 \Rightarrow |\psi\rangle^{\text{SPA}} \text{ es antisimétrica} \end{cases}$$

$$\text{Vistos desde el CM de los dos electrones } P_{12} = \Pi \Rightarrow P_{12} |nlm\rangle = (-1)^l |nlm\rangle$$

$$l \text{ par} \rightarrow |\psi\rangle^{\text{SPA}} = P_{12} |\psi\rangle^{\text{SPA}}$$

$$l \text{ impar} \rightarrow -|\psi\rangle^{\text{SPA}} = P_{12} |\psi\rangle^{\text{SPA}}$$

$$\begin{aligned} \text{Necesitaré } l \text{ par con } S=0 &\rightarrow l+S \equiv j \text{ par} \\ l \text{ impar con } S=1 &\rightarrow l+S \equiv j \text{ par} \end{aligned}$$

Los e<sup>-</sup> solo se aceptan a momento total j PAR

Sean los siguientes estados

$$|\psi_S\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle |k''\rangle \pm |k''\rangle |k'\rangle)$$

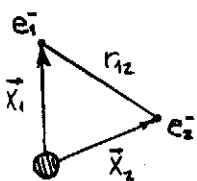
$$|\psi_F\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (|a'\rangle |a''\rangle \pm |a''\rangle |a'\rangle)$$

$$\begin{aligned}
 \text{Prob.} &= \left| \int_{\mathbb{R}^3} \langle \Psi_F | \Psi \rangle_{\mathbb{R}^3} \right|^2 = \left| \frac{1}{2} (\langle a' | \langle a'' | \pm \langle a'' | \langle a' |) (|k'_1\rangle |k''_2\rangle \pm |k''_1\rangle |k'_2\rangle) \right|^2 \\
 &= \frac{1}{4} \left| \langle a' | \langle a'' | k'_1 \rangle |k''_2\rangle \pm \langle a'' | \langle a' | k'_1 \rangle |k''_2\rangle \pm \langle a' | \langle a' | k''_1 \rangle |k'_2\rangle \right. \\
 &\quad \left. + \langle a'' | \langle a'' | k''_1 \rangle |k'_2\rangle \right|^2 \\
 &= \frac{1}{4} \left| \langle a' | k'_1 \rangle \langle a'' | k''_2 \rangle \pm 2 \langle a'' | k'_1 \rangle \langle a' | k''_2 \rangle \pm \langle a' | k''_1 \rangle \langle a'' | k'_2 \rangle \right|^2 \\
 &= \left| \underbrace{\langle a' | k'_1 \rangle \langle a'' | k''_2 \rangle}_{\text{término directo}} \pm \underbrace{\langle a'' | k'_1 \rangle \langle a' | k''_2 \rangle}_{\text{término de intercambio}} \right|^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Prob.} &= \left| \int_{\mathbb{R}^3} \langle \Psi_F | \Psi \rangle_{\mathbb{R}^3} \right|^2 = |\langle a' | k'_1 \rangle \langle a'' | k''_2 \rangle|^2 + |\langle a'' | k'_1 \rangle \langle a' | k''_2 \rangle|^2 \\
 &\quad \pm 2 \text{Re} \left( \underbrace{\langle a' | k'_1 \rangle \langle a' | k''_2 \rangle^* \langle a'' | k''_2 \rangle \langle a'' | k'_1 \rangle^*}_{\text{interferencia}} \right)
 \end{aligned}$$

Vemos que aparece una interferencia que será importante solamente si hay solapamiento. En el caso de no solaparse o con partículas clásicas solo el primer término es de importancia.

■ EL Átomo de Helio



$$H = \frac{p_1}{2m} + \frac{p_2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \underbrace{\frac{e^2}{r_{12}}}_{\sim 0}$$

en este último caso H está desacoplado

$$\Psi = \Psi_1 \otimes \Psi_2$$

$$[\vec{H}, \vec{S}] = 0$$

S constante de movimiento

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

Para la  $|\Psi_{spin}\rangle$  se tiene

$$\left[ \begin{array}{l} s=0 \quad \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ \text{singlete} \end{array} \right.$$

$$\left[ \begin{array}{l} s=1 \quad \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \end{array} \\ \text{triplete} \end{array} \right.$$

Sea  $\begin{cases} e_1 & |100\rangle \\ e_2 & |n\ell m\rangle \end{cases} \rightarrow$

$$|\Psi\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} ( |100\rangle |n\ell m\rangle \pm |n\ell m\rangle |100\rangle ) \cdot |\Psi_{spin}\rangle$$

si  $s=0 \rightarrow |\Psi\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} ( \dots + \dots ) \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] \right)$

si  $s=1 \rightarrow |\Psi\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} ( \dots - \dots ) \cdot \left( \begin{array}{l} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \end{array} \right)$

Podemos pensar en teoría de perturbaciones ahora y calcular:

$$E_{He} = E_{100} + E_{n\ell m} + \Delta E$$

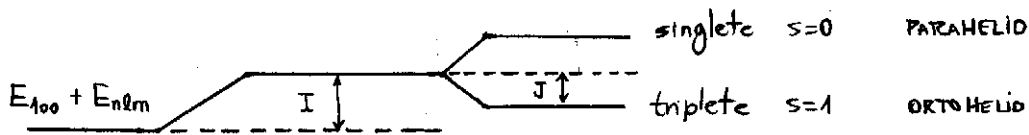
Lo considero una perturbación

$$\Delta E = \langle \Psi | \frac{e^2}{r_{12}} | \Psi \rangle$$

$$\Delta E = \langle \psi^{\text{spin}} | \frac{1}{2} \left( \langle 100 | n l m | \pm \langle n l m | 100 | \right) \frac{e^2}{r_{12}} \left( | 100 \rangle | n l m \rangle \pm | n l m \rangle | 100 \rangle \right) | \psi^{\text{spin}} \rangle$$

$$\Delta E = \underbrace{\langle 100 | n l m | \frac{e^2}{r_{12}} | 100 \rangle | n l m \rangle}_{\equiv I} \pm \underbrace{\langle n l m | 100 | \frac{e^2}{r_{12}} | 100 \rangle | n l m \rangle}_{\equiv J}$$

$$\Delta E = I \pm J$$



Esta separación de los niveles en  $\pm J$  se debe al carácter de fermión de las partículas.

### Introducción a la Mecánica Cuántica Relativista

Consideremos una partícula libre por el momento.

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad [1] \quad E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad [2] \quad \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad [3]$$

$$p_\mu = i\hbar \partial_\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}$$

$$p^\mu = \left( \frac{E}{c}, \vec{p} \right)$$

$$p_\mu = \left( \frac{E}{c}, -\vec{p} \right)$$

$$x^\mu = (ct, \vec{x})$$

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla} \right) \equiv \partial_\mu$$

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla} \right) \equiv \partial^\mu$$

En relatividad [1] no sirve, pero sí lo hacen [2] y [3]

$$[4] \quad \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi} \quad \leftarrow \text{Schrödinger para partícula libre}$$

$$\begin{aligned} \psi^*(4) &= i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi \\ \psi \cdot (4)^* &= -i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi \nabla^2 \psi^* \end{aligned}$$

$$i\hbar \psi^* \partial_t \psi + \psi \partial_t \psi^* = \frac{\hbar^2}{2m} \left( -\psi^* \nabla^2 \psi + \psi \nabla^2 \psi^* \right)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \vec{\nabla} \cdot \left( \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*] \right) = 0$$

Una analogía de la conservación de la carga en electrodinámica

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

Tenemos una especie de conservación de la probabilidad. Note que  $\psi^* \cdot \psi = |\psi|^2 \geq 0$ .

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$$

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = H \quad \text{con} \quad H\psi = E\psi$$

Pero esto se pone muy complicado debido a la raíz.

• La ecuación de Klein Gordon

Conserva el cuadrado pero no complicar demasiado los reemplazos. Entonces:

$$H^2 = E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \rightarrow$$

$$\boxed{-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \Psi + m^2 c^4 \Psi} \quad [1]$$

← Ecuación de Klein-Gordon

$$p^\mu p_\mu = m^2 c^2$$

$$-\partial_\mu \partial^\mu \Psi = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi$$

$\underbrace{\quad}_{=\square^2}$  el d'Alembertiano

$$\left(\square^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \Psi = 0$$

$$\Psi^* \cdot [1] = -\hbar^2 \Psi^* \partial_t^2 \Psi = -\hbar^2 c^2 \Psi^* \nabla^2 \Psi + m^2 c^4 \Psi^* \Psi$$

$$-\Psi \cdot [1]^* = -\hbar^2 \Psi \partial_t^2 \Psi^* = -\hbar^2 c^2 \Psi \nabla^2 \Psi^* + m^2 c^4 \Psi \Psi^*$$

$$\hbar^2 \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \partial_t \Psi - \Psi \partial_t \Psi^*) = \hbar^2 c^2 \vec{\nabla} \cdot (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \underbrace{\frac{i}{c^2} [\Psi^* \partial_t \Psi - \Psi \partial_t \Psi^*]}_{=j\rho?} \right) + i \vec{\nabla} \cdot (\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi) = 0$$

El problema es que no puede asegurarse que esta  $\rho$  sea definida positiva; lo cual sería necesario para seguir una coherencia.

Necesito considerar  $E < 0$  pues  $E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$  y la base debe ser completa.

$$\Psi = U \cdot e^{i/\hbar (\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)}$$

$$\partial_t \Psi = -U \cdot \frac{E}{\hbar} \cdot e^{i/\hbar (\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)}$$

$$\rho = \frac{1}{c^2} \left( U^* e^{-i/\hbar (\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)} \cdot (-U) \frac{E}{\hbar} e^{i/\hbar (\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)} - U e^{i/\hbar (\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)} \cdot U \frac{E}{\hbar} e^{-i/\hbar (\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)} \right)$$

$$\rho = \frac{1}{c^2} \left( |U|^2 \frac{E}{\hbar} - |U|^2 \frac{E}{\hbar} \right) = -\frac{|U|^2}{\hbar c^2} \cdot 2E < 0 \quad \text{si } E > 0 \quad \text{para una onda plana}$$

Es positiva si tuviese  $E < 0$  pero esto causa el problema de tener materia inestable, pues nunca se alcanza el fundamental. Así tiene este atoladero la ecuación de Klein-Gordon.

• La Ecuación de Dirac

Dirac parte de pedir una ecuación lineal en el impulso  $\vec{p}$

$$\boxed{H = c \cdot \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta \cdot m c^2}$$

con  $\beta, \vec{\alpha}, \vec{p}$  operadores

usando  $\begin{cases} H\Psi = E\Psi \\ H^2 = E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \end{cases}$



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

$$H^2 = c^2 \alpha_i p_i \alpha_l p_l + c^3 \alpha_i p_i \beta m + \beta mc^3 \alpha_i p_i + \beta^2 m^2 c^4$$

$$H^2 = c^2 \alpha_i \alpha_l p_i p_l + c^3 m p_i (\underbrace{\alpha_i \beta + \beta \alpha_i}_{=0}) + \beta^2 m^2 c^4$$

$$H^2 = c^2 \underbrace{(\alpha_i \alpha_l + \alpha_l \alpha_i)}_{=2\delta_{il}} p_i p_l + m^2 c^4 \underbrace{\beta^2}_{=1}$$

$$\alpha_i \alpha_l + \alpha_l \alpha_i = 2\delta_{il}$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0$$

$$\beta^2 = 1$$

Como se ve, estos no pueden ser simples escalares. Dirac pide:

- $\vec{\alpha}, \beta$  hermiticos
- $\beta^2 = 1 \quad \alpha^2 = 1 \Rightarrow$  autovalores  $\pm 1$
- traza nula

$$\alpha_i \beta = -\beta \alpha_i \rightarrow \beta \alpha_i \beta = -\beta^2 \alpha_i = -\alpha_i$$

$$\text{Tr}(\alpha_i) = -\text{Tr}(\beta \alpha_i \beta) = -\text{Tr}(\beta \beta \alpha_i)$$

- dimension par

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

donde cada elemento de la matriz pertenece a  $2 \times 2$

$$\overleftrightarrow{H} \overleftrightarrow{\Psi} = i\hbar \frac{\partial \overleftrightarrow{\Psi}}{\partial t}, \quad \overleftrightarrow{H} \in 4 \times 4, \quad \overleftrightarrow{\Psi} \in 4 \times 1, \quad \overleftrightarrow{\Psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar c \sum_k \alpha_k \frac{\partial \Psi}{\partial x_k} + mc^2 \beta \Psi} \quad [1]$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} = i\hbar c \sum_k \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial x_k} \alpha_k + mc^2 \Psi^\dagger \beta \quad [2]$$

$$\Psi^\dagger \cdot [1] - [2] \cdot \Psi \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^\dagger \Psi) = -i\hbar c \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} (\Psi^\dagger \alpha_k \Psi)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^\dagger \Psi) + c \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} (\Psi^\dagger \alpha_k \Psi) = 0$$

$$\Psi^\dagger \Psi \equiv \rho$$

Ahora tenemos una densidad de probabilidad como requiere la naturaleza

■ Ejemplo: Partícula libre quieta

Sea una partícula libre en reposo

$$\vec{p} = 0$$

$$H = \beta mc^2$$

$$\boxed{it\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \beta mc^2 \Psi}$$

$$\boxed{it\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}}$$

$$it\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = mc^2 \psi_1$$

$$it\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = -mc^2 \psi_2$$

Tenemos cuatro ecuaciones, dos con energía positiva y dos con energía negativa.

$$\psi_1 = e^{-imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi_2 = e^{imc^2 t/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Como aún tenemos degeneración de orden dos, necesitaremos un operador que conmute con el H.

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

$$[H, \vec{\Sigma}] = 0$$

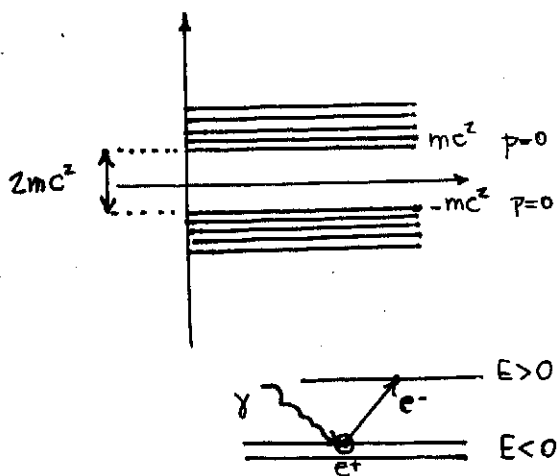
$$\Sigma_3 = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$\psi_1$ :	$E = mc^2$	$\Sigma_3 = 1$
$\psi_2$ :	$E = mc^2$	$\Sigma_3 = -1$
$\psi_3$ :	$E = -mc^2$	$\Sigma_3 = 1$
$\psi_4$ :	$E = -mc^2$	$\Sigma_3 = -1$

Podemos identificar  $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$

Si  $\vec{p} \neq 0 \Rightarrow [H, \vec{\Sigma}] = 2ic\vec{\alpha} \times \vec{p}$

■ Energías Negativas



Como  $E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$  hay  $E < 0$  y, además, un "gap" de ancho  $2mc^2$  entre ellas.

Las  $E < 0$  hacen que la materia jamás alcance un estado fundamental y por ende jamás se estabilice.

Dirac piensa que los estados de  $E < 0$  están todos llenos. No decaen más e- allí adentro. Es el mar de Dirac.

Iluminando ese vacío se lo puede excitar.

Podemos hacer saltar a la zona positiva una carga (-e) dejando un hueco positivo (= una carga +e)

Es una creación de pares  $\gamma \rightarrow e^- e^+$ .

Sin embargo el proceso inverso  $e^- e^+ \rightarrow \gamma$  de aniquilación de pares ocurre prontamente.

Se observó experimentalmente.