MECÁNICA CUÁNTICA

José A. Oller

Departamento de Física
Universidad de Murcia
E-30071 Murcia

E–Mail: oller@um.es

Índice general

Parte I

La mecánica cuántica y el proceso de medida

Capítulo 1

El proceso de medida y la interpretación estadística de la mecánica cuántica

Aplicamos el formalismo de la mecánica cuántica (MC) para describir el proceso de medida. El objeto cuyas propiedades queremos medir y el aparato utilizado para este propósito se tratarán como un sistema dinámico cerrado interactuante.

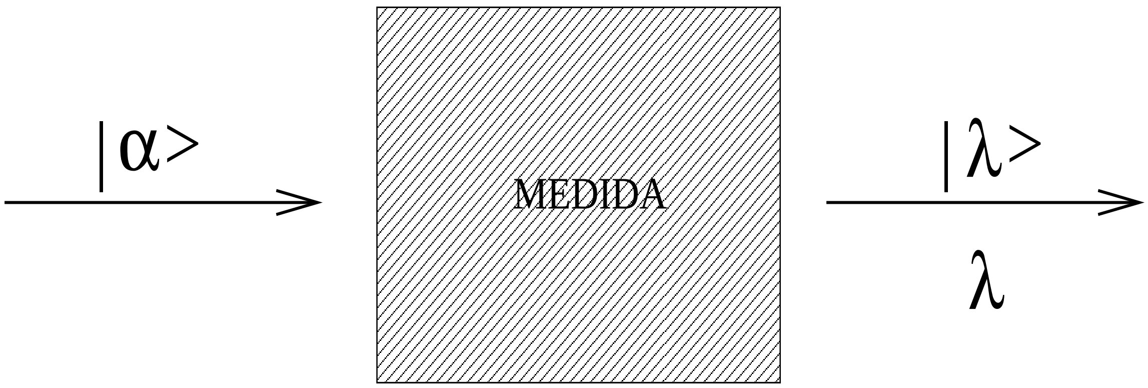

Figura 1.1: Proceso de medida indicado por el cuadrado rayado a partir del estado inicial $|\alpha\rangle$. $|\lambda\rangle$ representa un conjunto genérico de autoestados con los respectivos autovalores λ.

Así estudiaremos este proceso y verificaremos la consistencia del formalismo de la MC que interpreta el producto escalar de dos estados como amplitud de probabilidad. Se verá más en detalle qué se entiende por medida y profundizaremos en el proceso de preparar un sistema en un estado específico. En última estancia pretendemos ilustrar la cita de Bohr: *"La imposibilidad de cualquier distinción meridiana entre las propiedades de los sistemas atómicos y la interacción con los instrumentos de medida que fijan las condiciones bajo las que aparecen los fenómenos"*. Estudiaremos en detalle el experimento de Stern-Gerlach donde el sistema pasa por un campo magnético no homogéneo. Esto nos permite determinar el momento magnético del sistema atómico. Típicamente los campos aplicados varían de forma despreciable sobre distancias del orden del tamaño de los átomos o moléculas. Es por eso que debemos considerar cómo un sistema atómico se comporta en un campo aplicado que varía espacialmente de forma lenta. Este capítulo cumple a su vez con la finalidad de tener que considerar en los análisis que se exponen distintos aspectos del curso pasado de *Física Cuántica*, constituyendo un excelente campo de aplicación de muchos de los conocimientos y técnicas aprendidos en el mismo.

1.1. El experimento de Stern-Gerlach

Sean $\vec{A}(\vec{x})$ y $V(\vec{x})$ los potenciales electromagnéticos aplicados externamente. Tomemos un sistema de dos partículas de masas m_1, m_2 y cargas e_1, e_2, respectivamente. El Hamiltoniano del sistema, sumando sobre las partículas 1 y 2, es,

$$H = \sum_{i=1}^{2} \left\{ \frac{1}{2m_i} \left(\vec{p}_i - e_i \vec{A}_i \right)^2 + e_i V_i \right\} + U_{12}(\vec{r}) \ , \tag{1.1}$$

donde $\vec{A}_i = \vec{A}(\vec{x}_i)$, $V_i = V(\vec{x}_i)$ y $\vec{r} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$, el vector de posición relativa. Introduciendo además el vector de posición del centro de masas (CM) $\vec{R}$, definido como $\vec{R} = (m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2)/(m_1 + m_2)$ y llamando $M = m_1 + m_2$, la masa total del sistema, tenemos las siguientes igualdades:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} &= \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{x}_1}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} + \frac{\partial \vec{r}}{\partial \vec{x}_1}\frac{\partial}{\partial \vec{r}} = \frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \ , \\ \frac{\partial}{\partial \vec{x}_2} &= \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{x}_2}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} + \frac{\partial \vec{r}}{\partial \vec{x}_2}\frac{\partial}{\partial \vec{r}} = \frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial \vec{R}} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \ . \end{aligned} \tag{1.2}$$

Estudiamos primero el caso **electrostático** $\vec{A} = 0$ y procedamos a separar las coordenadas del CM y relativas teniendo en cuenta las expresiones (1.2). Así, el término de energía cinética queda reducido a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1}\frac{\partial^2}{\partial \vec{x}_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\frac{\partial^2}{\partial \vec{x}_2^2} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial \vec{R}^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^{\,2}} \ , \tag{1.3}$$

con $\mu = m_1 m_2/M$, la masa reducida de las dos partículas. Teniendo en cuenta este resultado podemos expresar el Hamiltoniano (1.1) como:

$$H = \frac{1}{2M}\vec{P}^2 + QV(\vec{R}) + \frac{1}{2\mu}\vec{p}^{\,2} + U_{12}(\vec{r}) + \sum_{i=1}^{2} e_i (V_i - V(\vec{R})) \ , \tag{1.4}$$

sumando y restando $QV(\vec{R})$, con $Q = e_1 + e_2$ la carga eléctrica total del sistema. Además:

$$\begin{aligned} \vec{P} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec{R}} \ , \\ \vec{p} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \ , \end{aligned} \tag{1.5}$$

es decir, los momentos del CM y relativos, respectivamente. Teniendo en cuenta además las igualdades:

$$
\begin{aligned}
\vec{x}_1 &= \vec{R} + \frac{m_2}{M}\vec{r} \; , \\
\vec{x}_2 &= \vec{R} - \frac{m_1}{M}\vec{r} \; , \\
V(\vec{x}_1) - V(\vec{R}) &= V(\vec{R} + \frac{m_2}{M}\vec{r}) - V(\vec{R}) = \frac{m_2}{M}\vec{r}\cdot\vec{\nabla}V = -\frac{m_2}{M}\vec{\mathcal{E}}(\vec{R})\cdot\vec{r} \; , \\
V(\vec{x}_2) - V(\vec{R}) &= V(\vec{R} - \frac{m_1}{M}\vec{r}) - V(\vec{R}) = \frac{m_1}{M}\vec{\mathcal{E}}(\vec{R})\cdot\vec{r} \; ,
\end{aligned}
\tag{1.6}
$$

donde se han despreciado términos de orden $\vec{r}^{\,2}$ y superiores, $\mathcal{O}(\vec{r}^{\,2})$, puesto que V es un campo externo que sólo varía apreciablmente en distancias macroscópicas. Así tenemos $H = H_0 + H_1 + \mathcal{O}(\vec{r}^{\,2})$.

$$
\begin{aligned}
H_0 &= \frac{1}{2M}\vec{P}^2 + QV(\vec{R}) \; , \\
H_1(\vec{R}) &= \frac{1}{2\mu}\vec{p}^{\,2} + U_{12}(\vec{r}) - \vec{d}\cdot\vec{\mathcal{E}}(\vec{R}) \; ,
\end{aligned}
\tag{1.7}
$$

donde $\vec{d}$ es el momento dipolar eléctrico de dos partículas en el CM. En la expresión (1.7), H_0 involucra únicamente coordenadas de CM mientras que H_1 se escribe en términos de coordenadas relativas y depende paramétricamente de $\vec{R}$ a través de $\vec{\mathcal{E}}(\vec{R})$.

El momento dipolar eléctrico viene dado:

$$
\vec{d} = \frac{e_1 m_2 - e_2 m_1}{M}\vec{r} \; . \tag{1.8}
$$

Para el caso del átomo de Hidrógeno, $e = e_1 = -e_2$ y $m_2 \gg m_1$, de modo que $\vec{d} \simeq e\vec{r}$. La interacción $\vec{d}\cdot\vec{\mathcal{E}}$ presente en H_1 es la responsable del efecto Stark, esto es, de la separación de niveles de energía de estados ligados por la presencia de un campo eléctrico externo.

Tomemos la ecuación de Schrödinger,

$$
i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},\vec{R},t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r},\vec{R},t) \; , \tag{1.9}
$$

con $\Psi(\vec{r},\vec{R},t)$ la función de onda del sistema de las dos partículas. Para $\vec{\mathcal{E}} = 0$, ausencia de campo externo, el CM se mueve libremente como se sabe de *Física Cuántica* y así la solución de la ecuación (1.9) para un estado estacionario Φ_n de H_1 se puede escribir con toda generalidad como:

$$
\Psi(\vec{r},\vec{R},t) = \Phi_n(\vec{r})e^{-iE_n t/\hbar}\int f(\vec{P})e^{i\vec{P}\vec{R}/\hbar}e^{-i\vec{P}^2 t/2M\hbar}\,d^3\vec{P} \; , \tag{1.10}
$$

de modo que el movimiento del CM viene descrito por un tren de ondas.

Como $\vec{\mathcal{E}}(\vec{R})$ varía muy lentamente para distancias típicas atómicas, es de esperar que la estructura de Ψ en (1.10) deba de seguir siendo útil a la hora de caracterizar la evolución del sistema. Así tomemos la solución prueba:

$$\begin{aligned}\Psi &\simeq u_n(\vec{R},t)\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \ ,\\ 0 &= \left[H_1(\vec{R})-E_n(\vec{R})\right]\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \ .\end{aligned} \tag{1.11}$$

La función Φ_n es una autofunción de H_1 con autovalor $E_n(\vec{R})$, que depende paramétricamente de $\vec{R}$ que sólo entra en H_1 a través de $\vec{\mathcal{E}}(\vec{R})$ y su dependencia es pues macroscópica. Recordemos que $\vec{\mathcal{E}}(\vec{R})$ es un campo eléctrico externo que se gradúa de acuerdo a aparatos macroscópicos de forma que varía de forma despreciable sobre una longitud de onda de de Broglie. Del sistema anterior de ecuaciones podemos determinar la ecuación diferencial satisfecha por $u_n(\vec{R},t)$:

$$\begin{aligned}\Phi_n(\vec{r},\vec{R})i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u_n(\vec{R},t) &= H_0u_n(\vec{R},t)\Phi_n(\vec{r},\vec{R})+H_1u_n(\vec{R},t)\Phi_n(\vec{r},\vec{R})\\ &\simeq \Phi_n(\vec{r},\vec{R})\left(H_0u_n(\vec{R},t)+E_n(\vec{R})u_n(\vec{R},t)\right)\end{aligned} \tag{1.12}$$

Despreciamos

$$\frac{\partial\Phi_n(\vec{r},\vec{R})}{\partial\vec{R}}=\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\Phi_n(\vec{r},\vec{R})}{\partial\mathcal{E}_i(\vec{R})}\frac{\partial\mathcal{E}_i(\vec{R})}{\partial\vec{R}} \ , \tag{1.13}$$

frente a $\partial u_n(\vec{R},t)/\partial\vec{R}$. Argumentos de órdenes de magnitud indican que esta aproximación es buena debido a la variación macroscópica espacial de $\vec{\mathcal{E}}(\vec{R})$. Así:

$$\left|\frac{\partial\Phi_n/\partial\vec{R}}{\partial u_n/\partial\vec{R}}\right|\sim\frac{q}{P}\simeq\frac{\hbar/L}{P}=\frac{\hbar}{PL}\ll 1 \ , \tag{1.14}$$

donde se ha estimado la derivada como un momento típico involucrado. Para $|\partial\Phi_n/\partial\vec{R}|$ este momento se ha llamado q y es del orden de $\hbar/L$, siendo L la distancia macroscópica típica de variación del campo eléctrico externo $\vec{\mathcal{E}}(\vec{R})$.

De nuevo $QV(\vec{R})+E_n(\vec{R})$ varía muy lentamente sobre distancias atómicas e intuitivamente se concluye que la aproximación clásica para el estudio de la trayectoria del CM es lo suficientemente precisa para nuestras necesidades presentes de determinar aproximadamente la localización del tren de ondas del CM. La fuerza responsable del movimiento del CM se deduce teniendo en cuenta que el Hamiltoniano que aparece en la ecuación de Schrödinger para el CM (1.12) es H_0+E_n,

$$\vec{F}=-\frac{\partial}{\partial\vec{R}}\left\{QV(\vec{R})+E_n(\vec{R})\right\} \ . \tag{1.15}$$

Es fundamental la aparición de $E_n(\vec{R})$, que es una propiedad cuántica del sistema relativa a su estado interno, y ello nos va a permitir determinarlo a partir de medidas macroscópicas. Es decir, con el transcurso del tiempo la función de ondas del centro de masas $u_n(\vec{R},t)$ da lugar a un movimiento macroscópico en $\vec{R}$ que dependerá de cuáles sean los valores de $E_n(\vec{R})$.

La aproximación que hemos empleado para determinar $\Psi(\vec{r},\vec{R},t)\simeq u_n(\vec{R},t)\Phi_n(\vec{r},\vec{R})$ se conoce como <u>aproximación adiabática</u> y se emplea siempre que haya un conjunto de variables "lentas", que en nuestro ejemplo corresponden a $\vec{R}$, frente a otras "rápidas", que corresponden en nuestro ejemplo a $\vec{r}$. En el fondo es un problema de separación de escalas.

A nivel práctico lo que hemos hecho no es muy relevante ya que la mayoría de los sistemas en su estado fundamental son invariantes bajo paridad y, por tanto, el valor esperado de $\vec{d}$ es 0 en dicho estado. Es mucho más importante considerar el momento dipolar magnético a través de un campo magnético no homogéneo.

Consideremos así el experimento de Stern-Gerlach, para el que $V = 0$ y $\vec{A} \neq 0$. Sea el Hamiltoniano de una sola partícula de masa m_1 y carga e_1:

$$H = \frac{1}{2m_1}(\vec{p}_1 - e_1\vec{A})^2 = \frac{1}{2m_1}\vec{p}_1^{\,2} + \frac{e_1^2}{2m_1}\vec{A}^{\,2} - \frac{e_1}{2m_1}(\vec{p}_1 \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}_1) \ . \tag{1.16}$$

Tomemos en lo que sigue el gauge de Coulomb, $\vec{\nabla}\vec{A} = 0$, así que $\vec{p}_1\vec{A} = \vec{A}\vec{p}_1$. Para un campo magnético uniforme podemos tomar:

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} \ . \tag{1.17}$$

Con lo que en el Hamiltoniano de la ecuación (1.16) podemos distinguir el Hamiltoniano magnético, H_{mag}:

$$H_{mag} = -\frac{e_1}{2m_1}\vec{B}\vec{\ell} + \frac{e_1^2}{8m_1}(\vec{B} \times \vec{r})^2 \ , \tag{1.18}$$

que se anula para $\vec{B} = 0$.

Hagamos a continuación una estimación de órdenes de magnitud del término lineal en $\vec{B}$ con respecto a los niveles de energía típicos para el átomo de Hidrógeno. Recordemos que 1 Tesla=10^4 Gauss y que el radio de Bohr $a_0 \sim 10^{-12}$cm.

$$\frac{B\hbar\, e/2m_e}{e^2/4\pi\epsilon_0 a_0} = \frac{B}{2{,}5 \times 10^9 \text{ Gauss}} \ , \tag{1.19}$$

mientras que típicamente en los laboratorios $B \lesssim 10^5$ Gauss y así el efecto Zeeman[#1] sólo afecta débilmente a los niveles atómicos.

Consideremos ahora el tamaño relativo del término cuadrático respecto del término lineal.

$$\sim \frac{e_1}{4}\frac{Ba_0^2}{\hbar} \sim \frac{B}{2{,}6 \times 10^9 \text{ Gauss}} \ , \tag{1.20}$$

con lo que resulta despreciable para campos magnéticos de laboratorio.

Volvamos de nuevo a nuestro sistema de dos partículas. Dado que $\vec{B}$ depende sólo macroscópicamente de la posición, y no microscópicamente, lo tomaremos constante en el Hamiltoniano H_1 que rige los grados de libertad internos. El CM se moverá semiclásicamente y, para sistemas neutros, a distancias macroscópicas modificará esta trayectoria sólo debido a que $\vec{B} \neq$constante. De hecho ya sabemos de física clásica y, en analogía con el caso electrostático, cuáles deben ser sus ecuaciones de movimiento: la fuerza de Lorentz + el nuevo término de la energía interna. Mostremos que en efecto se obtiene este resultado. Sumando para dos partículas el Hamiltoniano (1.16), tenemos para el caso de un campo magnético externo, teniendo en cuenta (1.17):

[#1] Separación de los niveles en un átomo debido a la presencia de un campo magnético externo.

$$H_{mag} = -\frac{\vec{B}(\vec{R})}{2}\left(\frac{e_1}{m_1}\vec{\ell}_1 + \frac{e_2}{m_2}\vec{\ell}_2\right) ~, \tag{1.21}$$

despreciando los términos cuadráticos en $\vec{B}$ como ya se ha discutido. En esta expresión $\vec{\ell}_i$ es el momento angular orbital de la partícula i-ésima. Tomemos un sistema neutro, $e_1 + e_2 = 0$, por lo tanto el CM no tendrá fuerza externa de Lorentz. Teniendo en cuenta las igualdades siguientes que se derivan directamente de las formulas (1.2):

$$\begin{aligned} \vec{p}_1 &= \frac{m_1}{M}\vec{P} + \vec{p} ~, \\ \vec{p}_2 &= \frac{m_2}{M}\vec{P} - \vec{p} ~, \end{aligned} \tag{1.22}$$

se concluye que:

$$H_{mag} = -\frac{e_1\vec{B}(\vec{R})}{2M}\left(\frac{m_2}{m_1} - \frac{m_1}{m_2}\right)\vec{L} - \frac{e_1\vec{B}(\vec{R})}{2\mu}\vec{R}\times\vec{p} - \frac{e_1\vec{B}(\vec{R})}{2M}\vec{r}\times\vec{P} ~, \tag{1.23}$$

siendo $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ el momento angular orbital del sistema en el CM. De (1.23) obtenemos la siguiente expresión para el Hamiltoniano "interno" H_1, que sólo depende de $\vec{r}$, $\vec{p}$ y paramétricamente de $\vec{R}$:

$$H_1(\vec{R}) = \frac{1}{2\mu}\vec{p}^{\,2} + U_{12}(\vec{r}) - \vec{B}(\vec{R})\cdot\vec{M} ~, \tag{1.24}$$

donde $\vec{M}$ es el momento magnético:

$$\vec{M} = \frac{e_1}{2M}\left(\frac{m_2}{m_1} - \frac{m_1}{m_2}\right)\vec{L} ~. \tag{1.25}$$

Si $m_1 \ll m_2$, como en el átomo de Hidrógeno,

$$\vec{M} \simeq \frac{e_1}{2m_1}\vec{L} ~. \tag{1.26}$$

Procedamos análogamente al caso electrostático y siguiendo el esquema desarrollado anteriormente correspondiente a la aproximación adiabática, tomemos la solución:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r},\vec{R},t) &\simeq u_n(\vec{R},t)\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) ~, \\ 0 &= \left[H_1(\vec{R}) - E_n(\vec{R})\right]\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) ~, \end{aligned} \tag{1.27}$$

como en (1.11). Llegamos a la siguiente ecuación de Schrödinger para la función del CM $u_n(\vec{r},\vec{R})$ análoga a la ecuación (1.12):

$$i\hbar\frac{\partial u_n(\vec{R},t)}{\partial t} \simeq \left(H_0 + E_n(\vec{R})\right)u_n(\vec{R},t) ~. \tag{1.28}$$

En principio $H_0 = H - H_1$ debiera contener, junto con $\vec{P}^2/2M$, el término,

$$-\frac{e_1\vec{B}(\vec{R})}{2\mu}\vec{R}\times\vec{p} - \frac{e_1\vec{B}(\vec{R})}{2M}\vec{r}\times\vec{P} ~, \tag{1.29}$$

presente en (1.23). No obstante, debido a la rapidez de los movimientos atómicos en comparación con los macroscópicos, $\vec{p}$ y $\vec{r}$ se promedian a cero y (1.29) puede ser despreciado a la hora de estudiar el movimiento del CM. Por lo tanto, sólo queda la contribución de $E_n(\vec{R})$ al potencial final que sufre el CM con:

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2m}\vec{P}^2 , \\ M\frac{d^2\vec{R}}{dt^2} &= -\frac{\partial E_n(\vec{R})}{\partial \vec{R}} . \end{aligned} \tag{1.30}$$

Explícitamente $\Phi_n(\vec{r},\vec{R})$ satisface:

$$\left(\frac{1}{2\mu}\vec{p}^{\,2} + U_{12}(\vec{r}) - \mu_0 \vec{L}\cdot\vec{B}(\vec{R})\right)\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) = E_n(\vec{R})\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) . \tag{1.31}$$

De nuevo, en este caso la dependencia de $\Phi_n(\vec{r},\vec{R})$ respecto de $\vec{R}$ es paramétrica debido a la dependencia de $\vec{B}$, que volvemos a reiterar que se trata de una dependencia macroscópica. Por otra parte, $\mu_0 = e_1/2m_1$, y su módulo es igual al magnetón de Bohr si la partícula en cuestión es un electrón.

El subíndice n en $\Phi_n(\vec{r},\vec{R})$ hace referencia a un conjunto completo de observables que caracterizan el estado interno del sistema. Un caso típico es que $U_{12}(\vec{r}) = U_{12}(|\vec{r}|)$, es decir, que sólo dependa del módulo de $\vec{r}$, que en adelante designaremos sin más r. Ésta será una convención habitual, los módulos de los vectores se designarán por la misma letra que indica el vector pero sin la flecha. De este modo es directo comprobar que:

$$\left[\vec{L}\cdot\vec{B}, \frac{1}{2\mu}\vec{p}^{\,2} + U_{12}(r)\right] = 0 \ , \ \left[\vec{L}\cdot\vec{B}, \vec{L}^2\right] = 0 \ , \ \left[\vec{L}\cdot\vec{B}, H_1\right] = 0 \ . \tag{1.32}$$

Así, se pueden buscar autofunciones simultáneas [1] de H_1, $\vec{L}^2$ y de $L_\parallel \equiv \vec{L}\cdot\vec{B}/|\vec{B}|$, la proyección del momento angular orbital sobre el vector $\vec{B}$. Dichas autofunciones las podemos designar por $\mathcal{R}_{n\ell}(r)Y_\ell^m(\theta,\phi)$, que satisfacen:

$$\mu_0 B(\vec{R}) L_\parallel \mathcal{R}_{n\ell}(r) Y_\ell^m(\theta,\phi) = \mu_0 B(\vec{R})\hbar m \mathcal{R}_{n\ell}(r) Y_\ell^m(\theta,\phi) , \tag{1.33}$$

con lo que la autoenergía $E_{n\ell m}(\vec{R})$ depende del autovalor de $\vec{L}_\parallel$ y del campo magnético $\vec{B}(\vec{R})$ que varía macroscópicamente con $\vec{R}$. Es útil escribir la energía como:

$$E_{n\ell m}(\vec{R}) = E^0_{n\ell} - \mu_0 \hbar m B(\vec{R}) , \tag{1.34}$$

donde $E^0_{n\ell}$ es la energía en ausencia de campo magnético. La dependencia en $\vec{R}$ de $E_{n\ell m}$, de acuerdo a (1.30), da lugar a la siguiente aceleración en el movimiento del CM:

$$M\frac{d^2\vec{R}}{dt^2} = \mu_0 \hbar m \frac{\partial B(\vec{R})}{\partial \vec{R}} , \tag{1.35}$$

con lo que la aceleración que actúa sobre el CM da lugar a un movimiento macroscópico del mismo, tal que, su velocidad varía sobre distancias macroscópicas aunque la aceleración dependa

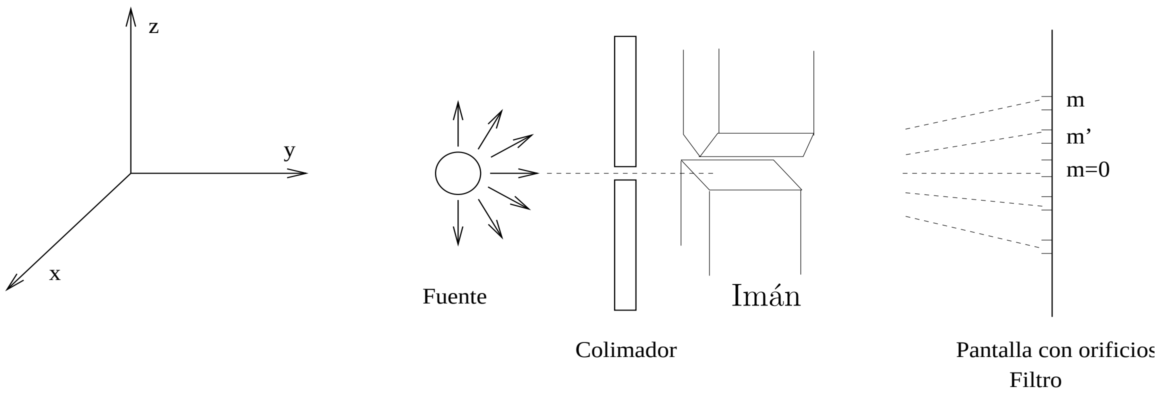

Figura 1.2: Experimento de Stern-Gerlach. Las partículas se mueven de izquierda a derecha. Los distintos elementos están indicados en la figura.

del estado interno del sistema y éste es el punto fundamental. En la figura 1.2 se representa esquemáticamente el proceso de un dispositivo de Stern-Gerlach:

Al principio el CM se mueve sin influencia del imán ya que las energías internas, designadas genéricamente por E_n, no dependen de $\vec{R}$ ni tampoco las Φ_n. Luego el CM pasa por el imán con lo que tenemos la transición $u^0(\vec{R},t)\Phi_n(\vec{r}) \to u_n(\vec{R},t)\Phi_n(\vec{r},\vec{R})$ y el movimiento del CM se ve afectado por el estado cuántico interno del sistema. Hemos designado por $u^0(\vec{R},t)$ el tren de ondas libres inicial correspondiente al movimiento del CM. Cuando se pasa totalmente por el imán de nuevo el movimiento macroscópico del CM y el interno se desacoplan y tenemos $u_n(\vec{R},t)\Phi_n(\vec{r})$. No obstante, algo muy importante ha ocurrido, ya que cada tren de ondas final $u_m(\vec{R},t)$ es diferente de cero en una región $V_m(t)$ que no se solapa con $V_{m'}(t)$ para $m' \neq m$. De este modo, podemos distinguir entre distintos momentos magnéticos internos del sistema, ver la fórmula (1.35). Esto se indica en la figura 1.2 en el panel de la derecha donde se han realizado orificios para dejar pasar selectivamente los haces con m diferentes. Detallemos estas afirmaciones en ecuaciones. Todas las funciones de onda están normalizadas a uno:

$$\begin{aligned}\int d^3r \Phi_m^*(\vec{r},\vec{R})\Phi_{m'}(\vec{r},\vec{R}) &= \delta_{m,m'} ~, \\ \int d^3R |u_m(\vec{R},t)|^2 &= 1 ~, \\ \int d^3R\, d^3r\, |u_m(\vec{R},t)\Phi_m(\vec{r},\vec{R})|^2 &= 1 ~. \end{aligned} \tag{1.36}$$

Sigamos la evolución del tren de ondas siguiendo el esquema indicado en la figura 1.2. A la izquierda del imán $\vec{B}=0$ y tenemos como función de onda genérica del sistema una superposición lineal de las funciones de onda $\Psi(\vec{r},\vec{R},t)$ del tipo (1.10):

$$\Psi_0(t) = u^0(\vec{R},t)\sum_m C_m e^{-iE_m t/\hbar}\,\Phi_m(\vec{r}) ~. \tag{1.37}$$

Para tiempos posteriores, la linealidad de la ecuación de ondas implica:

$$\Psi_0(t) \to \Psi(t) = \sum_m C_m u_m(\vec{R},t)\Phi_m(\vec{r},\vec{R}) ~.$$

Al salir de nuevo a la zona sin campo magnético, tras pasar por el imán,

$$\Psi(t) = \sum_n C_m u_m(\vec{R}, t)\Phi_m(\vec{r}). \tag{1.38}$$

Queda establecida pues una correlación entre el movimiento del CM y el estado interno del sistema, y esta correlación es unívoca. Así, si encontramos un átomo en $V_m(t)$ esto implica que tiene un momento magnético $\mu_0\hbar m$ y por lo tanto está en el estado interno Φ_m.

¿Qué fracción del haz pasa a través de la pantalla con un orificio que deja pasar aquellos átomos contenidos en $V_m(t)$?. Para ello hemos de integrar la distribución de probabilidad espacial $|\Psi(\vec{r}, \vec{R}, t)|^2$ en el instante de tiempo t sobre la región $V_m(t)$, esto es:

$$\int_{V_m(t)} d^3R \int d^3r |\Psi(\vec{r}, \vec{R}, t)|^2 = \int_{V_m(t)} d^3R \int d^3r \left| \sum_{m'} C_{m'} u_{m'}(\vec{R}, t)\Phi_{m'}(\vec{r}) \right|^2 . \tag{1.39}$$

Teniendo en cuenta que $u_m(\vec{R}, t)$ representan trenes de ondas localizados para el movimiento del CM y dado que $V_m(t) \bigcap V_{m'}(t) = \emptyset$ para $m \neq m'$, los términos de interferencia en la expresión anterior se anulan puesto que los distintos trenes de ondas no se solapan. Sólo permanece la suma de los términos diagonales,

$$\sum_{m'} |C_{m'}|^2 \int_{V_m(t)} d^3R \, |u_{m'}(\vec{R}, t)|^2 = |C_m|^2 . \tag{1.40}$$

Se ha empleado que $u_m(\vec{R}, t)$ está localizada en $V_m(t)$.

Se llega pues a la siguiente conclusión importante sobre el significado físico de $|C_m|^2$. Vemos que es la probabilidad de que el momento magnético sea $\hbar\mu_0 m$ para un conjunto de sistemas cuyo estado viene dado por $\sum_m C_m \Phi_m$ y por lo tanto, además,

$$\sum_m |C_m|^2 = 1 . \tag{1.41}$$

La misma interpretación de C_m como amplitud de probabilidad se sigue de obtener la probabilidad de encontrar la coordenada relativa $\vec{r}$ sin detectar $\vec{R}$. Haciendo uso de nuevo de la interpretación del módulo al cuadrado de la función de onda como distribución de probabilidad de presencia espacial, tenemos que la correspondiente distribución de probabilidad es:

$$W(\vec{r}, t) = \int d^3R \, | \sum_m C_m u_m(\vec{R}, t)\Phi_m(\vec{r}, \vec{R})|^2 . \tag{1.42}$$

Donde se integra sobre todo valor posible de $\vec{R}$ ya que éste no se detecta.

A la derecha del imán, teniendo en cuenta de nuevo que las distintas funciones de onda $u_m(\vec{R}, t)$ están localizadas en la región $V_m(t)$, resulta:

$$W(\vec{r}, t) = \sum_m |C_m|^2 |\Phi_m(\vec{r})|^2 . \tag{1.43}$$

Así $|C_m|^2$ aparece de nuevo como la probabilidad de que el sistema esté en el estado $\Phi_m(\vec{r})$.

Fijémonos que antes de entrar en la zona del imán esa probabilidad es:

$$W_0(\vec{r},t) = |\sum_m C_m e^{-iE_m t/\hbar}\Phi_m(\vec{r})|^2 \ . \tag{1.44}$$

En el estado original $u_m^0(\vec{R},t)\sum_m C_m e^{-iE_m t/\hbar}\Phi_m(\vec{r})$, las fases relativas entran en la distribución de probabilidad, pero esto no ocurre para la misma distribución de probabilidad calculada después de la medida, ver expresión (1.43). Es decir, ha tenido lugar una pérdida de coherencia al desaparecer la interferencia inicialmente presente en (1.44), como consecuencia de la realiazación del experimento.

Analicemos a continuación cuál es el tiempo mínimo necesario para llevar a cabo el experimento de Stern-Gerlach que estamos discutiendo y que está representado en la figura 1.2. Esto será un ejemplo de la llamada relación de incertidumbre energía-tiempo. Si los colimadores en el plano x-z tienen una anchura a, el haz se irá ensanchando con el tiempo debido a la relación de incertidumbre posición-momento. En la dirección z este ensanchamiento mínimo $\Delta Z(t)$ viene dado aproximadamente por:

$$\begin{aligned}\Delta p_z &\simeq \frac{\hbar}{a} \ , \\ \Delta Z(t) &\simeq \frac{\hbar}{a}\frac{t}{M} \ ,\end{aligned} \tag{1.45}$$

ya que la velocidad es p_z/M.

La separación entre haces producida por $\vec{B}$ debe ser mayor que la ΔZ. Designando por Z la tercera coordenada del movimiento del CM, de la ecuación (1.30) tenemos:

$$M\frac{d^2Z}{dt^2} = -\frac{\partial E_m}{\partial Z} \ , \tag{1.46}$$

no hay aceleración en otras direcciones debido a la geometría del imán en la figura 1.2 y estudiamos la trayectoria correspondiente al estado interno m-ésimo. Tomando $\partial E_m/\partial Z$ constante,

$$Z_m(t) = -\frac{1}{2M}\frac{\partial E_m}{\partial Z}t^2 \ . \tag{1.47}$$

Para que se puedan distinguir los distintos haces es necesario que:

$$|Z_m(t) - Z_{m'}(t)| \gg \Delta Z(t) \ , \tag{1.48}$$

empleando (1.47), la desigualdad anterior implica:

$$\begin{aligned}\frac{t^2}{2M}|\frac{\partial E_m}{\partial Z} - \frac{\partial E_{m'}}{\partial Z}| &\gg \frac{\hbar}{a}\frac{t}{M} \ , \\ \frac{1}{2}at|\frac{\partial(E_m - E_{m'})}{\partial Z}| &\gg \hbar \ .\end{aligned} \tag{1.49}$$

Si L es la longitud característica de variación de $\vec{B}$, a lo largo de la cual $\vec{B}$ varía apreciablemente,

$$\frac{\partial(E_m - E_{m'})}{\partial Z} \simeq \frac{E_m - E_{m'}}{L} \; . \tag{1.50}$$

Teniendo en cuenta que $a < L$, ya que si no diferentes partes del haz estarían sometidas a campos distintos y no valdría nuestra descripción del experimento, y sustituyendo (1.50) en la condición (1.49), resulta,

$$\frac{t}{2}|E_m - E_{m'}| \gg \hbar \; , \tag{1.51}$$

con lo que el tiempo mínimo t_{min} debe satisfacer:

$$t_{min} \gtrsim \frac{\hbar}{|E_m - E_{m'}|} \sim 4 \times 10^{-15}\, s \; , \tag{1.52}$$

donde las diferencias de energías se han tomado del orden del eV.

La desigualdad anterior también se puede escribir como $t_{min}\Delta E \gtrsim \hbar$ recordando la relación de incertidumbre de los operadores momento-posición que veremos más en detalle en el capítulo 2.4. No obstante se ha de tener en cuenta que el tiempo es sólo un parámetro en la teoría y no es un operador canónicamente conjugado de la energía.

1.2. Formalismo de la matriz densidad

Podemos citar dos cuestiones relevantes no respondidas adecuadamente en el apartado anterior:

1. No hemos incluido en nuestro estudio el aparato necesario para medir la coordenada del CM $\vec{R}$. ¿Qué consecuencia conlleva engrandecer el sistema incluyendo a su vez dicho aparato en el estudio dinámico del proceso de medida?.

2. Para concluir que C_m es una amplitud de probabilidad hemos empleado la interpretación de Born de la función de onda como amplitud de probabilidad de presencia. ¿Hasta qué punto son independientes ambos hechos?.

En relación a estas cuestiones, tratadas adecuadamente en las dos próximas secciones, introducimos el formalismo de la matriz densidad. Hasta ahora hemos tratado con estados que vienen dados por un vector o ket dentro de un espacio de Hilbert. Esto se aplica cuando describimos sistemas idénticamente preparados encontrándose todos ellos en el mismo estado. El valor esperado de cualquier observable A es:

$$\begin{aligned}
\langle\Psi|A|\Psi\rangle &= \int \Psi(\vec{x},t)^*\langle\vec{x}|A|\vec{x}\,'\rangle\Psi(\vec{x}\,',t)d^3x\,d^3x' \\
&= \int \langle\Psi(t)|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|A|\vec{x}\,'\rangle\langle\vec{x}\,'|\Psi(t)\rangle d^3x\,d^3x' = \int \langle\vec{x}|A|\vec{x}\,'\rangle\langle\vec{x}\,'|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|\vec{x}\rangle d^3x\,d^3x' \; , \\
&= Tr\left(A|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|\right) \; .
\end{aligned} \tag{1.53}$$

El operador proyector sobre el estado $|\Psi(t)\rangle$,

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)| \; , \tag{1.54}$$

se suele designar como operador densidad para el estado puro o ket $|\Psi(t)\rangle$. Es directo comprobar que:

$$\begin{aligned} \rho^2(t) &= |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)| = \rho(t) \ , \\ Tr(\rho(t)) &= 1 \ . \end{aligned} \tag{1.55}$$

En el espacio de coordenadas,

$$\langle\vec{x}|\rho(t)|\vec{x}\,'\rangle = \Psi(\vec{x},t)\Psi(\vec{x}\,',t)^* \ . \tag{1.56}$$

Ésta es la misma notación que la empleada en la ecuación (1.53) para designar el elemento de matriz de un operador genérico en la base de posiciones $\langle\vec{x}|A|\vec{x}\,'\rangle$, así, por ejemplo, para el operador de posición $\vec{X}$, que es un operador local, tenemos simplemente $\langle\vec{x}|\vec{X}|\vec{x}\,'\rangle = \vec{x}\,\delta(\vec{x}-\vec{x}\,')$.

Sin embargo, no todos los sistemas vienen descritos por un ket, es decir, no son estados puros sino que corresponden a una mezcla de estados. Recordemos que en MC cuando tenemos N sistemas idénticos preparados de igual modo el valor promedio de un observable A, $\langle A\rangle$, se define como:

$$\langle A\rangle = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} a_i \ , \tag{1.57}$$

con a_i el resultado de la medida de A en el i-ésimo sistema. En una mezcla cada uno de los N sistemas idénticos está en un estado puro determinado, de modo que hay una probabilidad w_1 de estar en el estado puro $|\alpha_1\rangle$, otra posibilidad w_2 de estar en $|\alpha_2\rangle$ y así sucesivamente. Por ejemplo, si pensamos en un haz de partículas éste corresponde a un estado puro cuando todas sus partículas están en el mismo estado y a una mezcla cuando cada partícula pueda estar en un estado puro distinto con una cierta probabilidad. De acuerdo a la expresión (1.53) y a la definición (1.57), tenemos:

$$\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{n} w_i\,\langle\alpha_i|A|\alpha_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} w_i\langle A\rangle_i \ , \ \sum_{i=1}^{n} w_i = 1 \ . \tag{1.58}$$

El resultado anterior lo podemos reescribir como:

$$\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{N} w_i \sum_{j,j'}\langle\alpha_i|b_j\rangle\langle b_j|A|b_{j'}\rangle\langle b_{j'}|\alpha_i\rangle \ , \tag{1.59}$$

con $\{|b_j\rangle\}$ una base. La expresión anterior la podemos reordenar como:

$$\langle A\rangle = \sum_{j,j'}\langle b_j|A|b_{j'}\rangle\langle b_{j'}|\left(\sum_{i=1}^{N} w_i|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\right)|b_j\rangle = Tr\left(\rho A\right) \ , \tag{1.60}$$

siendo ρ la matriz densidad para una mezcla de estados:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{i=1}^{N} w_i|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \ , \\ \sum_{i=1}^{n} w_i &= 1 \ . \end{aligned} \tag{1.61}$$

Introduciendo de nuevo la resolución de la identidad $1 = \sum_j |b_j\rangle\langle b_j|$,

$$Tr(\rho) = \sum_{i=1}^{N} \sum_j w_i \alpha_i(b_j)\alpha_i(b_j)^* = \sum_i w_i = 1 \ , \tag{1.62}$$

así pues $Tr(\rho) = 1$. Además, también vemos de (1.61) que ρ es un operador autoadjunto, $\rho^\dagger = \rho$.

Los estados $|\alpha_i\rangle$ que aparecen en ρ no necesitan ser ortogonales, ni tan siquiera linealmente independientes. Supongamos que los $|\alpha_i\rangle$ son ortogonales (por ejemplo correspondientes a distintas proyecciones de espín), y calculemos ρ^2:

$$\rho^2 = \sum_{i,j} w_i w_j |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| = \sum_{ij} w_i w_j |\alpha_i\rangle \delta_{ij} \langle\alpha_j| = \sum_i w_i^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \neq \rho \ . \tag{1.63}$$

De la expresión anterior queda claro que para estados mezcla $Tr(\rho^2) = \sum w_i^2 < 1$, dado que $0 \leq w_i < 1$. Sólo para estados puros se tiene que $Tr(\rho^2) = 1$, como hemos visto. Este resultado es completamente general dado que al ser ρ hermítica podemos proceder a su diagonalización:

$$\rho = \sum w_a |a\rangle\langle a| \ , \ \ \langle a|a'\rangle = \delta_{aa'} \ , \ \ \sum_a w_a = 1 \ , \ \ w_a > 0 \ . \tag{1.64}$$

El que los autovalores w_a han de ser positivos se sigue inmediatamente del significado físico de ρ. Matemáticamente se puede demostrar teniendo en cuenta que $Tr(\rho A) > 0$ para cualquier operador definido positivo A. En la base ortonormal en que ρ diagonaliza podemos seguir el procedimiento de (1.63) y se deduce con toda generalidad que $Tr(\rho^2) < 1$ para estados mezcla.

Consideremos ahora la evolución temporal de ρ.

$$\begin{aligned} \rho(0) &= \sum_i w_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \ , \ \ t = 0 \ , \\ \rho(t) &= \sum_i w_i |\alpha_i(t)\rangle\langle\alpha_i(t)| \ , \ \ t > 0. \end{aligned} \tag{1.65}$$

Teniendo en cuenta la ecuación de evolución de los estados,[#2]

$$i\hbar \frac{d|\alpha(t)\rangle}{dt} = H|\alpha(t)\rangle \ , \tag{1.66}$$

con H el Hamiltoniano, tenemos:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\rho(t)}{\partial t} &= \sum_i w_i H |\alpha_i(t)\rangle\langle\alpha_i(t)| - \sum_i w_i |\alpha_i(t)\rangle\langle\alpha_i(t)| H \\ &= [H, \rho(t)] = -\left[\rho(t), H\right] \ . \end{aligned} \tag{1.67}$$

Este resultado cuántico es análogo al Teorema de Liouville de mecánica clásica. El primero se expresa en términos del conmutador entre ρ y H y el segundo en términos de los corchetes de Poisson de ambas variables dinámicas:

$$\frac{\partial \rho_{\text{clásica}}(\vec{r}, \vec{p}, t)}{\partial t} = -\left[\rho_{\text{clásica}}(\vec{r}, \vec{p}, t), H\right] \ . \tag{1.68}$$

[#2]Ver la ecuación (3.14).

Una consecuencia fundamental de la ley de evolución (1.67) es que $Tr(\rho^2)$ es un invariante de movimiento. En efecto:

$$i\hbar\frac{d}{dt}Tr(\rho^2(t)) = 2Tr\left(i\hbar\frac{d\rho(t)}{dt}\rho(t)\right) = 2Tr\left([H,\rho(t)]\rho(t)\right) = 0 \ , \tag{1.69}$$

debido a la propiedad cíclica de la traza[#3]. Como consecuencia, no se puede transitar de un estado puro a una mezcla de estados y viceversa según las leyes de la mecánica cuántica.

Ejemplo: Matriz densidad para un haz de partículas de espín 1/2.

Tomemos los siguientes pesos o probabilidades respecto de estados con componentes de espín según los ejes z y x:

$$w(S_z+) = 0{,}75 \ , \ w(S_x+) = 0{,}25 \ . \tag{1.70}$$

Trabajando en la base con tercera componente de espín definida según el eje z, tenemos:

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \\ S_x|X_x+\rangle &= +\frac{\hbar}{2}|S_x+\rangle \ , \\ |X_x+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z-\rangle \ . \end{aligned} \tag{1.71}$$

Por lo tanto,

$$\rho = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{8}\left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right]\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} 7/8 & 1/8 \\ 1/8 & 1/8 \end{pmatrix} \ . \tag{1.72}$$

Aplicando la fórmula (1.60) tenemos los siguientes valores esperados para las distintas componentes de espín que definen la polarización del haz:

$$\begin{aligned} \langle S_x\rangle &= Tr(\rho S_x) = Tr\left[\begin{pmatrix} 7/8 & 1/8 \\ 1/8 & 1/8 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right] = \frac{\hbar}{8} \ , \\ \langle S_y\rangle &= Tr(\rho S_y) = Tr\left[\begin{pmatrix} 7/8 & 1/8 \\ 1/8 & 1/8 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right] = 0 \ , \\ \langle S_z\rangle &= Tr(\rho S_z) = Tr\left[\begin{pmatrix} 7/8 & 1/8 \\ 1/8 & 1/8 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right] = \frac{3}{8}\hbar \ . \end{aligned} \tag{1.73}$$

1.2.1. *Mecánica estadística cuántica

Un estado puro viene dado por:

$$\rho = diagonal(0,0,...,1,..,0,0) \ , \tag{1.74}$$

siendo el estado puro parte de la base en que se ha representado ρ. Por otra parte, si tenemos un estado mezcla completamente aleatorio,

$$\rho = \frac{1}{N}\,diagonal(1,1,...,1,1) \ . \tag{1.75}$$

[#3] $Tr(AB) = Tr(BA)$, con A y B dos operadores lineales

Veamos una magnitud que caracteriza el grado de desorden de pasar de un estado puro al caso de máximo desorden correspondiente al estado aleatorio,

$$\sigma = -Tr(\rho \log \rho) = -\sum_n \rho_{nn} \log \rho_{nn} \ , \tag{1.76}$$

dado que las dos matrices densidad anteriores son diagonales. Para un estado puro (1.74) $\sigma = 0$ ya que o bien $\rho_{kk} = 0$ o $\log \rho_{kk}$=0 dado que $\rho_{kk} = 1$ o 0. Para el estado aleatorio,

$$\sigma = -\sum_{k=1}^{N} \frac{1}{N} \log \frac{1}{N} = \log N \ . \tag{1.77}$$

Dado este hecho, en lo que sigue definimos la entropía del sistema como $S = k\sigma$, siendo k la constante de Boltzmann.

$$S = k\sigma = -kTr(\rho \log \rho) \ . \tag{1.78}$$

La aparición de $\log \rho$ en S hace que ésta sea una magnitud de carácter extensivo, propiedad fundamental de la entropía. Para demostrar esta afirmación supongamos que los estados vienen caracterizados por las variables $a'_1, ..., a'_n$ que son independientes entre sí:

$$\rho = \sum_{a'_1,...,a'_n} |a'_1...a'_n\rangle p(a'_1, ..., a'_n)\langle a'_1...a'_n| \ . \tag{1.79}$$

La suposición de independencia, implica que:

$$\begin{aligned} |a'_1\, a'_2...a'_n\rangle &= |a'_1\rangle|a'_2\rangle...|a'_n\rangle \ , \\ p(a'_1, a'_2, ..., a'_n) &= p(a'_1)p(a'_2)...p(a'_n) \ . \end{aligned} \tag{1.80}$$

De esta forma (1.79) se puede reescribir de una forma más simple como:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{a'_1,...,a'_n} |a'_1\rangle p(a'_1)\langle a'_1| \cdot |a'_2\rangle p(a'_2)\langle a'_2| \cdot ... \cdot |a'_n\rangle p(a'_n)\langle a'_n| = \prod_{i=1}^{n} \rho_i \ , \\ \rho_i &= \sum_{a'_i} |a'_i\rangle p_i(a'_i)\langle a'_i| \ . \end{aligned} \tag{1.81}$$

Con este resultado para la matriz densidad la entropía S es una suma sobre las entropías asociadas con las distintas variables independientes a'_i:

$$S = -kTr(\rho \log \rho) = -kTr\left(\prod_{i=1}^{n} \rho_i \sum_{j=1}^{n} \log \rho_j\right) = \sum_{j=1}^{n} -kTr(\rho_j \log \rho_j) = \sum_{i=1}^{n} S_i \ , \tag{1.82}$$

y en efecto S es una magnitud extensiva.

Cálculo de ρ para un sistema en equilibrio térmico. Tomemos el caso de un conjunto canónico donde la energía se conserva así como la probabilidad de presencia o número de partículas. Cuando se alcance el equilibrio térmico se debe tener,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \ , \tag{1.83}$$

con lo que de (1.67), $\rho(t)$ y H conmutan y por lo tanto se puede encontrar una base conjunta que diagonalice simultáneamente a ambos operadores. Además tendremos que satisfacer el siguiente conjunto de ecuaciones:

- El sistema alcanza el equilibrio cuando $S = \sum_k \rho_k \log \rho_k$ es máxima:

$$\delta S = 0 = \sum_k \delta\rho_{kk}(1 + \log \rho_{kk}) \; . \tag{1.84}$$

- Para una energía dada, $\langle E \rangle = \sum_k \rho_{kk} E_k$, ésta se conserva:

$$\delta \langle E \rangle = 0 = \sum_k \delta\rho_{kk} E_k \; . \tag{1.85}$$

- Conservación del número de partículas, $\sum_k \rho_{kk} = 1$,

$$\delta Tr\rho = 0 = \sum_k \delta\rho_{kk} \; . \tag{1.86}$$

Empleamos el método de los multiplicadores de Lagrange dado que las ρ_{kk} están sujetas a las condiciones adicionales (1.85) y (1.86), tenemos:

$$\sum_k \delta\rho_{kk}(1 + \log \rho_{kk} + \beta E_k + \gamma) = 0 \; , \tag{1.87}$$

con β y γ los multiplicadores de Lagrange asociados a las condiciones (1.85) y (1.86), respectivamente. Dado que las ρ_{kk} se consideran ahora arbitrarias, de la ecuación anterior resulta:

$$\log \rho_{kk} + 1 + \beta E_k + \gamma = 0 \; , \tag{1.88}$$

despejando,

$$\rho_{kk} = \exp(-\beta E_k - 1 - \gamma) \; . \tag{1.89}$$

Imponiendo $\sum_k \rho_{kk} = 1$ obtenemos:

$$\exp(1 + \gamma) = \sum_k \exp(-\beta E_k) \; , \tag{1.90}$$

con lo que:

$$\rho_{kk} = \frac{e^{-\beta E_k}}{\sum_l e^{-\beta E_l}} \; . \tag{1.91}$$

Los desarrollos anteriores se han realizado en la base que diagonaliza la energía. La expresión (1.91) se puede escribir a nivel operacional como:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\mathcal{Z}} \; , \tag{1.92}$$

siendo

$$\mathcal{Z} = Tr(e^{-\beta H}) \ , \tag{1.93}$$

la función de partición para un conjunto canónico. Por otra parte $\beta = 1/kT$, siendo k la constante de Boltzmann y T la temperatura. Esta identificación se deduce sin más que comparando con mecánica estadística clásica la fórmula para la energía interna del sistema por constituyente, U.

$$U = Tr(\rho H) = \frac{\sum_k E_k e^{-\beta E_k}}{\sum_l e^{-\beta E_l}} = -\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta} \ . \tag{1.94}$$

Que es la misma fórmula que se obtiene en mecánica estadística clásica identificando $\beta = 1/kT$.

Calculemos finalmente la energía libre, F:

$$\begin{aligned} F = U - TS &= -\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta} + kT\,Tr\left(\frac{e^{-\beta H}}{\mathcal{Z}} \log \frac{e^{-\beta H}}{\mathcal{Z}}\right) = -\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta} + kT\,Tr\left(\frac{e^{-\beta H}}{\mathcal{Z}}[-\beta H - \log \mathcal{Z}]\right) \\ &= -\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta} - \frac{1}{\mathcal{Z}} Tr(H e^{-\beta H}) - kT \log \mathcal{Z} = -kT \log \mathcal{Z} \ , \end{aligned} \tag{1.95}$$

donde hemos tenido en cuenta la expresión anterior para la energía interna por constituyente U.

1.3. Propiedades de coherencia de los estados que siguen a un experimento

Sigamos con nuestro análisis del experimento de Stern-Gerlach. Una vez pasado el campo magné-tico la función de onda se puede escribir como:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}, t) = \sum_m C_m u_m(\vec{R}, t) \Phi_m(\vec{r}) \ , \tag{1.96}$$

tal y como hemos visto (1.38). Las distintas trayectorias de los átomos están unívocamente vinculadas con el estado interno del sistema. Así, $\vec{R}$ nos sirve como el distintivo que unívocamente nos fija dicho estado interno, ya que dichas trayectorias son macroscópicamente separables para m distintas. La matriz densidad correspondiente al estado (1.96) es

$$\langle \vec{r}\vec{R}|\rho(t)|\vec{r}\,'\vec{R}'\rangle = \sum_{m,m'} C_m C_{m'}^* u_m(\vec{R}, t) \Phi_m(\vec{r}) u_{m'}^*(\vec{R}', t) \Phi_{m'}^*(\vec{r}\,') \ , \tag{1.97}$$

con lo que el valor medio de cualquier operador A es:

$$\langle A \rangle = Tr(\rho A) = \int d^3r\, d^3r'\, d^3R\, d^3R' \langle \vec{r}\vec{R}|\rho(t)|\vec{r}\,'\vec{R}'\rangle \langle \vec{r}\,'\vec{R}'|A|\vec{r}\vec{R}\rangle \ , \tag{1.98}$$

donde se ha insertado la resolución de la identidad $1 = \int d^3r\, d^3R\, |\vec{r}\vec{R}\rangle\langle \vec{R}\vec{r}|$.

Supondremos que el operador A no mezcla regiones separadas macroscópicamente y así,

$$\langle \vec{r}\,'\vec{R}'|A|\vec{r}\vec{R}\rangle \ , \tag{1.99}$$

no dará contribución a (1.98) a no ser que $\vec{R}$ y $\vec{R}'$ pertenezcan a una misma región $V_m(t)$, ya que de lo contrario $\vec{R}$ y $\vec{R}'$ pertenecen a regiones macroscópicamente separables que no son conectadas por A. Se deduce de esto una importante consecuencia: Es imposible distinguir la matriz densidad ρ (1.97) de la matriz densidad $\hat{\rho}$ que no involucra términos de interferencia,

$$\langle \vec{r}\vec{R}|\hat{\rho}(t)|\vec{r}\,'\vec{R}'\rangle = \sum_m |C_m|^2 u_m(\vec{R},t)\Phi_m(\vec{r})u_m^*(\vec{R}',t)\Phi_m^*(\vec{r}\,') \ , \tag{1.100}$$

para todos aquellos tiempos t en que $V_m(t)$ y $V_{m'}(t)$ estén macroscópicamente separados. Fijémonos que como consecuencia de la pérdida de las fases de C_m en $\hat{\rho}$, también llamada pérdida de coherencia, $\hat{\rho}$ corresponde a un estado mezcla ya que:

$$Tr(\hat{\rho}^2) = \sum_m |C_m|^4 < 1 \ . \tag{1.101}$$

En ρ las fases de los coeficientes C_m son relevantes. En $\hat{\rho}$ se han perdido. Sin embargo no podemos distinguir experimentalmente entre ρ y $\hat{\rho}$ y ello lleva a decir que *las fases se destruyen en el acto de medida.*

Introduzcamos ahora en nuestro estudio los aparatos de medida "contadores" empleados para determinar la posición del CM una vez pasada la zona del imán en el experimento. Por simplicidad consideramos que cada uno de los $2\ell+1$ contadores posee sólo el grado de libertad z_m (en realidad los contadores son sistemas complejos en sí mismos y poseen un inmenso número de grados de libertad). Hablamos de $2\ell+1$ contadores porque son $2\ell+1$ el número de posibles valores de la proyección del momento angular $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ en una dirección cualquiera. Antes de que los átomos entren en contacto con los contadores, éstos se encuentran en su estado fundamental $\chi_0(z_m,t)$. La interacción átomos-contadores es de la forma $\mathcal{U}(z_m;\vec{R})$ y varía muy lentamente con respecto a las dimensiones atómicas, así que los átomos seguirán su trayectoria semiclásica. Lo verdaderamente importante es que esta interacción obliga al contador correspondiente, una vez pasados los átomos, a ir al estado $\chi_1(z_m,t)$. Dicho estado χ_1 es macroscópicamente distinguible de χ_0 (tenemos de nuevo en mente que dichos estados no se solapan dado que son no nulos sólo en regiones del espacio de los grados de libertad z_m macroscópicamente distinguibles).

Antes de entrar en el aparato de Stern-Gerlach, tomando un solo estado interno Φ_m por simplicidad en la escritura, la función de onda es:

$$\Psi_m(\vec{r},\vec{R},Z,t) = u^0(\vec{R},t)e^{-iE_m t/\hbar}\Phi_m(\vec{r})\prod_n \chi_0(z_n,t) \ , \tag{1.102}$$

donde $Z=\{z_m\}$.

El haz cruza el imán del aparato de Stern-Gerlach y antes de llegar a los contadores, tenemos la función de onda (1.102) evolucionada temporalmente:

$$\Psi_m(\vec{r},\vec{R},Z,t) = u_m(\vec{R},t)\Phi_m(\vec{r})\prod_n \chi_0(z_n,t) \ . \tag{1.103}$$

Después de pasar a través de los contadores, todos ellos, menos el m-ésimo que queda excitado, permanecen en su estado fundamental y tenemos:

$$\Psi_m(\vec{r},\vec{R},Z,t) = u_m(\vec{R},t)\Phi_m(\vec{r})\chi_1(z_m,t)\prod_{n\neq m} \chi_0(z_n,t) \ . \tag{1.104}$$

Para terminar supongamos que el haz resultante se redirige mediante un campo magnético apropiado, tal que:

$$u_m(\vec{R},t) \to u^0(\vec{R},t) e^{i\nu_m} e^{-iE_m t/\hbar} ~, \tag{1.105}$$

de forma que el haz vuelve a moverse en la misma forma que inicialmente. La fase ν_m dependerá en general del camino recorrido para llegar a esa situación desde que el haz abandonó los contadores.

A nivel general, en lugar de un único estado interno Φ_m tendremos una superposición lineal de estados $\sum_m C_m \Phi_m(\vec{r})$. La linealidad de la MC implica que tras el paso de los contadores tengamos la siguiente función de onda final:

$$\Psi(\vec{r},\vec{R},Z,t) = u^0(\vec{R},t) \sum_m C_m e^{i\nu_m} e^{-iE_m t/\hbar} \Phi_m(\vec{r}) \chi_1(z_m,t) \prod_{n\neq m} \chi_0(z_n,t) ~. \tag{1.106}$$

Como $\chi_1(z_m,t)$ y $\chi_0(z_m,t)$ son funciones de onda que no se solapan en el espacio Z puesto que están recluidas a regiones macroscópicamente separadas, resulta pues que la matriz densidad correspondiente al estado puro anterior no se puede distinguir de aquella que resulta de eliminar los términos de interferencia, por una discusión análoga a la empleada en (1.100) pero trasladada ahora a los estados de los contadores $\chi_{0,1}$. Por ejemplo el término de interferencia que involucrase $C_1 C_2^*$ iría multiplicado por:

$$\chi_1(z_1,t)\chi_0(z_2,t)\chi_0^*(z_1',t)\chi_1^*(z_2',t) \prod_{n>2} \chi_0(z_n,t)\chi_0^*(z_n',t) ~, \tag{1.107}$$

pero $\chi_1(z_1,t)$ y $\chi_0^*(z_1',t)$ no pueden conectarse por ningún observable microscópico y estos términos de interferencia desaparecen. Es decir, tras la medida no podemos distinguir nuestro estado puro del estado mezcla correspondiente a la matriz densidad $\hat{\rho}$:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}\vec{R}Z|\hat{\rho}(t)|\vec{r}\,'\vec{R}'Z'\rangle &= u^0(\vec{R},t)u^0(\vec{R}',t)^* \sum_m |C_m|^2 \Phi_m(\vec{r})\Phi_m^*(\vec{r}\,')\, \chi_1(z_m,t)\chi_1^*(z_m',t) \\ &\times \prod_{n\neq m} \chi_0(z_n,t)\chi_0^*(z_n',t) ~. \end{aligned} \tag{1.108}$$

Fijémonos que esta matriz densidad se reduce a:

$$u^0(\vec{R},t)u^0(\vec{R}',t)^* \sum_m |C_m|^2 \Phi_m(\vec{r})\Phi_m^*(\vec{r}\,') ~, \tag{1.109}$$

cuando evaluemos valores esperados de observables que no involucren las variables z_m de los contadores, téngase en cuenta la condición de normalización $\int dz_m \chi_i(z_m,t)^* \chi_i(z_m,t) = 1$. La expresión anterior (1.109) no es una consecuencia de si analizamos o no los contadores, es una consecuencia de la dinámica de interacción entre éstos y el haz. También se desprende de nuevo de dicha expresión el carácter estadístico de los coeficientes $|C_m|^2$, puesto que cualquier valor esperado que sólo involucrase variables internas del sistema se reduciría a $\sum_m |C_m|^2 \langle A\rangle_m$, de acuerdo a nuestra noción clásica del valor medio de una magnitud.

Analicemos a continuación otro experimento para profundizar más en las propiedades de coherencia que siguen a un experimento y veamos un experimento que conlleva una ruptura parcial de coherencia. Tomemos de nuevo un aparato de Stern-Gerlach con una pantalla detrás del imán dotada de dos orificios colocados simétricamente respecto al eje del haz, con una separación ajustable entre ambos. Detrás de esta pantalla colocamos un detector que sólo nos dice si ha pasado por él un átomo pero sin decirnos por cuál agujero, esto podría ser un contador Geiger por ejemplo. La función de onda que representa el haz la escribimos como:

$$\Psi = \sum_{\ell,m} C_{\ell m} u_{\ell m} \Phi_{\ell m} \;, \tag{1.110}$$

donde para cada ℓ es conocido que hay $2\ell + 1$ estados con proyecciones distintas de momento angular sobre un eje arbitrario. El momento magnético asociado a cada ℓ_i será: $\hbar\mu_i\ell_i$, $\hbar\mu_i(\ell_i - 1)$, $\hbar\mu_i(\ell_i - 2)$,... y suponemos que $\mu_i \neq \mu_j$ para $i \neq j$, como correspondería al caso de tener un mismo tipo de átomos pero en estados distintos con distintas ℓ_i. Al ir ajustando la separación de los dos orificios veríamos que para múltiplos de una cierta distancia d_1, proporcional a μ_1, el detector señala la llegada de átomos. De la misma forma encontraríamos las distancias básicas d_2, ..., d_n correspondientes a ℓ_2, ..., ℓ_n. Por lo tanto, manteniendo los orificios a una distancia proporcional a d_i habremos determinado que el momento angular es ℓ_i y no habremos destruido la coherencia en la superposición de los dos estados con proyecciones de momento angular opuestas y cuyo haz pasa a través de los dos orificios. Esto ha sido así porque se trata de un aparato para medir el módulo del momento angular y no el signo de la proyección del momento angular, justamente porque se han dejado dos orificios simultáneamente abiertos y simétricos respecto a la dirección de movimiento libre inicial del CM.

1.4. Interpretación estadística de la mecánica cuántica

Resumamos y generalicemos los resultados del apartado anterior para un proceso de medida genérico.

Sean Φ_m, $m = 1, 2, ..., k$, un conjunto de autofunciones ortonormales del "objeto" de estudio correspondientes al observable genérico Λ. Sean $\chi_0(z_1, z_2, ..., z_N, t)$ la función de onda inicial del "aparato" de medida con variables $(z_1, z_2, ..., z_N)$.

Antes de la medida el sistema global objeto+aparato está en el estado puro:

$$\Psi(t) = \chi_0 \sum_m C_m \Phi_m \;. \tag{1.111}$$

El aparato de medida capaz de medir Λ obliga a la función de onda a correlaciones biunívocas entre el estado final del aparato y los estados internos del haz u objeto:

$$\Psi(t) = \sum_m \chi_m C_m \Phi_m \;. \tag{1.112}$$

Sea $\rho(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$ la matriz densidad del estado puro $|\Psi(t)\rangle$. Definimos a continuación una nueva matriz densidad $\hat{\rho}(t)$, correspondiente a una mezcla de estados, dada por:

$$\hat{\rho} = \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha_1}{2\pi} ... \frac{d\alpha_k}{2\pi}\, \rho \;, \;\; C_m = |C_m| e^{i\alpha_m} \;. \tag{1.113}$$

Es decir, promediamos sobre las fases de los C_m con lo que se eliminan los términos de interferencia.

Un arreglo experimental es un proceso de medida si y sólo si los diferentes χ_m son macroscópicamente distinguibles. Cuando esto es así, $Tr(\rho A) = Tr(\hat{\rho} A)$ para todo observable A concebible. Por consiguiente, el estado puro ρ y la mezcla $\hat{\rho}$ son indistinguibles. En este sentido, es permisible decir que el proceso de medida transforma un estado puro en uno mezcla, a pesar de que $Tr(\rho^2)$ es una rigurosa constante de movimiento.

Veamos que en un experimento realista es imposible determinar el hecho matemático de que $\rho \neq \hat{\rho}$, independientemente del tiempo que dispongamos para realizar dicho experimento. Supongamos de entrada que tratamos nuestro objeto como un solo cuerpo. El tiempo T necesario para que dos trenes de ondas separados una distancia R se solapen, debido al ensanchamiento del tren de ondas, se puede estimar fácilmente a partir del principio de incertidumbre de Heisenberg. Si el tamaño de dicho tren de ondas es a entonces tendremos una dispersión en el momento $\Delta p \simeq \hbar/a$. La velocidad asociada es $\Delta p/M$ con lo que $T \simeq aMR/\hbar$. Para granos de plata, tomando $a \simeq 10^{-4}$ cm, T es del orden de 10^3 años para $R \simeq 10^{-2}$ cm. Sin embargo esto es una estimación insuficiente dado que no tiene en cuenta la complejidad de los granos de plata que involucra muchísimos grados de libertad. Así mismo, el aparato se describe por estados complejos. De este modo se requiere un solapamiento en el espacio de configuración N-dimensional y no sólo en el espacio tridimensional. Además el solapamiento en las distintas variables, cuando éstas son muchas, debe ser prácticamente perfecto, con lo que finalmente es fácil pensar que resultará un valor fantásticamente grande para T.

Una vez establecida la indistinguibilidad de ρ y $\hat{\rho}$ después del proceso de medida, la interpretación de C_m como amplitud de probabilidad se sigue de forma natural, tal y como se señaló anteriormente en (1.109). El punto relevante es que en $\hat{\rho}$ sólo aparecen los módulos al cuadrado $|C_m|^2$, de la misma forma como las probabilidades lo hacen en física estadística. Esta interpretación de C_m como amplitud de probabilidad también fue obtenida en el capítulo 1.1. La diferencia es que ahora no hemos hecho uso de la interpretación de Born de la función de onda como amplitud de probabilidad en el espacio de coordenadas. No obstante, sí se ha utilizado el hecho de que el aparato de la medida se debe encontrar en una región espacial donde no se anule la función de onda en el espacio de coordenadas.

En la formulación de von Neumann del proceso de medida, el énfasis se pone en el incontestable hecho matemático de que $Tr(\rho^2)$ es una constante de movimiento y no se emplea en absoluto que χ_m y $\chi_{m'}$ deban ser macroscópicamente distinguibles. Así, siempre aparecen términos de interferencia y la interpretación de C_m como amplitud de probabilidad no se puede basar en nuestra experiencia clásica. El mantenimiento dentro de esta interpretación de que C_m sea de hecho una amplitud de probabilidad junto con la consistencia de la teoría, llevó a von Neumann a aumentar el cuerpo de leyes básicas de la MC:

- Entre experimentos el estado del sistema evoluciona causalmente de acuerdo con la ecuación de Schrödinger.

- Si una medida ocurre en el tiempo t_0, el estado cambia abruptamente de acuerdo a la prescripción:
$$\rho(t_0) \to \hat{\rho}(t_0) \; . \tag{1.114}$$
Este cambio suele ser conocido como la “reducción del tren de ondas”.

De todos modos, se debe tener claro que no se observa ρ sino $Tr(\rho A)$ y que $Tr(\rho A) = Tr(\hat{\rho} A)$ después del experimento como se ha discutido. También como ya dijimos, para distinguir entre ρ y $\hat{\rho}$ debemos esperar a que la coherencia se restablezca y eso involucraba un tiempo T increíblemente grande. Podemos decir que nuestro error al reemplazar después de una medida ρ por $\hat{\rho}$, debe ser del orden de $\epsilon \sim \Delta t/T$ del que se puede decir que es arbitrariamente preciso, con Δt el intervalo temporal transcurrido desde el paso del sistema por los contadores. La clara ventaja que obtenemos con el análisis seguido en la sección anterior y generalizado en ésta, es que la interpretación habitual de C_m dentro de la MC como amplitud de probabilidad la hemos obtenido sin más que requeriendo la linealidad de la MC y de nuestros conceptos habituales de mecánica estadística clásica.

Finalmente recalcamos que la información máxima que disponemos de un sistema viene dado por su matriz densidad, tanto para un estado puro como para un estado mezcla. La naturaleza estadística de la MC no se puede eliminar empleando una teoría más refinada, por ejemplo haciendo entrar más variables "ocultas" sobre las que se construye a continuación una "mecánica estadística clásica" que al promediar sobre la misma nos reproduzca los resultados cuánticos. Incidiremos más adelante en este interesante punto cuando consideremos las desigualdades de Bell en la sección 9.7.

Capítulo 2

Estados y observables. Descripciones equivalentes

A partir de un análisis muy general de los resultados de un proceso experimental de medida llegaremos en este capítulo de forma natural al formalismo estático de la MC formulado en un espacio de Hilbert. La mecánica ondulatoria, familiar del curso de *Física Cuántica*, aparece como una realización particular de las ecuaciones abstractas de la MC en la base de posiciones. Es muy importante recalcar que este formalismo abstracto sigue siendo válido en el régimen relativista (teoría cuántica de campos), mientras que la mecánica ondulatoria pierde su validez.

2.1. Álgebra de la medida

Sea $\{a'\} = \{a', a'', ...\}$, el conjunto de valores reales que una cierta cantidad física del sistema objeto de estudio puede tomar. Tal cantidad física la llamaremos observable siendo el conjunto $\{a'\}$ el espectro de dicho observable A. En general hay infinitos observables, A, B, C ..., con espectros $\{a'\}$, $\{b'\}$, $\{c'\}$, etc. Supongamos por ahora espectros discretos. Posteriormente se generalizará la discusión a espectros continuos.

Designemos por $M(a')$ el proceso de filtro en virtud del cual se seleccionan sistemas que tienen el valor a' del observable A, de modo que si se hiciese a continuación una medida de A su valor sería con toda seguridad a'. Pensemos por ejemplo en un experimento Stern-Gerlach en el que la pantalla final tiene un orificio que sólo permite pasar el haz con el momento angular $\hbar m$.

Definamos la suma de filtros,

$$M(a') + M(a'') = M(a'') + M(a') \ , \tag{2.1}$$

que representa un filtro que acepta sistemas que tienen el valor a' o el valor a'' del observable A. Por supuesto si sumamos sobre todo el espectro dejamos pasar todos los sistemas, con lo que:

$$\sum_{a'} M(a') = 1 \ . \tag{2.2}$$

En el extremo opuesto tenemos la operación $\emptyset$, para designar aquel filtro que rechaza todo sistema, tal y como ocurriría en el experimento de Stern-Gerlach si tapásemos todos los orificios de la pantalla final.

Dos filtraciones sucesivas de un mismo observable corresponden al producto de dos $M(a')$, el símbolo de la primera filtración se sitúa a la derecha y el símbolo de la segunda a la izquierda,

$$\begin{aligned} M(a'')M(a') &= \delta(a',a'')M(a') \;, & (2.3)\\ \delta(a',a'') &= \begin{cases} 1 & si \quad a'=a'' \\ 0 & si \quad a'\neq a'' \;. \end{cases} & (2.4) \end{aligned}$$

<u>Observables compatibles</u>. Dos observables A_1 y A_2 son compatibles si todo sistema que haya sido preparado con un valor determinado, a_1', de A_1, sigue conservando dicho valor tras pasar por un filtro asociado con el observable A_2, de lo contrario se dice que son observables incompatibles. Así la aplicación sucesiva de dos filtros A_1, A_2, con A_1 y A_2 dos observables compatibles, selecciona un sistema en el que A_1 y A_2 tienen los valores fijos a_1' y a_2', respectivamente. Dicho proceso lo designamos por $M(a_1'a_2')$,

$$M(a_1'a_2') = M(a_1')M(a_2') = M(a_2'a_1') \;, \tag{2.5}$$

y es conmutativo dado que los observables A_1 y A_2 son compatibles y en ambas ordenaciones se finaliza con aquellos sistemas con valores a_1', a_2' para A_1, A_2.

Sean A_1, A_2, ..., A_f un <u>conjunto completo de observables compatibles</u>, es decir, proporcionan una información completa del sistema y cualquier otro observable compatible con ellos se puede expresar como función de los mismos. Es decir, un conjunto completo de observables compatibles ofrecen una información maximal sobre el sistema.

Si A y B son dos observables no compatibles, ¿con qué se puede identificar el producto $M(a')M(b')$?. Es decir, hemos de introducir algo más aparte de los símbolos considerados hasta ahora para completar el álgebra de la medida asociada con las relaciones de multiplicación y suma de filtros. Nótese que a nivel experimental, es perfectamente posible pasar un sistema sucesivamente por dos filtros asociados a A y a B. Físicamente, $M(a')M(b')$, es tal que tras el paso por el primer filtro se seleccionan sistemas con valor fijo b' de B y luego de estos se escogen sistemas con el valor fijo a' de A.

Para cumplir este objetivo, introduzcamos el proceso en virtud del cual dado un observable A se aceptan sistemas en el estado a'' y todos ellos son transformados finalmente en sistemas en el estado a', que representamos por $M(a';a'')$. Nótese el punto y coma dentro del argumento como diferencia con respecto al símbolo $M(a_1'a_2')$ introducido en (2.5). De su definición tenemos las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} M(a';a') &= M(a') \;, \\ M(a^{IV};a''')M(a'';a') &= \delta(a''',a'')\, M(a^{IV},a') \;, \\ M(a'';a')M(a^{IV};a''') &= \delta(a',a^{IV})\, M(a'',a''') \;, \end{aligned} \tag{2.6}$$

de las dos últimas relaciones se aprecia pues que la multiplicación de los símbolos $M(a';a'')$ no es conmutativa. Es importante destacar que las relaciones expresadas en (2.6) para un sólo operador, siguen siendo válidas si consideramos a su vez que A de hecho está representando a un conjunto completo de observables compatibles. En lo sucesivo emplearemos también la notación más compacta, $\delta(a_1',...,a_f';a_1'',...,a_f'') = \prod_{i=1}^{f}\delta(a_i',a_i'')$.

Sea B un conjunto completo de observables incompatibles con A, por ejemplo:

$$\begin{aligned} B &\equiv \left\{L^2, L_y\right\} \ , \\ A &\equiv \left\{L^2, L_z\right\} \ , \end{aligned} \tag{2.7}$$

y consideremos $M(a';b')$, el proceso en virtud del cual se aceptan sistemas con el valor b' de B todos los cuales son finalmente liberados como sistemas con el valor a' de A. Por ejemplo, este proceso podría corresponder a un experimento de Stern-Gerlach con un campo magnético giratorio que rota la orientación del momento angular aceptado. Consideremos adicionalmente otros conjuntos completos de observables C y D, por ejemplo otros dos experimentos de Stern-Gerlach rotados entre sí y rotados respecto de los primeros. En general tendremos que:

$$M(a';b')M(c';d') \neq M(a';d') \ , \tag{2.8}$$

aunque el resultado final sea el de seleccionar sistemas con d' y obtener sistemas con a' definido. Así escribimos:

$$M(a';b')M(c';d') = \langle b'|c'\rangle M(a';d') \ , \tag{2.9}$$

dado que no todo el sistema que sale con c' de $M(c';d')$ es aceptado por un filtro $M(b')$. Por contra, esto no sucede con $M(a';d')$, donde no existe ese proceso intermedio de pasar por el filtro de C y después por el filtro de B. De este modo, $\langle b'|c'\rangle$ está necesariamente relacionado con la fracción de sistemas con valor definido c' que son aceptados por el filtro que selecciona b'. Por otra parte de (2.6) sabemos ya que:

$$\langle a'|a''\rangle = \delta(a',a'') \tag{2.10}$$

Supondremos que en general $\langle b'|c'\rangle$ es también un número, como en (2.10), que tomaremos complejo, y que, por tanto, conmuta con los símbolos M. La desviación de $\langle b'|c'\rangle$ de 0 o 1 es, todavía de un modo sin especificar, una medida de la incompatibilidad de B y C. Teniendo en cuenta (2.6) y (2.9), tenemos las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} M(a')M(b') &= M(a';a')M(b';b') = \langle a'|b'\rangle M(a';b') \ , && (2.11) \\ M(a')M(b';c') &= M(a';a')M(b';c') = \langle a'|b'\rangle M(a';c') \ , \\ M(a';b')M(c') &= \langle b'|c'\rangle M(a';c') \ . && (2.12) \end{aligned}$$

De la primera igualdad vemos que hemos cumplido nuestro objetivo de poder expresar el producto de dos filtros $M(a')$ y $M(b')$ asociados con observables mutuamente incompatibles y hemos cerrado el álgebra introduciendo los símbolos adicionales $M(a';b')$ y los números $\langle b'|c'\rangle$. Considerando además la relación de completitud (2.2), se sigue que:

$$\begin{aligned} M(b';c') &= \sum_{a'} M(a')M(b';c') = \sum_{a'} \langle a'|b'\rangle M(a';c') \ , \\ M(a';b') &= \sum_{c'} M(a';c')\langle b'|c'\rangle \ , \\ M(a';b') &= \sum_{c',d'} M(c')M(a';b')M(d') = \sum_{c',d'} \langle c'|a'\rangle\langle b'|d'\rangle M(c';d') \ . \end{aligned} \tag{2.13}$$

Esta identidad muestra que los símbolos de medida del tipo $A - B$, se relacionan linealmente con aquellos de cualquier otro tipo, por ejemplo $C - D$. El conjunto de números $\langle a'|b'\rangle$ efectúa la transición entre ambos conjuntos completos de observables compatibles y por eso los designamos como funciones de transformación.

A continuación deducimos una propiedad muy importante de las funciones de transformación,

$$M(a')M(c') = \langle a'|c'\rangle M(a';c') = \sum_{b'} M(a')M(b')M(c') = \sum_{b'} \langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle M(a';c') \ , \tag{2.14}$$

con lo que,

$$\langle a'|c'\rangle = \sum_{b'} \langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle \ . \tag{2.15}$$

Si c' corresponde a a'', y teniendo en cuenta además (2.10), tenemos:

$$\delta(a',a'') = \sum_{b'} \langle a'|b'\rangle\langle b'|a''\rangle \ . \tag{2.16}$$

2.2. Probabilidades

Sean $\{\lambda(a')\}$, $\{\lambda(b')\}$ conjuntos arbitrarios de números complejos distintos de cero. La transformación,

$$\begin{aligned} M(a';b') &\rightarrow \lambda(a')M(a';b')\lambda(b')^{-1} \ , \\ \langle a'|b'\rangle &\rightarrow \lambda(a')^{-1}\langle a'|b'\rangle\lambda(b') \ , \end{aligned} \tag{2.17}$$

deja invariante el álgebra de la medida. Para ello es suficiente con ver que el producto (2.9) queda invariante:

$$\begin{aligned} M(a';b')M(c';d') &\rightarrow \lambda(a')M(a';b')\frac{1}{\lambda(b')}\lambda(c')M(c',d')\frac{1}{\lambda(d')} \ , \\ \langle b'|c'\rangle M(a';d') &\rightarrow \frac{1}{\lambda(b')}\langle b'|c'\rangle\lambda(c')\,\lambda(a')M(a';d')\frac{1}{\lambda(d')} \ , \end{aligned} \tag{2.18}$$

y en efecto los lados derechos de las dos expresiones anteriores son iguales y (2.9) se cumple en términos de los símbolos de medida y funciones de transformación cambiados según (2.17). De este resultado concluimos que $\langle b'|c'\rangle$ no tiene un significado físico en sí mismo. No obstante,

$$p(a',b') = \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle \ , \tag{2.19}$$

sí que es invariante bajo la transformación (2.17) y cabe pensar en otorgarle un significado físico. Además (2.19) cumple la propiedad:

$$\sum_{b'} p(a',b') = \sum_{b'} \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle = \delta(a',a') = 1 \ , \tag{2.20}$$

según hemos visto en (2.16). Esta propiedad permite identificar cualquier conjunto de números positivos que la satisfagan como probabilidades. Así interpretamos $p(a',b') = \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle$ como la probabilidad de encontrar un sistema en el estado b' cuando se realiza una filtración B en un conjunto de sistemas con valor definido a' y en adelante supondremos que $\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle \geq 0$. Recordemos que desde su introducción en (2.9) ya establecimos que $\langle a'|b'\rangle$ debe estar relacionado con la pérdida de sistemas al pasar de un filtro $M(b')$ a otro $M(a')$. Notemos que por su propia definición $p(a',b') = p(b',a')$, es simétrica si se intercambian los papeles de A y B como debe ser.[#1]

Planteémonos, en pro de mayor generalidad, si la definición anterior para $p(a',b') = \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle$ es la única definición posible para dicha magnitud. Como ya se ha indicado nos restringimos al caso en que $\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle \geq 0$. La probabilidad $p(a',b')$ debe ser una función de $\langle a'|b'\rangle$ y de $\langle b'|a'\rangle$. Además dado que tiene que ser invariante bajo la transformación (2.18) se sigue que $p(a',b')$ debe ser función sólo de la combinación $\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle$. Luego si escribimos $p(a',b') = f(\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle)$ y hacemos un desarrollo en serie de potencias de $\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle$ tenemos:

$$f(\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle) = f_0 + f_1\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle + f_2(\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle)^2 + \ldots \tag{2.21}$$

Para $b' \to a''$ y $a'' \neq a'$ tenemos:

$$p(a',a'') = 0 = f_0 \ . \tag{2.22}$$

Por otra parte, para $b' \to a'$,

$$p(a',a') = 1 = f_1 + f_2 + f_3 + \ldots \tag{2.23}$$

Así mismo, sumando sobre b' tenemos la unidad:

$$\sum_{b'} p(a',b') = 1 = f_1 + f_2 \sum_{b'} (\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle)^2 + f_3 \sum_{b'} (\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle)^3 + \ldots \tag{2.24}$$

donde hemos tenido en cuenta (2.20). Restando las ecuación (2.23) y (2.24) llegamos a la identidad,

$$0 = \sum_{k>1}\sum_{b'} f_k \left[(\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle)^k - 1\right] \ . \tag{2.25}$$

Diferenciando m veces la expresión anterior respecto de $\langle a'|b''\rangle\langle b''|a'\rangle$ y tomando al final $b'' = a'' \neq a'$ llegamos a,

$$m! f_m = 0 \ , \tag{2.26}$$

con lo $f_k = 0$ para $k \geq 2$ y, por ende,

$$p(a',b') = \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle \ . \tag{2.27}$$

Veamos ahora que la definición dada de $p(a',b')$ da lugar a los conocidos efectos cuánticos de interferencia de amplitudes de probabilidad ya mencionados en el capítulo anterior. Para ello determinemos la probabilidad de que un sistema con un valor definido c' pase una filtración B con valor b' y a continuación una filtración A de valor a':

$$p(a',b',c') = p(a',b')p(b',c') \ . \tag{2.28}$$

[#1]Pensemos que tenemos unos segmentos lineales α, β, ... compuestos de segmentos menores de tipo A, B, ..., y que a su vez segmentos enteros A, B ... se pueden construir juntando los segmentos del mismo tipo encontrados en α, β, ... Entonces la misma componente de segmento de A en α es la que hay en A de α y así para cualquier otro par de segmentos de los dos conjuntos.

Si el filtro B opera pero no observamos el valor resultante b', se tiene:

$$p(a', B, c') = \sum_{b'} p(a', b')p(b', c') = \sum_{b'} \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle\langle c'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle \ . \tag{2.29}$$

Si por otra parte no se introduce el filtro B,

$$p(a', c') = \langle a'|c'\rangle\langle c'|a'\rangle = \sum_{b'b''} \langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle\langle c'|b''\rangle\langle b''|a'\rangle \ , \tag{2.30}$$

donde hemos hecho uso de las relaciones (2.15). Queda claro que las expresiones (2.29) y (2.30) no son iguales. Éste es un resultado inesperado desde un punto de vista clásico y resulta relevante que lo hayamos podido deducir del formalismo presente sin más que realizar un análisis muy general del álgebra de la medida y la definición de probabilidad $p(a', b')$ en términos de las funciones de transformación tal que resulte invariante bajo las transformaciones (2.17). La razón de que las expresiones anteriores no sean iguales reside en última instancia, según nuestro análisis, en la existencia de operadores incompatibles que nos han forzado a extender nuestros símbolos de la medida dados en la sección 2.1 de forma que el producto $M(a')M(b')$ quede contenido en ellos, $M(a')M(b') = \langle a'|b'\rangle M(a', b')$, en virtud de (2.9). Queda claro que (2.29) es simplemente una suma sobre el producto de probabilidades, como cabría esperar clásicamente mientras que en (2.30) tenemos el efecto cuántico de interferencia. Este efecto cuántico es el que se observaría en el experimento presentado en la figura 2.1 donde un haz de partículas pasa a través de una pantalla intermedia perforada B. Si no se determina por cuál orificio de B ha pasado realmente la partícula, tenemos un ejemplo típico de fenómeno de interferencias en la pantalla A, correspondiendo a (2.30). Si por el contrario se determina mediante un mecanismo cuándo pasa la partícula por un orificio, por ejemplo emitiéndose un fotón, entonces el esquema de interferencias desaparece de A y esta situación corresponde a (2.29).

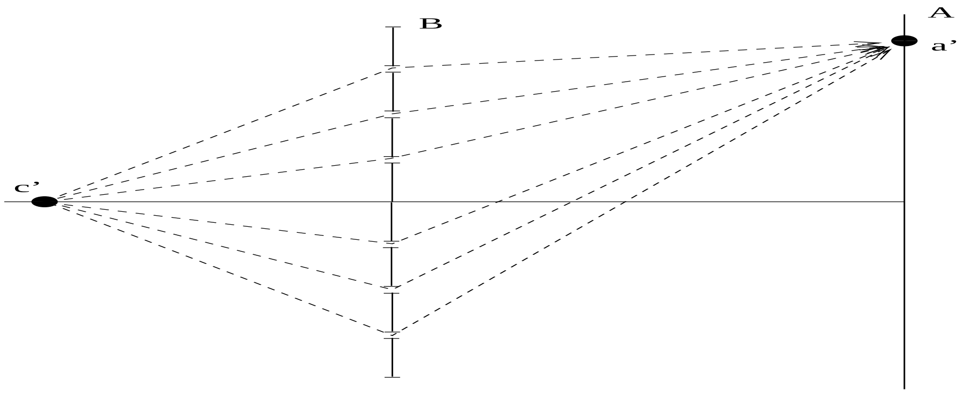

Figura 2.1: Cuando no se discierne el camino seguido por la partícula a través de B, sólo se detecta la partícula que llega a a' a partir de c', se obtiene una muestra típica de interferencias en la pantalla A, caso (2.30). Por el contrario, cuando se detecta por cuál orificio pasó la partícula el esquema de interferencias desaparece de A y estamos en el caso (2.29).

<u>El valor medio de un observable.</u> Si el sistema tiene un valor fijo a' de A, por ejemplo como resultado de aplicarle $M(a')$, entonces es seguro que al medir A obtendremos a'. Por el contrario,

si preparamos el sistema con una filtración $M(b')$ correspondiente a un observador B incompatible con A, entonces no obtendremos un único valor de A. La probabilidad de obtener a' es $p(a',b')$ de modo que el valor medio del observable A en un sistema preparado tras un filtro de B es:

$$\begin{aligned}\langle A\rangle_{b'} &= \sum_{a'} a' p(a',b') = \sum_{a'} \langle b'|a'\rangle a' \langle a'|b'\rangle \;, \\ \langle f(A)\rangle_{b'} &= \sum_{a'} f(a') p(a',b') \;, \end{aligned} \tag{2.31}$$

donde $f(A)$ representa una función arbitraria del observable A. Así mismo definimos la dispersión o incertidumbre del observable A cuando el sistema tiene un valor fijo b' como:

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_{b'} = \langle(A-\langle A\rangle_{b'})^2\rangle_{b'} = \sum_{a'} \left(a'^{\,2} - 2a'\langle A\rangle_{b'} + \langle A\rangle_{b'}^2\right) p(a',b') = \sum_{a'} \left[a'^{\,2} - \langle A\rangle_{b'}^2\right] p(a',b') \;. \tag{2.32}$$

2.3. Vectores estado y operadores

Tarea esencial de la MC es determinar las funciones de transformación, ya que son éstas las que relacionan resultados entre los distintos experimentos. No estamos todavía interesados en su evolución temporal, se trata de determinar la estructura de la MC a un tiempo dado, "estadística cuántica". Es por eso que en este tema sobre el álgebra de la medida hemos analizado estrictamente resultados de experimentos simultáneos. A continuación veamos que se consigue una realización del álgebra de la medida empleando como soporte matemático de la MC un espacio de Hilbert, típicamente de dimensión infinita.

Hemos visto, como aspectos fundamentales de las dos secciones anteriores, que el álgebra de la medida se resume en la ley de composición,

$$M(a';b')M(c';d') = \langle b'|c'\rangle M(a';d') \;, \tag{2.33}$$

y, por otra parte, la definición de probabilidad,

$$p(a',b') = \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle \;, \tag{2.34}$$

que debe ser un número positivo entre 0 y 1. También hemos visto las siguientes propiedades importantes de las funciones de transformación:

$$\langle a'|c'\rangle = \sum_{b'} \langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle \;, \tag{2.35}$$

$$\langle a'|a''\rangle = \delta(a',a'') \;. \tag{2.36}$$

Todos estos requerimientos, junto con (2.2), vamos a ver que se cumplen si se considera un espacio de Hilbert y se identifican las funciones de transformación $\langle a'|b'\rangle$ como el producto escalar de los vectores $|a'\rangle$, $|b'\rangle$ normalizados a la unidad. Esto último es necesario para que se cumpla (2.34), dado que para vectores normalizados a 1, $\langle a'(b')|a'(b')\rangle = 1$, la desigualdad de Schwartz implica que $0 \leq \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle = \langle a'|b'\rangle\langle a'|b'\rangle^* = |\langle a'|b'\rangle|^2 \leq \langle a'|a'\rangle\langle b'|b'\rangle = 1$, tal y como se requiere. Por otra parte también tenemos que (2.35) se satisface dado que para $\{|b'\rangle\}$ una base ortonormal del espacio de Hilbert se tiene:

$$\sum_{b'}\langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle = \sum_{b'}\langle a'|b'\rangle\langle c'|b'\rangle^* = \langle a'|c'\rangle \ . \tag{2.37}$$

Es conveniente recordar que puesto que $\{|b'\rangle\}$ es una base ortonormal satisface la resolución de la identidad $\sum_{b'}|b'\rangle\langle b'| = 1$.

Así introducimos los dos siguientes postulados: *i) Cada estado de un sistema especificado por un conjunto completo de números cuánticos a', relativos a un conjunto completo de observables compatibles, viene descrito por un vector $|a'\rangle$. Este conjunto de vectores, para todos los valores posibles de a', es una base ortonormal del espacio de Hilbert para el caso genérico de dimensión infinita. ii) Las funciones de transformación $\langle a'|b'\rangle$ corresponden al producto escalar de dos de tales vectores referidos al mismo o a distintos conjuntos completos de observables compatibles.*

De este modo cualquier vector $|\beta\rangle$ de dicho espacio de Hilbert puede escribirse como $|\beta\rangle = \sum_{a'} C_{a'}|a'\rangle$, con $C_{a'} = \langle a'|\beta\rangle$ un número complejo. También introducimos el espacio vectorial dual que tiene como base los vectores duales $\langle a'|$. Los vectores duales están en correspondencia uno a uno con los vectores $|a'\rangle$. Si $|\beta\rangle$ es el vector genérico dado anteriormente, su dual es $\langle\beta'| = \sum_{a'} C^*_{a'}\langle a'|$.

A todo par de vectores $|a'\rangle$, $|b'\rangle$ le asociamos el producto escalar,

$$\langle a'|b'\rangle = \langle b'|a'\rangle^* \ , \tag{2.38}$$

siendo una forma sesquilineal, esto es, si $|\alpha\rangle = \lambda|a'\rangle + \lambda'|a''\rangle$, y $|\beta\rangle = \mu|b'\rangle$, entonces

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \mu^*\lambda\langle b'|a'\rangle + \mu^*\lambda'\langle b'|a''\rangle \ . \tag{2.39}$$

Dado un espacio vectorial o en general un espacio de Hilbert, podemos a su vez construir operadores que nos transforman unos vectores en otros. Especial mención merecen en este curso los operadores lineales que ocupan un lugar relevante en la MC dado que las magnitudes conservadas son siempre extensivas. Un operador $\mathcal{O}$ es lineal si satisface:

$$\mathcal{O}\left(\lambda_1|\alpha\rangle + \lambda_2|\beta\rangle\right) = \lambda_1\mathcal{O}|\alpha\rangle + \lambda_2\mathcal{O}|\beta\rangle \ , \tag{2.40}$$

con λ_1, λ_2 números complejos. La actuación de un operador lineal queda fijada una vez se determina la actuación del mismo sobre los vectores de la base $\{|a'\rangle\}$,

$$\begin{aligned} \mathcal{O}|\beta\rangle = \sum_{a''} C'_{a''}|a''\rangle &= \mathcal{O}\sum_{a'} C_{a'}|a'\rangle = \sum_{a'} C_{a'}\mathcal{O}|a'\rangle = \sum_{a'a''} C_{a'}|a''\rangle\langle a''|\mathcal{O}|a'\rangle \\ &= \sum_{a'a''} \mathcal{O}_{a''a'}C_{a'}|a''\rangle \ , \end{aligned} \tag{2.41}$$

siendo $\mathcal{O}_{a''a'} = \langle a''|\mathcal{O}|a'\rangle$ los elementos de matriz de $\mathcal{O}$ en la base $\{|a'\rangle\}$. Esta notación fue la utilizada en la sección 1.2 suponiendo el bagaje del curso de *Física Cuántica*. A nivel de componentes en la base dada la relación anterior se puede escribir simplemente como:

$$C'_{a''} = \sum_{a'} \mathcal{O}_{a''a'}C_{a'} \ . \tag{2.42}$$

Consideremos el operador $|b'\rangle\langle a'|$ y su actuación sobre un vector genérico $|\alpha\rangle$, tenemos

$$(|b'\rangle\langle a'|)|\alpha\rangle = |b'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \ , \tag{2.43}$$

de modo que este operador primero proyecta cualquier vector según $|a'\rangle$ y luego lo orienta según $|b'\rangle$. Si componemos dos de tales operadores tenemos:

$$(|a'\rangle\langle b'|)(|c'\rangle\langle d'|) = \langle b'|c'\rangle|a'\rangle\langle d'| \ , \tag{2.44}$$

y tenemos la misma ley de producto (2.9) que para los operadores $M(a';b')$. Es por ello que identificamos

$$M(a';b') = |a'\rangle\langle b'| \ . \tag{2.45}$$

Entonces, $M(a') = |a'\rangle\langle a'|$ es un operador de proyección y como $\{|a'\rangle\}$ es una base ortonormal del espacio de Hilbert inmediatamente se obtiene que

$$\sum_{a'} M(a') = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = 1 \ , \tag{2.46}$$

de acuerdo a (2.2).

Es también útil introducir la siguiente representación de un operador lineal genérico $\mathcal{O}$. Haciendo uso de (2.41) y escribiendo $C_{a'} = \langle a'|\beta\rangle$, tenemos:

$$\mathcal{O}|\beta\rangle = \left(\sum_{a'a''} |a''\rangle\mathcal{O}_{a''a'}\langle a'|\right)|\beta\rangle \ , \tag{2.47}$$

dado que esta igualdad es válida para cualquier vector $|\beta\rangle$ tenemos:

$$\mathcal{O} = \sum_{a'a''} |a''\rangle\mathcal{O}_{a''a'}\langle a'| \ . \tag{2.48}$$

También ya hemos hablado de la traza del operador matriz densidad en la sección 1.2. La generalización es obvia. Dada una base ortonormal $\{|a'\rangle\}$ y un operador lineal $\mathcal{O}$, tenemos:

$$Tr(\mathcal{O}) = \sum_{a'}\langle a'|\mathcal{O}|a'\rangle = \sum_{a'}\mathcal{O}_{a'a'} \ . \tag{2.49}$$

Definición por otra parte esperable de nuestra experiencia con matrices. Dejamos al lector que demuestre la propiedad de que el valor de la traza es el mismo independientemente de la base ortonormal en que se evalúe. De la misma forma deben resultar igualmente esperables las definiciones del operador transpuesto, $\mathcal{O}^T$, conjugado, $\mathcal{O}^*$ y hermítico, $\mathcal{O}^\dagger$:[#2]

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}^T &= \sum_{a'a''}|a'\rangle\langle a''|\mathcal{O}|a'\rangle\langle a''| \ , \\
\mathcal{O}^* &= \sum_{a'a''}|a'\rangle\langle a'|\mathcal{O}|a''\rangle^*\langle a''| \ , \\
\mathcal{O}^\dagger &= \sum_{a'a''}|a'\rangle\langle a''|\mathcal{O}|a'\rangle^*\langle a''| \ .
\end{aligned} \tag{2.50}$$

[#2]En este curso, a no ser que se diga lo contrario, hermítico y autoadjunto se tomarán como sinónimos suponiendo la igualdad de los dominios de definición del operador y de su adjunto.

De las definiciones anteriores se tiene que $(|a'\rangle\langle b'|)^\dagger = |b'\rangle\langle a'|$ y por lo tanto $M(a';b')^\dagger = M(b';a')$. También se deduce fácilmente que $(XY)^T = Y^T X^T$ y $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$ siendo X e Y dos operadores lineales arbitrarios. Un operador que satisface que $X^\dagger = X$ se llama hermítico, si satisface $X^\dagger = -X$ se llama antihermítico, si satisface $X^T = X$ se dice que es simétrico y si $X^* = X$ se dice que es real. También se deduce que si $|\alpha'\rangle = \mathcal{O}|\alpha\rangle$ y $|\beta'\rangle = \mathcal{O}^\dagger|\beta\rangle$ entonces:

$$\langle\alpha'|\beta\rangle = \langle\alpha|\mathcal{O}^\dagger|\beta\rangle = \langle\beta'|\alpha\rangle^* \ . \tag{2.51}$$

Una propiedad de los operadores hermíticos es que sus autovalores son reales. En efecto, si $|a'\rangle$ es un autovector de A con autovalor a' entonces,

$$\langle a'|A|a'\rangle = a'\langle a'|a'\rangle = \langle Aa'|a'\rangle = a'^*\langle a'|a'\rangle \ , \tag{2.52}$$

de donde se sigue que $a' = a'^*$ y por tanto es real. Además otra propiedad relevante es que dados dos autovectores de un operador hermítico éstos son ortogonales si sus autovalores son distintos. Sean $|a'\rangle$ y $|a''\rangle$ dos autovectores de A con autovalores a' y a'' tal que $a' \neq a''$, entonces

$$\langle a'|A|a''\rangle = a'\langle a'|a''\rangle = a''\langle a'|a''\rangle, \tag{2.53}$$

por lo tanto $\langle a'|a''\rangle = 0$.

<u>Observables</u>. Según vimos al final de la sección anterior, el valor medio del observable A en un estado con valor definido b', $|b'\rangle$, resultante por ejemplo de una filtración $M(b')$, viene dado por,

$$\sum_{a'} a' p_{a',b'} = \sum_{a'} \langle b'|a'\rangle a'\langle a'|b'\rangle = \langle b'| \left(\sum_{a'} |a'\rangle a'\langle a'|\right) |b'\rangle \ , \tag{2.54}$$

y dado que $|b'\rangle$ es un elemento arbitrario de la base ortonormal $\{|b'\rangle\}$, que a su vez representa una base genérica, se sigue que al observable A se le debe hacer corresponder el operador,

$$A = \sum_{a'} a'|a'\rangle\langle a'| \ , \tag{2.55}$$

dentro del espacio de Hilbert, que proporciona correctamente el valor medio de la cantidad física A en estados $|b'\rangle$, $|c'\rangle$, etc, asociados a bases ortonormales arbitrarias. Fijémonos también que de la expresión anterior se sigue que cualquier observable cumple que $A^\dagger = A$ y es hermítico

Además, como consecuencia de (2.55) se tiene que:

$$\begin{aligned} (A - a')|a'\rangle &= 0 \ , \\ \langle a'|(A - a') &= 0 \ . \end{aligned} \tag{2.56}$$

Con lo que $|a'\rangle$ es un autoestado del operador A con autovalor a'. Desde un punto de vista matemático el espectro, o conjunto de valores reales posibles que un observable puede tener en una medida, corresponde así al conjunto de autovalores del operador hermítico asociado.

Ya hemos dicho que un observable corresponde a un operador hermítico. La implicación inversa también se cumple, todo operador hermítico es un observable dado que se puede escribir en la forma (2.55), una vez hallados sus autovalores y autovectores. Los primeros son reales, según se ha visto en (2.52), y los segundos constituyen una base ortonormal. Es importante recalcar en este punto la consistencia del formalismo, en particular con el postulado i), introducido tras (2.37). Allí se dijo que el conjuto de vectores $\{|a'\rangle\}$, con a' tomando cualquier valor dentro del espectro multiple de un conjunto completo de observables compatibles, constituía una base ortonormal del espacio de Hilbert. Ahora hemos visto que, de hecho, determinar el espectro de un conjunto completo de observables compatibles supone resolver el problema de autovalores de tales observables, y por otra parte, del conjunto de autovectores de un operador hermítico se puede extraer una base ortonormal del espacio de Hilbert. No obstante, hemos de recordar que parte de ese postulado se ha utilizado para llegar a que un observable físico corresponde a un operador hermítico y por ello no es superflua.

Por otra parte, dado un vector arbitrario $|\beta\rangle$ del espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ normalizado a la unidad, $\langle\beta|\beta\rangle = 1$, siempre lo podemos considerar como miembro de una base ortonormal $\{|b'\rangle\}$ y, por tanto, hacerlo corresponder a un estado del sistema físico, en virtud de i). Baste para ello darse cuenta de que $|\beta\rangle$ es un autovector del operador hermítico (observable) $|\beta\rangle\langle\beta|$ con autovalor 1. El vector $|\beta\rangle$ se puede completar con otros vectores hasta formar una base ortonormal del espacio de Hilbert, asociada a la cual siempre se puede definir un conjunto completo de observables compatibles que completen el observable anterior. Por otra parte, la relación entre vectores del espacio de Hilbert y estados de un sistema físico no es uno a uno puesto que dado un vector $|\beta\rangle$ entonces $|\beta'\rangle = e^{i\phi}|\beta\rangle$, con ϕ real, también es autovector del observable $|\beta\rangle\langle\beta| = |\beta'\rangle\langle\beta'|$ con autovalor uno, normalizado a la unidad y por tanto le corresponde el mismo estado físico. Por eso es que existe una ambigüedad en la fase global del vector que se le asocia a un estado físico, que se ha de fijar de una vez para siempre a conveniencia.

En este punto se concluye la realización del álgebra de la medida, sección 2.1, y de la definición de probabilidad, sección 2.2, en un espacio de Hilbert como soporte matemático.

Recordemos que dado un operador hermítico A en un espacio vectorial de dimensión finita su espectro se calcula resolviendo la ecuación:

$$\det(A - \lambda) = 0 \ . \tag{2.57}$$

Operadores unitarios. Un operador lineal U se dice que es unitario si satisface $UU^\dagger = U^\dagger U = 1$. El conjunto de operadores unitarios constituye un grupo como se demuestra fácilmente. Como consecuencia directa de su definición se deduce una propiedad muy importante de los operadores unitarios y es que conservan los productos escalares. Sea $|\alpha'\rangle = U|\alpha\rangle$ y $|\beta'\rangle = U|\beta\rangle$, entonces:

$$\langle\alpha'|\beta'\rangle = \langle\alpha|U^\dagger U|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle \ . \tag{2.58}$$

A todo operador unitario se le puede asociar un cambio de base y viceversa. Sean $\{|a\rangle\}$ y $\{|b\rangle\}$ dos posibles bases ortonormales en el espacio de Hilbert. Designemos por U_{ab} el operador asociado con dicho cambio de base tal que:

$$U_{ab}|a^k\rangle = |b^k\rangle \ . \tag{2.59}$$

De este modo $U_{ab} = \sum_k |b^k\rangle\langle a^k|$ como se puede comprobar sin más que haciendo actuar dicho operador sobre la base $\{|a\rangle\}$. Por otra parte $U_{ab}^\dagger = \sum_k |a^k\rangle\langle b^k|$ y efectivamente es un operador unitario dado que $U_{ab}U_{ab}^\dagger = 1$. También se demuestra fácilmente que dado un operador unitario U, los vectores $|b^k\rangle = U|a^k\rangle$, transformados de la base original $\{|a\rangle\}$, constituyen una nueva base ortonormal puesto que dado un vector $|\phi\rangle$ del espacio de Hilbert se tiene que $U|\phi\rangle = \sum_k |b^k\rangle\langle b^k|U|\phi\rangle$

y $\langle b^k|b^l\rangle = \langle a^k|a^l\rangle = \delta_{kl}$. Por supuesto el espacio de Hilbert transformado por U coincide con el original dado que U tiene inversa.

Consideremos a continuación el transformado de un operador bajo una transformación unitaria. Dado un operador X arbitrario tal que $|\alpha_X\rangle = X|\alpha\rangle$, su transformado será aquel operador X' que realice la misma transformación que X pero en el espacio vector transformado por U, es decir, que verifique $X'U|\alpha\rangle = UX|\alpha\rangle$ y por lo tanto,

$$X' = U\, X\, U^\dagger \ . \tag{2.60}$$

Si designamos por $\{|b^k\rangle\}$ a la nueva base transformada de $\{|a^k\rangle\}$ por U, tendremos para X un operador lineal:

$$X' = U \left(\sum_{kq} |a^k\rangle\langle a^k|X|a^q\rangle\langle a^q| \right) U^\dagger = \sum_{kq} |b^k\rangle\langle a^k|X|a^q\rangle\langle b^q| \ , \tag{2.61}$$

con lo que los elementos de matriz de X' en la base transformada son los mismos que los elementos de matriz de X en la base original.

Otras propiedades que se pueden demostrar fácilmente son:

$$\begin{aligned} |\mathrm{det}U| &= 1 \ , \\ \mathrm{det}X' &= \mathrm{det}X \ , \\ Tr(X') &= Tr(X) \ , \\ X'^\dagger &= (X^\dagger)' = UX^\dagger U^\dagger \ . \end{aligned} \tag{2.62}$$

Una propiedad muy relevante es que los operadores unitariamente equivalentes tienen el mismo espectro. Si $|a'\rangle$ es un autoestado de A con autovalor a', $(A-a')|a'\rangle = 0$, entonces $U|a'\rangle$ es un autoestado de $A' = UAU^\dagger$ con el mismo autovalor a', dado que $A'(U|a'\rangle) = UAU^\dagger U|a'\rangle = UA|a'\rangle = a'(U|a'\rangle)$. Esta implicación se puede demostrar también del mismo modo en el sentido opuesto pero empleando el operador unitario $U^{-1} = U^\dagger$. Así pues los autoestados o autovectores están en una relación uno a uno y los autovalores se conservan y con ellos los espectros son iguales.

Otra propiedad que se conserva en una transformación unitaria es que el producto entre operadores transformados es igual al transformado del producto de los operadores,

$$A'B' = UAU^\dagger UBU^\dagger = UABU^\dagger \ . \tag{2.63}$$

Desde el punto de vista del formalismo es pues indistinguible considerar que los estados físicos y observables correspondan a vectores y operadores hermíticos o a sus transformados unitarios, dado que los productos escalares entre vectores se conservan, así como las relaciones algebraicas entre operadores. Se habla así de representaciones equivalentes (isomorfas) en cuanto a la descripción de los fenómenos físicos.[#3] Del mismo modo que en mecánica clásica las transformaciones canónicas relacionan conjuntos de variables dinámicas igualmente aptas para una descripción hamiltoniana de los sistemas.

[#3] Téngase en cuenta que $U(\alpha|\delta\rangle+\beta|\gamma\rangle) = \alpha|\delta'\rangle+\beta|\gamma'\rangle$ (con $|\delta'\rangle = U|\delta\rangle$, $|\gamma'\rangle = U|\gamma\rangle$), $\langle\delta'|\gamma'\rangle = \langle\delta|\gamma\rangle$, $\alpha A'+\beta B' = U^\dagger(\alpha A+\beta B)U$ (con $A' = U^\dagger AU$ y $B' = U^\dagger BU$), $A'B' = U^\dagger ABU$ y $A'|\alpha'\rangle = UA|\alpha\rangle$. Por ello es por lo que se habla de representaciones isomorfas a aquellas que son unitariamente equivalentes.

Espectros continuos. El esquema que hemos considerado anteriormente suponía que el espectro de un operador era discreto. Sin embargo muchos observables relevantes en física tienen espectros continuos como el observable momento o la energía. Designemos tal observable por un operador ξ. Dado que su espectro es continuo, siguiendo el mismo procedimiento que dio lugar a (2.55), tendremos ahora:

$$\xi = \int \xi' M(\xi') d\xi' = \int d\xi' \, \xi' |\xi'\rangle\langle\xi'| \;, \tag{2.64}$$

es decir, se sigue representando un observable como una suma sobre los posibles filtros de ξ, pero ahora dado que el espectro es continuo estos filtros fijan que el estado posee un valor ξ' del observable ξ que está dentro de un intervalo de longitud $\Delta\xi'/2$ alrededor del valor ξ' y al sumar sobre todos esos intervalos, se da lugar a la integral (2.64) en el límite $\Delta\xi' \to 0$. De la representación anterior se sigue que ξ es un operador hermítico, y viceversa, todo operador hermítico de espectro continuo corresponde a un observable dado que se puede expresar como en (2.64).

Al igual que en (2.2), sumando sobre todos estos filtros se deja pasar a todos los sistemas, por lo que:

$$\int M(\xi') d\xi' = \int d\xi' \, |\xi'\rangle\langle\xi'| = 1 \;. \tag{2.65}$$

Esta resolución de la identidad fija la normalización de los vectores $|\xi'\rangle$ de un espectro continuo a deltas de Dirac, es decir, $\langle\xi'|\xi''\rangle = \delta(\xi - \xi'')$. Para ello multiplíquese (2.65) por la derecha por $|\xi''\rangle$,

$$|\xi''\rangle = \int d\xi' \, |\xi'\rangle\langle\xi'|\xi''\rangle \;, \tag{2.66}$$

y por tanto $\langle\xi'|\xi''\rangle = \delta(\xi' - \xi'')$. Como consecuencia de esta propiedad y de (2.64), es inmediato comprobar que $|\xi'\rangle$ es un autovector de ξ, con autovalor ξ'.

Finalmente nuestra definición de probabilidad $p(a', b')$ dada en (2.34) requiere ser reinterpretada cuando alguno de los vectores no se puede normalizar a la unidad, como es el caso cuando corresponde a un autovector de un espectro continuo. Estos vectores no corresponden a estados físicos, que deben estar normalizados a uno para garantizar la interpretación estadística. No obstante, sí que se pueden emplear estos vectores generalizados como extensión del espacio de Hilbert original ya que suelen presentar propiedades de transformación simples bajo la actuación de algún o algunos observables relevantes, constituyen bases completas para expresar cualquier estado físico y éstos se pueden aproximar arbitrariamente a autovectores de espectros continuos reduciendo la longitud $\Delta\xi'$ de indeterminación del observable ξ (como ejemplo considérese un tren de ondas). Para reinterpretar (2.34) pensemos por ejemplo en $|p_i'\rangle$, un autovector de la componente i-ésima del operador momento lineal o impulso $\vec{p}$, entonces $|\langle p_i'|\alpha\rangle|^2 \, dp_i$ representa la probabilidad de que el estado $|\alpha\rangle$ del espacio de Hilbert tenga un valor de p_i centrado en p_i' y de longitud dp_i. Esta interpretación da lugar a la expresión correcta para calcular el valor medio de p_i para el estado $|\alpha\rangle$,

$$\langle p_i\rangle_\alpha = \langle\alpha|p_i|\alpha\rangle = \int dp_i' |\langle p_i'|\alpha\rangle|^2 p_i' \;, \tag{2.67}$$

teniendo en cuenta la expresión (2.64) para p_i. Por otra parte, si $|x_i'\rangle$ es el autoestado de la componente i-ésima del operador de posición $\vec{x}$ entonces $|\langle x_i'|\alpha\rangle|^2 \, dx_i$ nos da la probabilidad para encontrar el sistema en el intervalo $(x'_i - dx_i/2, x'_i + dx_i/2)$ con lo que $\langle \vec{x}'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(\vec{x})$ es la función de onda de mecánica ondulatoria.

Sistemas compuestos. Sean dos sistemas I y II con espacios de Hilbert $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$. El espacio de Hilbert del sistema que engloba dichos subsistemas es el espacio producto directo, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Si $\{|a'_1\rangle\}$ y $\{|b'_2\rangle\}$ son bases de $\mathcal{H}_1$ y $\mathcal{H}_2$, respectivamente, entonces una base de $\mathcal{H}$ es:

$$\{|a'_1\rangle \otimes |b'_2\rangle\} \equiv \{|a'_1 b'_2\rangle\} \; , \tag{2.68}$$

la llamada base producto directo. Téngase en cuenta que en general un vector del espacio producto directo no se puede escribir como el producto directo de un vector de $\mathcal{H}_1$ por otro vector de $\mathcal{H}_2$ aunque siempre se puede escribir su desarrollo en la base producto directo (2.68).

Sea X_1 un operador lineal que actúa sobre $\mathcal{H}_1$ y X_2 un operador lineal que actúa sobre $\mathcal{H}_2$, entonces sus elementos de matriz en la base producto directo son:

$$\langle a'_1 b'_2|X_1 X_2|a''_1 b''_2\rangle = \langle a'_1|X_1|a''_1\rangle\langle b'_2|X_2|b''_2\rangle \; . \tag{2.69}$$

Por lo tanto la traza del operador anterior viene dada por:

$$Tr(X_1X_2) = \sum_{a'b'}\langle a'_1 b'_2|X_1X_2|a'_1 b'_2\rangle = \sum_{a'}\langle a'_1|X|a'_1\rangle \sum_{b'}\langle b'|X_2|b'\rangle = Tr(X_1)Tr(X_2) \; . \tag{2.70}$$

El operador X_1X_2 es tal que X_1 y X_2 actúan separadamente sobre los espacios de Hilbert $\mathcal{H}_1$ y $\mathcal{H}_2$. Sin embargo también pueden existir operadores que acoplan ambos espacios de Hilbert. Por ejemplo, pensemos en dos electrones que interactúan mediante el potencial de Coulomb que es proporcional a $|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|^{-1}$ que es un operador que actúa simultáneamente sobre ambos espacios de Hilbert. La generalización de lo expuesto aquí para el producto directo de dos espacios de Hilbert se generaliza fácilmente para el producto directo de un número arbitrario de espacios de Hilbert.

2.4. La relación de incertidumbre

Sea el operador

$$\Delta A = A - \langle A\rangle \; , \tag{2.71}$$

tal que,

$$\Delta A|\alpha\rangle = A|\alpha\rangle - \langle\alpha|A|\alpha\rangle|\alpha\rangle \; . \tag{2.72}$$

Al valor esperado de $(\Delta A)^2$ se le conoce como dispersión, varianza o desviación cuadrática media del observable A en el estado en que se toma el valor medio,

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle(A^2 - 2A\langle A\rangle + \langle A\rangle^2)\rangle = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \; , \tag{2.73}$$

tal y como ya introdujimos en (2.32).

La relación de incertidumbre afirma que dados dos *observables* A y B entonces se satisface:

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2 \; . \tag{2.74}$$

Para probar la desigualdad anterior haremos uso de tres lemas.

1.- La desigualdad de Schwartz, que afirma que dados dos vectores $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$, se tiene:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \ . \tag{2.75}$$

Para demostrarla sea λ un número complejo, se tiene que $(\langle\alpha| + \lambda^*\langle\beta|)\,(|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle) \geq 0$. Tomando

$$\lambda = -\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle} \ , \tag{2.76}$$

se sigue,

$$\langle\alpha|\alpha\rangle - 2\frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle} + \frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle} \geq 0 \ , \tag{2.77}$$

de donde se deduce que en efecto,

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \ . \tag{2.78}$$

2.- El valor esperado de un operador hermítico es real, cuya demostración dejamos al lector.

3.- El valor esperado de un operador antihermítico es puramente imaginario:

$$\langle\alpha|A|\alpha\rangle = \langle A^\dagger\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|A^\dagger\alpha\rangle^* = -\langle\alpha|A|\alpha\rangle^* \ . \tag{2.79}$$

Para demostrar la relación de incertidumbre (2.74), apliquemos la desigualdad de Schwartz a $|\alpha\rangle = \Delta A|\phi\rangle$ y $|\beta\rangle = \Delta B|\phi\rangle$ con $|\phi\rangle$ un vector arbitrario. De (2.78) se deduce:

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq |\langle\Delta A\,\Delta B\rangle|^2 \ . \tag{2.80}$$

Dada la igualdad:

$$\Delta A\,\Delta B = \frac{1}{2}\,[\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2}\,\{\Delta A, \Delta B\} = \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{2}\,\{\Delta A, \Delta B\} \ , \tag{2.81}$$

donde $\{X, Y\} = XY + YX$, se denomina el anticonmutador de X e Y. Notemos que el conmutador de dos operadores hermíticos es antihermítico mientras que el anticonmutador es hermítico. Por lo tanto:

$$\langle\Delta A\,\Delta B\rangle = \frac{1}{2}\langle[A, B]\rangle + \frac{1}{2}\langle\{\Delta A, \Delta B\}\rangle \ , \tag{2.82}$$

siendo el primer valor esperado puramente imaginario mientras que el segundo es puramente real. De este modo el módulo al cuadrado del número complejo anterior es:

$$|\langle\Delta A\,\Delta B\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle[A, B]\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle\{\Delta A, \Delta B\}\rangle|^2 \ . \tag{2.83}$$

Utilizando este resultado en (2.80),

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq |\langle\Delta A\,\Delta B\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle[A, B]\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle\{\Delta A, \Delta B\}\rangle|^2 \ , \tag{2.84}$$

por lo tanto, como $\frac{1}{4}|\langle\{\Delta A, \Delta B\}\rangle|^2 \geq 0$,

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq |\langle\Delta A\,\Delta B\rangle|^2 \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2 \; . \tag{2.85}$$

Es interesante determinar las condiciones bajo las cuales en lugar de una desigualdad como en (2.74) se tiene la igualdad. Entonces se dice que se satisface la relación de incertidumbre mínima. Para ello, en lugar de tener la desigualdad en (2.80), procedente de la desigualdad de Schwartz (2.78), hemos de tener el signo de igualdad. De la demostración anterior de la desigualdad de Schwartz se debe tener que $(\langle\alpha| + \lambda^*\langle\beta|)\,(|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle) = 0$ y por lo tanto $|\alpha\rangle = -\lambda|\beta\rangle$, es decir, deben ser vectores proporcionales. En nuestro caso tenemos:

$$\Delta A|\phi\rangle = -\lambda\Delta B|\phi\rangle \; . \tag{2.86}$$

Por otra parte, en lugar de la desigualdad en (2.85) se debe tener la igualdad con lo que el estado sobre el que se calcula el valor medio debe cumplir $\langle\phi|\{\Delta A, \Delta B\}|\phi\rangle = 0$,

$$\langle\phi|\Delta A\Delta B + \Delta B\Delta A|\phi\rangle = -(\lambda^* + \lambda)\langle\phi|(\Delta B)^2|\phi\rangle = 0 \; , \tag{2.87}$$

con lo que λ debe ser un número imaginario puro. De este modo la condición que debe satisfacer un estado $|\phi\rangle$ para tener la relación de incertidumbre mínima,

$$\langle\phi|(\Delta A)^2(\Delta B)^2|\phi\rangle = \frac{1}{4}|\langle\phi|[A,B]|\phi\rangle|^2 \; , \tag{2.88}$$

es que

$$\Delta A|\phi\rangle = \mu\,\Delta B|\phi\rangle \; , \tag{2.89}$$

con μ un número imaginario puro.

En el problema 3.1 se deja como ejercicio comprobar que el tren de ondas gaussiano satisface dicha condición considerando los operadores de momento lineal y posición.

2.5. Descripciones equivalentes

Sean $\mathcal{O}$ y $\mathcal{O}'$ dos observadores con sus correspondientes representaciones completas. Queremos determinar el operador que relaciona a ambas representaciones equivalentes:

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{O} & & \mathcal{O}' \\ |u\rangle & \rightarrow & |u'\rangle \; , \end{array} \tag{2.90}$$

con $|u\rangle$ y $|u'\rangle$ pertenecientes a los espacios de Hilbert asociados a los observadores $\mathcal{O}$ y $\mathcal{O}'$, respectivamente. En la transformación (2.90) lo importante es que pasamos de un rayo de $\mathcal{O}$, donde cualquiera de sus elementos es adecuado para describir el correspondiente estado físico del sistema, a otro rayo de $\mathcal{O}'$, apto para describir el mismo estado del sistema desde el punto de vista de $\mathcal{O}'$. No se trata por tanto de que en la transformación se conserven los productos escalares sino los módulos de los mismos, dado que los cuadrados de éstos son los que determinan las probabilidades de transición.

Sean $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ dos vectores pertenecientes a $\mathcal{H}_{\mathcal{O}}$ (el espacio de Hilbert asociado a $\mathcal{O}$) y $|\alpha'\rangle$, $|\beta'\rangle$ los vectores de $\mathcal{H}_{\mathcal{O}'}$ que describen los mismos estados físicos desde el punto de vista de $\mathcal{O}'$. Como se ha dicho imponemos que la transformación (2.90) sea tal que,

$$|\langle\alpha|\beta\rangle| = |\langle\alpha'|\beta'\rangle| \; . \tag{2.91}$$

Sea $\{|a_n\rangle\}$ una base de $\mathcal{H}_{\mathcal{O}}$ y $\{|a'_n\rangle\}$ la base de $\mathcal{H}_{\mathcal{O}'}$ transformada de la anterior de $\mathcal{H}_{\mathcal{O}}$ y que por tanto corresponde a los mismos estados físicos pero vistos desde el punto de vista de $\mathcal{O}'$. Las fases de los estados de estos conjuntos completos de vectores se pueden elegir a nuestra conveniencia. Empleando dichas bases podemos por tanto escribir $|\alpha\rangle = \sum |a_n\rangle\langle a_n|\alpha\rangle$, $|\alpha'\rangle = \sum |a'_n\rangle\langle a'_n|\alpha'\rangle$, con las fases de $|\alpha\rangle$ y $|\alpha'\rangle$ también arbitrarias.[#4]

El Teorema de Wigner establece toda transformación biyectiva que satisfaga (2.91) se puede representar el espacio de Hilbert por un operador de dos tipos posibles:

I) Transformaciones unitarias:

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\beta\rangle &= \langle\alpha'|\beta'\rangle \; , \\ (c_1|\alpha_1\rangle + c_2|\alpha_2\rangle)' &= c_1|\alpha'_1\rangle + c_2|\alpha'_2\rangle \; . \end{aligned} \tag{2.92}$$

II) Transformaciones antiunitarias:

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\beta\rangle &= \langle\beta'|\alpha'\rangle = \langle\alpha'|\beta'\rangle^* \; , \\ (c_1|\alpha_1\rangle + c_2|\alpha_2\rangle)' &= c_1^*|\alpha'_1\rangle + c_2^*|\alpha'_2\rangle \; . \end{aligned} \tag{2.93}$$

Demostración. Consideremos el estado $|\varphi_n\rangle = |a_1\rangle + |a_n\rangle$. Veamos que podemos elegir la fase de los vectores transformados $|\varphi'_n\rangle$ y $|a'_n\rangle$ de $\mathcal{O}'$ tal que éste sea $|\varphi'_n\rangle = |a'_1\rangle + |a'_n\rangle$.

$$\begin{aligned} |\varphi'_n\rangle &= \sum_m |a'_m\rangle\langle a'_m|(|a_1\rangle + |a_n\rangle)' = \sum_m |a'_m\rangle e^{ir_{mn}}(\delta_{m\,1} + \delta_{m\,n}) = \\ &= e^{ir_{1n}}\,|a'_1\rangle + e^{ir_{nn}}\,|a'_n\rangle \; , \end{aligned} \tag{2.94}$$

donde hemos aplicado la condición fundamental (2.91). Redefiniendo la fase de $|\varphi'_n\rangle$ siempre se puede reabsorber el factor $e^{ir_{1n}}$, de modo que tenemos:

$$|\varphi'_n\rangle = |a'_1\rangle + e^{i(r_{nn}-r_{1n})}|a'_n\rangle \; . \tag{2.95}$$

Redefinimos entonces la fase del vector $|a'_n\rangle$ tal que se reabsorba el factor de fase $e^{i(r_{nn}-r_{1n})}$ con lo que llegamos al resultado deseado,

$$|\varphi'_n\rangle = |a'_1\rangle + |a'_n\rangle \; . \tag{2.96}$$

[#4] Dada la condición (2.91) es directo demostrar que el nuevo conjunto de vectores transformados $\{|a'_n\rangle\}$ es ortonormal y completo ya que si hubiere algún vector no nulo $|\alpha'\rangle$ tal que $\langle a'_n|\alpha'\rangle = 0$ para todo n entonces el vector $|\alpha\rangle$ sería linealmente independiente a la base ortonormal original $\{|a_n\rangle\}$, en contra de lo supuesto.

A continuación consideremos el estado $|\alpha\rangle$ y su transformado $|\alpha'\rangle$,

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_n c_n |a_n\rangle \ , \\ |\alpha'\rangle &= \sum_n c'_n |a'_n\rangle \ , \\ c_n &= \langle a_n|\alpha\rangle \ , \\ c'_n &= \langle a'_n|\alpha'\rangle \ . \end{aligned} \tag{2.97}$$

De modo que en virtud de (2.91),

$$|c_n| = |c'_n| \ . \tag{2.98}$$

Del mismo modo, teniendo en cuenta (2.91) y (2.96), se obtiene que $|\langle\varphi_n|\alpha\rangle| = |c_1+c_n|$ y $|\langle\varphi'_n|\alpha'\rangle| = |c'_1 + c'_n|$ son iguales, $|c'_1 + c'_n| = |c_1 + c_n|$. Elegimos la fase global de $|\alpha'\rangle$ tal que $c'_1 = c_1$,[#5] con lo que elevando al cuadrado la igualdad $|c_1 + c'_n| = |c_1 + c_n|$, tenemos:

$$c_1 c_n^* + c_1^* c_n = c_1^* c'_n + c_1 (c'_n)^* \ , \tag{2.99}$$

multiplicamos la igualdad anterior por c'_n,

$$c_1^*(c'_n)^2 - c'_n(c_1 c_n^* + c_1^* c_n) + c_1 |c_n|^2 = 0 \ . \tag{2.100}$$

Ésta es una ecuación de segundo grado en c'_n cuyas dos soluciones son:

$$\begin{aligned} c'_n &= \frac{c_1}{c_1^*} c_n^* \ , \ \text{ solución a) } , \\ c'_n &= c_n \ , \ \text{ solución b) } . \end{aligned} \tag{2.101}$$

Elegimos la fase de $|\alpha\rangle$ tal que c_1 sea real,[#6] de modo que la ecuación anterior se simplifica a:

$$\begin{aligned} c'_n &= c_n^* \ , \ \text{ solución a) } , \\ c'_n &= c_n \ , \ \text{ solución b) } . \end{aligned} \tag{2.102}$$

Demostremos a continuación que si se tiene la solución a) o b) para un cierto coeficiente c_n entonces se tiene la misma solución para cualquier otro coeficiente.[#7] Procedamos por reducción al absurdo. Supongamos que existen dos coeficientes c_k y c_l, ambos complejos (ya que de lo contrario no habría distinción entre los casos a) o b) para el coeficiente real), tal que se tiene que $c'_k = c_k$ y $c'_l = c_l^*$. Consideremos entonces el vector:

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|a_1\rangle + |a_k\rangle + |a_l\rangle\right) \ , \tag{2.103}$$

[#5] Si $|\alpha'\rangle$ es uno de los $|\varphi'_n\rangle$ o un elemento de la base transformada $\{|a'_n\rangle\}$, cuyas fases ya han sido fijadas, cumple automáticamente esta condición.

[#6] Esta condición se satisface de forma directa si $|\alpha\rangle$ es un elemento de la base $\{|a_n\rangle\}$.

[#7] Este paso falta en la demostración original de E.P. Wigner tal y como hace notar S. Weinberg en su libro [6] donde completa la demostración.

por lo que su transformado según la ec.(2.102), y al ser todos los coeficientes reales, es:

$$|\Phi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|a_1'\rangle + |a_k'\rangle + |a_l'\rangle\right) \ . \tag{2.104}$$

Igualando $|\langle\Phi|\alpha\rangle|^2 = |\langle\Phi'|\alpha'\rangle|^2$, tenemos la ecuación:

$$\left|1+\frac{c_k}{c_1}+\frac{c_l}{c_1}\right|^2 = \left|1+\frac{c_k'}{c_1}+\frac{c_l'}{c_1}\right|^2 \ , \tag{2.105}$$

donde hemos tenido en cuenta que $c_1' = c_1$. También dado que c_1 es real desarrollando la ecuación anterior tenemos,

$$\mathrm{Re}\left(c_k c_l^*\right) = \mathrm{Re}\left(c_k c_l\right) \ , \tag{2.106}$$

que es equivalente a,

$$\mathrm{Im}(c_k)\mathrm{Im}(c_l^*) = \mathrm{Im}(c_k)\mathrm{Im}(c_l) \ , \tag{2.107}$$

es decir,

$$\mathrm{Im}(c_k)\mathrm{Im}(c_l) = 0 \ . \tag{2.108}$$

Por lo tanto, o bien c_k o bien c_l o ambos son reales en contra de la suposición. Con esto hemos demostrado que dado un vector $|\alpha\rangle$ se ha de tener una de las dos transformaciones siguientes,

a) $|\alpha'\rangle = \sum c_n^*|a_n'\rangle$, transformación antiunitaria,

b) $|\alpha'\rangle = \sum c_n|a_n'\rangle$, transformación unitaria.

Todavía queda por demostrar que dado un nuevo vector arbitrario $|\beta\rangle = \sum_n d_n|a_n\rangle$ tenemos el mismo caso a) o b) que para $|\alpha\rangle$. Supongamos que no es así, es decir, que si $|\beta'\rangle = \sum_n d_n'|a_n'\rangle$, se tiene que $d_n' = d_n$ para $c_n' = c_n^*$ o bien que $d_n' = d_n^*$ para $c_n' = c_n$ con $n \geq 1$. Veamos entonces que llegamos a una contradicción. Supongamos que tenemos el segundo caso, si fuese el primero basta con intercambiar los papeles jugados por $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$, entonces,

$$|\langle\alpha'|\beta'\rangle|^2 = |\sum_n c_n^* d_n^*|^2 = |\sum c_n^* d_n|^2 = |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \ . \tag{2.109}$$

Desarrollando,

$$\sum_{m,n} c_n^* c_m d_n^* d_n \quad = \quad \sum_{m,n} c_n^* d_n c_m d_m^* \ , \tag{2.110}$$

es decir,

$$\sum_{m,n} c_n^* c_m \left(d_n^* d_m - d_n d_m^*\right) = 0 \ . \tag{2.111}$$

Agrupando en pares m, n, resulta por tanto la condición:

$$\sum_{k,l} \mathrm{Im}\left(c_n^* c_m\right) \mathrm{Im}\left(d_n^* d_m\right) = 0 \ . \tag{2.112}$$

La condición anterior se podría satisfacer en principio para dos vectores estados determinados $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, pero si éste es el caso siempre podemos elegir un tercer vector estado $|\gamma\rangle = \sum_k f_k |a_k\rangle$ tal que,

$$
\begin{aligned}
\sum_{m,n} \mathrm{Im}\,(f_n^* f_m)\,\mathrm{Im}\,(c_n^* c_m) &\neq 0 \;, \\
\sum_{m,n} \mathrm{Im}\,(f_n^* f_m)\,\mathrm{Im}\,(d_n^* d_m) &\neq 0 \;.
\end{aligned} \tag{2.113}
$$

Para ver que efectivamente esta elección de un vector $|\gamma\rangle$ es siempre posible considérese primero el caso en que $c_n^* c_m$ es complejo para algún m, n y que $d_k^* d_l$ es tambien complejo para algún k, l distintos entre sí, entonces basta tomar f_n, f_m, f_k, f_l complejos con fases distintas y el resto de coeficientes $f_j = 0$, para garantizar que se satisface la ecuación (2.113). Podría ocurrir que el par k, l es igual al par m, n en cuyo caso tómese f_n y f_m complejos y con fases distintas y el resto de coeficientes nulos. Finalmente, también podría darse el caso de que $n = k$ y $m \neq l$, o cualquier otra combinación pero siempre con dos subíndices iguales de los los conjuntos (m, n) y (k, l) y el resto distintos. En este caso tómese f_n, f_m y f_l complejos con fases distintas y el resto de coeficientes iguales a cero.

Las ecuaciones (2.113), en contraposición con la ecuación (2.112), implican por tanto que la misma elección a) o b) se ha realizado para los vectores $|\gamma\rangle$ y $|\alpha\rangle$ y análogamente para los vectores $|\gamma\rangle$ y $|\beta\rangle$. Como el vector $|\gamma\rangle$ es común se sigue por tanto que la misma elección se ha tenido que hacer también para los vectores $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$, en contra de lo supuesto.

Por supuesto, la excepción al razonamiento dado para que la transformación sobre $|\beta\rangle$ sea del mismo tipo que sobre $|\alpha\rangle$ es que los coeficientes de $|\beta\rangle$ sean reales, pero en tal caso no hay distinción entre transformación unitaria y antiunitaria sobre $|\beta\rangle$. Con esto se concluye la demostración del teorema de Wigner.

De acuerdo con este teorema cualquier operador Λ que transforma las bases de dos observadores equivalentes, $\{|a_n\rangle\} \to \{|a_n'\rangle\}$ debe ser unitario o antiunitario,

$$
\Lambda |a_n\rangle = |a_n'\rangle \;. \tag{2.114}
$$

<u>Unitario:</u>

$$
|\alpha'\rangle = \Lambda|\alpha\rangle = \Lambda \sum_n \langle a_n|\alpha\rangle |a_n\rangle = \sum_n \langle a_n|\alpha\rangle \Lambda |a_n\rangle = \sum_n \langle a_n|\alpha\rangle |a_n'\rangle \;. \tag{2.115}
$$

<u>Antiunitario:</u>

$$
|\alpha'\rangle = \Lambda|\alpha\rangle = \Lambda \sum_n \langle a_n|\alpha\rangle |a_n\rangle = \sum_n \langle a_n|\alpha\rangle^* \Lambda |a_n\rangle = \sum_n \langle a_n|\alpha\rangle^* |a_n'\rangle \;, \tag{2.116}
$$

por lo tanto cualquier operador antiunitario lo podemos escribir como $\Lambda = U\,K$, siendo U un operador unitario y K el operador que cambia los números complejos en sus complejos conjugados. Esta representación de Λ depende de la base que se ha tomado puesto que K actúa sobre los coeficientes, que por supuesto dependen de la base.

Veremos en los capítulos posteriores que la naturaleza unitaria o antiunitaria de la transformación Λ se podrá determinar atendiendo a las características físicas del problema. No obstante, nos encontramos en condiciones de comprobar que si dicha transformación Λ depende de uno o más parámetros continuos, por ejemplo rotaciones, traslaciones espacio-temporales, etc, debe ser unitaria. El razonamiento se basa simplemente en que una transformación dependiente de un parámetro continuo se puede expresar como el resultado de aplicar dos transformaciones sucesivas,

$$\Lambda_\varphi = \Lambda_{\varphi_2} \cdot \Lambda_{\varphi_1} \ , \tag{2.117}$$

donde los φ representan parámetros continuos. Dado que el producto de dos transformaciones antiunitarias o unitarias es unitario, ello implica que finalmente Λ_φ es unitaria.

Parte II

Simetrías

Capítulo 3

Desplazamientos en el tiempo y ecuaciones de movimiento

Este capítulo ¡unda parte del curso que constituye un amplio bloque dedicado al estudio de transformaciones que dejan invariantes las ecuaciones de movimiento para un conjunto muy amplio de interacciones. De hecho algunas de estas simetrías, como traslaciones espacio-temporales y rotaciones en sistemas cerrados son exactas para todas las interacciones conocidas. El estudio de dichas simetrías es de gran importancia puesto que, conocida una solución, podemos generar muchas otras soluciones sin conocer los detalles dinámicos del problema sin más que explotando las simetrías conocidas del mismo, que de hecho pueden ser comunes a otras muchas interacciones. Esto es de sumo interés, ya que nos permite distinguir entre aspectos puramente dinámicos, que conducen a una cierta solución, y otros relacionados con la posibilidad de cambiar de unos observadores a otros, estando éstos relacionados por dichas transformaciones de simetría y que por tanto no tienen contenido dinámico relativo a una interacción dada.

Otro aspecto de interés para el estudio de las simetrías es que conducen a la existencia de observables asociados a las mismas, que en muchas ocasiones serán constantes de movimiento y que en todas constituyen observables valiosos para caracterizar los sistemas físicos. En el caso de sistemas cerrados, todas estas cantidades son conservadas pero incluso en sistemas no cerrados, aunque en general no sea así, tales cantidades siguen siendo empleadas para el estudio de los mismos. Las simetrías nos indican que tales observables existen, aunque no nos proporcionan una expresión de los mismos en términos de las variables dinámicas. Esto se conseguirá típicamente mediante el empleo del principio de correspondencia a partir de sus expresiones clásicas.

3.1. El operador de evolución temporal

El tiempo t es un parámetro continuo de la teoría, $-\infty < t < +\infty$. De hecho, más adelante veremos en la sección 4.2 que t no se puede asociar con el espectro de ningún operador hermítico.

Consideremos primero el caso de sistemas cerrados, esto es, sistemas que no interactúan con ningún otro. Inicialmente en $t = t_0$ se tiene preparado un conjunto de estados $\{|a'\, t_0\rangle\}$, base del espacio de Hilbert, donde los a' se refieren a los números cuánticos de un conjunto completo de observables compatibles. Estos estados evolucionan con el tiempo, de modo que para $t > t_0$,

$$|a'\,t_0\rangle \to |a'\,t_0, t\rangle \ , \tag{3.1}$$

y, en general, serán estados distintos. De modo que si inicialmente $(A-a')|a't_0\rangle = 0$, se tendrá en general que $(A-a')|a't_0,t\rangle \neq 0$. Sin embargo, dado que el sistema es cerrado, el origen de tiempos es arbitrario y el espectro de cualquier observable A independiente de t no debe depender del instante de tiempo en que se determine. En particular para $t > t_0$ se deberá seguir teniendo el mismo espectro y, por lo tanto, es razonable establecer que la transformación (3.1) debe venir dada por un operador unitario, dado que éstos conservan los espectros de los observables, como vimos en la sección 2.3. #1 Dicho operador unitario, $U(t,t_0)$, sólo dependerá de la diferencia entre el tiempo t y el tiempo inicial t_0 y lo indicaremos por $U(t-t_0)$. Por lo tanto:

$$|a't_0, t\rangle = U(t-t_0)|a't_0\rangle \ . \tag{3.2}$$

Dicho operador cumplirá que:

$$\begin{aligned} U(0) &= 1 \ , \\ U(t-t')U(t'-t_0) &= U(t-t_0) \ , \ \ t_0 \le t' \le t \ . \end{aligned} \tag{3.3}$$

Como consecuencia de las relaciones anteriores se tiene que,

$$U(t-t')U(t'-t) = U(t-t) = U(0) = 1 \ , \tag{3.4}$$

y por ser unitario cumple además que,

$$U^{-1}(t-t') = U^\dagger(t-t') = U(t'-t) \ . \tag{3.5}$$

Procedamos a construir explícitamente dicho operador. Tomemos $t-t_0 = \delta t$ un intervalo de tiempo infinitesimal y, por lo tanto, $U(\delta t) - 1$ será un operador infinitesimal δU,

$$U(\delta t) = 1 + \delta U(\delta t) \ . \tag{3.6}$$

De (3.3) se sigue a primer orden en δU que,

$$\begin{aligned} U(\delta t_1)U(\delta t_2) &= 1 + \delta U(\delta t_1) + \delta U(\delta t_2) = 1 + \delta U(\delta t_1 + \delta t_2) \ , \\ \delta U(\delta t_1 + \delta t_2) &= \delta U(\delta t_1) + \delta U(\delta t_2) \ , \end{aligned} \tag{3.7}$$

con lo que $\delta U(\delta t)$ es lineal en δt y, por lo tanto, proporcional a δt. Imponiendo unitariedad y conservando cantidades a orden $\delta U \propto \delta t$:

$$(1+\delta U)(1+\delta U^\dagger) = 1 + \delta U + \delta U^\dagger = 1 \ , \tag{3.8}$$

#1 En mecánica clásica es bien sabido que la evolución temporal en el espacio de fases se puede considerar como un simple cambio de sistema de referencia. Manteniendo este aspecto fundamental en mecánica cuántica, se sigue a partir del teorema de Wigner que el operador de evolución temporal $U(t-t_0)$, que depende del parámetro continuo t, debe ser un operador unitario.

por lo tanto $\delta U + \delta U^\dagger = 0$, con lo que δU es un operador antihermítico.

Teniendo en cuenta que $\delta U \propto \delta t$ y su carácter antihermítico escribimos:

$$\delta U = -iH\delta t/\hbar \ , \tag{3.9}$$

con H un operador hermítico que se conoce como el generador de las traslaciones temporales o Hamiltoniano. Dado que estamos considerando sistemas cerrados, H no depende de t. Llegamos pues a la existencia del observable H aunque, como anunciamos, los argumentos de simetría no nos dicen qué forma debe tener dicho observable, sólo nos dicen que existe.

Estudiemos a continuación la ecuación diferencial satisfecha por U,

$$\begin{aligned} dU(t) = U(t+\delta t) - U(t) &= U(\delta t)U(t) - U(t) = -i\frac{H\delta t}{\hbar}U(t) = \frac{dU}{dt}\delta t \ , \\ \frac{dU}{dt} &= \frac{-iH}{\hbar}U \ . \end{aligned} \tag{3.10}$$

Por lo tanto:

$$i\hbar\frac{dU(t)}{dt} = H\,U(t) \ . \tag{3.11}$$

Esta ecuación diferencial de primer orden en t, junto con la condición inicial $U(0) = 1$, se puede resolver de forma sencilla dado que H conmuta consigo mismo y su solución es:

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \ . \tag{3.12}$$

Como consecuencia de (3.2) y de (3.11) se puede deducir la ecuación de Schrödinger que dicta la evolución temporal de cualquier estado,

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi t_0, t\rangle = i\hbar\frac{dU(t)}{dt}|\psi t_0\rangle = H|\psi t_0, t\rangle \ , \tag{3.13}$$

de modo que

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi t_0, t\rangle = H|\psi t_0, t\rangle \ , \tag{3.14}$$

siendo ésta la conocida como ecuación de Schrödinger (ES) con H el Hamiltoniano del sistema. La condición inicial que se impone en su solución es

$$|\psi t_0, t_0\rangle = |\psi t_0\rangle \ . \tag{3.15}$$

De nuevo la solución de (3.14) con la condición inicial (3.15), es directa dado que H al no depender de t conmuta consigo mismo,

$$|\psi t_0, t\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}|\psi t_0\rangle \ , \tag{3.16}$$

obteniéndose la misma ecuación que (3.2), como debe ser. Para el caso particular en que $|\psi t_0\rangle \equiv |Et_0\rangle$ sea un autoestado del Hamiltoniano con energía definida E,[#2] $H|Et_0\rangle = E|Et_0\rangle$, se tiene:

$$|Et_0, t\rangle = e^{-iE(t-t_0)/\hbar}|Et_0\rangle \ , \tag{3.17}$$

[#2] Para sistemas cerrados el Hamiltoniano coincide con la energía del sistema.

es decir la evolución temporal simplemente cambia la fase asociada al vector. Se habla de estados estacionarios dado que el rayo asociado al vector $|Et_0\rangle$ no cambia con la evolución temporal. De hecho, como consecuencia de (3.17), se obtiene una expresión sencilla para expresar la dependencia temporal de los elementos de matriz de un operador arbitrario B independiente de tiempo en la base de autoestados con energía definida,

$$\langle E' t_0, t|B|E'' t_0, t\rangle = e^{i(E'-E'')(t-t_0)/\hbar}\langle E' t_0|B|E'' t_0\rangle \ . \tag{3.18}$$

Los resultados anteriores se han referido a sistemas cerrados. Vamos a generalizarlos a continuación para sistemas no cerrados. La diferencia principal es que para sistemas no cerrados el origen de tiempo no es una mera convención y por ello empleamos la notación $U(t,t_0)$ para indicar el operador unitario de evolución desde el instante de tiempo inicial t_0 al tiempo t. Seguimos hablando de operador de evolución temporal unitario dado que el espectro de cualquier observable independiente del tiempo debe seguir siendo el mismo independientemente del instante de tiempo considerado t incluso para sistemas no cerrados, ya que el espectro es una propiedad intrínseca del operador.[#3] Así mismo, se deben seguir la ley de multiplicación,

$$U(t_3,t_1) \ = \ U(t_3,t_2)U(t_2,t_1) \ , \ \ t_1 \le t_2 \le t_3 \ , \tag{3.19}$$

y como consecuencia

$$U(t_1,t_2) \ = \ U^{-1}(t_2,t_1) \ . \tag{3.20}$$

Tomando desplazamientos de tiempo infinitesimales δt y argumentando como en el caso de sistemas cerrados,

$$U(t+\delta t, t) = 1 + \delta U(t,\delta t) \ , \tag{3.21}$$

con $\delta U(t,\delta t)$ antihermítico y proporcional a δt y, por lo tanto, podemos escribir:

$$U(t+\delta t, t) = 1 - \frac{i}{\hbar}H(t)\delta t \ , \tag{3.22}$$

con $H(t)$ un operador hermítico correspondiente al Hamiltoniano. Sin embargo para sistemas no cerrados $H = H(t)$ depende explícitamente de t en general. Del mismo modo que se dedujo la ecuación (3.11), tenemos la ecuación de evolución temporal de $U(t,t_0)$,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dU(t,t_0)}{dt} &= H(t)U(t,t_0) \ , \\ U(t_0,t_0) &= 1 \ . \end{aligned} \tag{3.23}$$

De donde se sigue la ecuación de Schrödinger para los estados, del mismo modo que se dedujo (3.14),

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}|\psi t_0, t\rangle &= H(t)|\psi t_0, t\rangle \ , \\ |\psi t_0, t_0\rangle &= |\psi t_0\rangle \ . \end{aligned} \tag{3.24}$$

[#3] Véase la nota a pie de página #1.

Dado que $H(t)$ en general no conmuta consigo mismo para tiempos distintos, la solución (3.12) no es válida para (3.23). No obstante, esta última ecuación admite la solución integral:

$$U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')U(t',t_0)dt' \ . \tag{3.25}$$

Este tipo de ecuaciones integrales admiten como solución formal la llamada serie de Dyson. Esta serie sólo podrá ser empleada cuando $H(t)(t-t_0) \ll \hbar$, por ejemplo en sistemas prácticamente en reposo con potenciales muy débiles. La serie de Dyson se construye resolviendo la ecuación integral (3.25) de forma iterativa, primero consideramos la solución trivial a (3.25) $U_0(t,t_0)=1$ válida para $H(t)=0$. A continuación, insertamos $U_0=1$ en la integral (3.25) para $U(t',t_0)$, con lo que resulta

$$U_1(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')dt' \ , \tag{3.26}$$

que es la solución a (3.25) a primer orden en H. De este modo, $U_{n+1}(t,t_0)$ se construye iterativamente a partir de $U_n(t,t_0)$ sin más que sustituir en la integral éste último,

$$\begin{aligned} U_{n+1}(t,t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')U_n(t,t_0)\,dt' \\ &= 1 + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} H(t_1)\,dt_1 + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} H(t_2)\int_{t_0}^{t_2} H(t_1)\,dt_1 dt_2 \\ &\quad +... + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{n+1}\int_{t_0}^{t} H(t_{n+1})\int_{t_0}^{t_{n+1}} H(t_n)...\int_{t_0}^{t_2} H(t_1)\,dt_1 dt_2...dt_{n+1} \ . \end{aligned} \tag{3.27}$$

La serie de Dyson se expresa finalmente como,

$$U(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_n} ... \int_{t_0}^{t_2} H(t_n)H(t_{n-1})...H(t_2)H(t_1)\,dt_1 dt_2...dt_n \ . \tag{3.28}$$

Fijémonos como el producto de los distintos Hamiltonianos está ordenado temporalmente, de modo que, de izquierda a derecha, el argumento temporal del Hamiltoniano va disminuyendo. Primero actúan los Hamiltonianos evaluados en instantes de tiempo menores.

Si $[H(t),H(t')]=0$ la serie de Dyson se puede sumar y su resultado explícito es:

$$U(t,t_0) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,dt'\right) \ , \tag{3.29}$$

como se puede demostrar explícitamente aplicando el desarrollo en serie de la exponencial de un operador o comprobando que trivialmente se satisface (3.23).

3.2. Imágenes de Schrödinger y Heisenberg

Imagen de Schrödinger. En la sección anterior hemos establecido el operador de evolución temporal $U(t,t_0)$ actuando sobre los estados que cumplen la ecuación de Schrödinger (3.14). Este esquema corresponde con la imagen de Schrödinger en la que los estados evolucionan con el tiempo y los operadores que no dependen explícitamente de t permanecen constantes.

$$|\psi t_0, t\rangle_S = U(t,t_0)|\psi t_0, t\rangle_S \; , \tag{3.30}$$

donde el subíndice se refiere a que estamos considerando estados en la imagen de Schrödinger. Del mismo modo dado un operador $A(t)$ indicaremos por $A_S(t)$ que lo estamos considerando en la imagen de Schrödinger. Los elementos de matriz de un operador $A_S(t)$ evolucionan con el tiempo de acuerdo a:

$${}_S\langle\psi t_0, t|A_S(t)|\psi t_0, t\rangle_S = {}_S\langle\psi t_0|U^\dagger A_S(t) U|\psi t_0\rangle_S \; , \tag{3.31}$$

mientras que los productos escalares no cambian con el tiempo,

$${}_S\langle\psi t_0, t|\psi' t_0, t\rangle_S = {}_S\langle\psi t_0|\psi' t_0\rangle_S \; . \tag{3.32}$$

En (3.31) se ha considerado el caso genérico en que $A_S(t)$ pueda depender explícitamente del tiempo.

Imagen de Heisenberg. Teniendo en cuenta que las magnitudes observadas se calculan a partir de productos escalares, podemos también considerar la situación en que los operadores son los que evolucionan temporalmente mientras que los estados permanecen constantes. La evolución temporal de los operadores debe ser tal que dé lugar a los mismos elementos de matriz que en la imagen de Schrödinger dados en (3.31).

$${}_S\langle\psi t_0, t|A_S(t)|\psi t_0, t\rangle_S = {}_S\langle\psi t_0|U^\dagger A_S(t) U|\psi t_0\rangle_S = {}_H\langle\psi|A_H(t)|\psi\rangle_H \; , \tag{3.33}$$

donde el subíndice H se refiere a que estamos tomando la imagen de Heisenberg para estados y operadores. De este modo,

$$\begin{aligned} A_H(t) &= U^\dagger A_S(t)\, U \; , \\ |\psi\rangle_H &= |\psi t_0\rangle_S = U^\dagger(t,t_0)|\psi t_0, t\rangle_S \; , \end{aligned} \tag{3.34}$$

y la imagen de Heisenberg es unitariamente equivalente a la de Schrödinger. Notemos como la ley anterior para transformar a un operador desde la imagen de Schrödinger a la imagen de Heisenberg es un caso particular de la transformación unitaria de un operador (2.60). De (3.34) y de la ecuación de evolución satisfecha por $U(t,t_0)$ (3.23), se deduce la siguiente ecuación de evolución temporal de los operadores $A_H(t)$:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dA_H(t)}{dt} &= i\hbar\frac{dU^\dagger(t,t_0)}{dt}A_S(t)U(t,t_0) + U^\dagger(t,t_0)A_S(t)i\hbar\frac{dU(t,t_0)}{dt} + U^\dagger(t,t_0)i\hbar\frac{\partial A_S(t)}{\partial t}U(t,t_0) \\ &= -U^\dagger H_S A_S U + U^\dagger A_S H_S U + U^\dagger i\hbar\frac{\partial A_S}{\partial t}U \; . \end{aligned} \tag{3.35}$$

Insertando $UU^\dagger = 1$ entre los productos de A_S por H_S, resulta finalmente:

$$i\hbar\frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H_H(t)] + U^\dagger(t,t_0)i\hbar\frac{\partial A_S(t)}{\partial t}U(t,t_0) \; , \tag{3.36}$$

con $H_H(t) = U^\dagger(t,t_0)H_S(t)U(t,t_0)$.

Para un sistema cerrado donde $H_S(t)$ es independiente de t, de (3.12) $[U(t-t_0), H_S] = 0$ y por lo tanto $H_H(t) = H_S \equiv H$. Además si A_S no depende explícitamente de t, la ecuación de movimiento (3.36) se reduce a:

$$i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H] \ . \tag{3.37}$$

Por lo tanto, si $[A_S, H] = 0$, $A_H(t) = A_S = A$ y no hay dependencia temporal en los elementos de matriz del operador A.

Para el caso de sistemas no cerrados tales que $[H(t), H(t')] = 0$, de nuevo se tiene que $H_H(t) = H_S(t) \equiv H(t)$ teniendo en cuenta la expresión de $U(t, t_0)$ para este caso (3.29).

A nivel general es importante señalar que dados dos operadores A_H y B_H entonces se cumple:

$$[A_H, B_H] = U^\dagger(t, t_0)[A_S, B_S]U(t, t_0) \ , \tag{3.38}$$

En general cualquier relación algebraica entre operadores en la imagen de Heisenberg se obtiene de transformar la misma relación algebraica en la imagen de Schrödinger, dado que la ley de transformación (3.34) es unitaria.

Conviene también recordar la ecuación de evolución temporal para la matriz densidad (1.67),

$$i\hbar \frac{d\rho_S(t)}{dt} = [H, \rho_S(t)] \ . \tag{3.39}$$

Comparándola con la ecuación de evolución de un operador en la imagen de Heisenberg (3.37) apreciamos la existencia de un signo menos. Recordemos que $\rho_S(t)$ en la ecuación (1.67) está dada en la imagen de Schrödinger. En la imagen de Heisenberg la matriz densidad no evoluciona temporalmente.

3.3. Imagen de Dirac o de interacción y la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo

La imagen de Dirac es de gran utilidad cuando el Hamiltoniano al que está sometido el sistema se puede descomponer como la suma de un Hamiltoniano no perturbado H_0, que se sabe resolver exactamente, y de una perturbación H', de forma que,

$$H = H_0 + H' \ . \tag{3.40}$$

Si hay dependencia temporal, el caso más habitual es que ésta esté contenida en $H'(t)$. En la imagen de Dirac tanto operadores como estados evolucionan temporalmente, además de dependencias explícitas temporales que puedan afectar a los operadores. De nuevo la correspondencia entre la imagen de Dirac y la de Schrödinger se establece a través de un operador unitario, tal que se garantiza que los productos escalares y elementos de matriz sean invariantes, independientes de la imagen en que se calculen. Supondremos en lo que sigue que H_0 es independiente de t. Tomando $t_0 = 0$ como origen de tiempos, para simplificar la notación, definimos:

$$|\psi, t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar}|\psi, t\rangle_S \ , \tag{3.41}$$

si $H'=0$ entonces $|\psi,t\rangle_I = |\psi,t\rangle_H$. La ecuación de evolución de los estados en la imagen de Dirac se deduce de (3.41),

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d|\psi,t\rangle_I}{dt} &= -H_0 e^{iH_0t/\hbar}|\psi,t\rangle_S + e^{iH_0t/\hbar}(H_0+H')|\psi,t\rangle_S = e^{iH_0t/\hbar}H'|\psi,t\rangle_S \\ &= \left(e^{iH_0t/\hbar}H'e^{-iH_0t/\hbar}\right)e^{iH_0t/\hbar}|\psi t\rangle_S \;. \\ i\hbar\frac{d|\psi,t\rangle_I}{dt} &= H'_I(t)|\psi,t\rangle_I \;, \end{aligned} \tag{3.42}$$

y $|\psi,t_0\rangle_I = |\psi,t_0\rangle_S$. En (3.42) hemos designado por $H'_I(t)=e^{iH_0t/\hbar}H'(t)e^{-iH_0t/\hbar}$, la perturbación en la imagen de interacción.

Dada la transformación unitaria (3.41) sobre los estados, para que las imágenes de Dirac y de Schrödinger sean unitariamente equivalentes, entonces la transformación unitaria sobre los observables, de acuerdo a (2.60), viene dada por:

$$A_I(t) = e^{iH_0t/\hbar}A_S(t)e^{-iH_0t/\hbar} \;. \tag{3.43}$$

<u>Operador de evolución y serie de Dyson.</u> El operador de evolución en la imagen de interacción será tal que,

$$|\psi,t_2\rangle_I = U_I(t_2,t_1)|\psi,t_1\rangle_I \;. \tag{3.44}$$

De la expresión anterior y de (3.41) tenemos,

$$e^{iH_0t_2/\hbar}U_S(t_2,t_1)|\psi,t_1\rangle_S \;=\; U_I(t_2,t_1)e^{iH_0t_1/\hbar}|\psi,t_1\rangle_S \;, \tag{3.45}$$

como la igualdad es válida para todo $|\psi,t_1\rangle_S$ se obtiene la siguiente relación entre operadores

$$e^{iH_0t_2/\hbar}U_S(t_2,t_1) = U_I(t_2,t_1)e^{iH_0t_1/\hbar} \;, \tag{3.46}$$

por lo tanto

$$U_S(t_2,t_1) = e^{-iH_0t_2/\hbar}U_I(t_2,t_1)e^{iH_0t_1/\hbar} \;, \tag{3.47}$$

que nos relaciona el operador de evolución en la imagen de Schrödinger, y que por tanto involucra el Hamiltoniano total $H=H_0+H'$, con el operador de evolución U_I en la imagen de interacción. De las expresiones (3.42) y (3.44) éste último obedece:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dU_I(t,t_1)}{dt} &= H'_I(t)U_I(t,t_1) \;, \\ U_I(t_1,t_1) &= 1 \;. \end{aligned} \tag{3.48}$$

que sólo involucra $H'_I(t)$. La ecuación (3.48) es del mismo tipo que (3.23) ya discutida cuando consideramos Hamiltonianos dependientes de tiempo para sistemas no cerrados en la imagen de Schrödinger. Así, en lugar de (3.25), tenemos ahora:

$$U_I(t_2,t_1) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2} H'_I(t')U_I(t',t_1)dt' \;. \tag{3.49}$$

Y, por lo tanto, podemos obtener una solución de (3.49) en serie de Dyson. La ventaja que presenta la imagen de Dirac es que la ecuación integral (3.49) sólo involucra la perturbación H'_I y no todo el Hamiltoniano, incluyendo H_0, mientras que en la aplicación que hicimos de la serie de Dyson (3.28) para la imagen de Schrödinger era necesario que el Hamiltoniano total pudiese ser considerado pequeño. Aplicando la serie de Dyson para resolver (3.49) en lugar de (3.28), tendremos:

$$U_I(t_2,t_1) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_1}^{t_2} \int_{t_1}^{t'_n} \int_{t_1}^{t'_{n-1}} ... \int_{t_1}^{t'_2} H'_I(t'_n) H'_I(t'_{n-1}) ... H'_I(t'_2) H'_I(t'_1)\, dt'_1 dt'_2 ... dt'_n \ . \tag{3.50}$$

Típicamente H'_I involucra algún parámetro pequeño adimensional, por ejemplo $\lambda \ll 1$, de modo que $H'_I = \mathcal{O}(\lambda)$ y la serie de Dyson es por lo tanto una serie de potencias en el parámetro pequeño λ. En aplicaciones prácticas, la serie anterior se trunca en sus primeros términos y esta truncación será tanto más precisa cuanto menor sea el parámetro λ sobre el que se perturba. La serie de Dyson da lugar a la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, consistiendo la aproximación en truncar la serie de Dyson después de calcular unos pocos términos.

Ejemplo. Sean $|a'\rangle$ y $|b'\rangle$ dos autoestados distintos de H_0. Debido a la perturbación H' se pide determinar la probabilidad de transición del estado $|a'\rangle$ al estado $|b'\rangle$ tras un tiempo t a primer orden en teoría de perturbaciones.

Dicha probabilidad viene dada por $|\langle b'|U_S(t)|a'\rangle|^2$, dado que $U_S(t)|a'\rangle$ es el estado evolucionado temporalmente del estado inicial $|a'\rangle$. El punto esencial está en emplear la relación (3.47) entre U_S y U_I, siendo éste último el que se calcula en teoría de perturbaciones de acuerdo a la serie de Dyson a primer orden en H'_I, según se nos pide. De este modo:

$$\begin{aligned} |\langle b'|U_S(t)|a'\rangle|^2 &= |\langle b'|U_0(t-t_0)U_I(t,t_0)U_0^\dagger(t_0-t_0)|a'\rangle|^2 = |\langle b'|U_I(t,t_0)|a'\rangle|^2 \\ &= \left|\langle b'|1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_I(t')dt'|a'\rangle\right|^2 \ . \end{aligned} \tag{3.51}$$

En la expresión anterior hemos tenido en cuenta que el operador de evolución correspondiente a H_0 (el Hamiltoniano sin perturbar) es $U_0(t-t_0) = e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}$. También hemos hecho uso de que los estados $|a'\rangle$ y $|b'\rangle$ son autoestados de H_0, de modo que

$$e^{-iH_0 t/\hbar}|a'(b')\rangle = e^{-iE_{a'(b')}t/\hbar}|a'(b')\rangle \ , \tag{3.52}$$

y las exponenciales de módulo unidad desaparecen al tomar el módulo en (3.51). Dado que los estados son ortogonales y teniendo en cuenta la definición de H'_I, tenemos por lo tanto,

$$|\langle b'|U_S(t)|a'\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i(E_b-E_a)t'/\hbar}\langle b'|H'(t')|a'\rangle dt'\right|^2 \ . \tag{3.53}$$

Para el caso relevante en que H' no dependa de t, la expresión anterior se reduce a:

$$|\langle b'|U_S(t)|a'\rangle|^2 = |\langle b'|H'|a'\rangle|^2 \, \frac{4\,\mathrm{sen}^2(E_b-E_a)t/2\hbar}{(E_b-E_a)^2} \ . \tag{3.54}$$

Esta expresión se puede utilizar incluso cuando $E_b = E_a$ dado que como consecuencia de la integración sobre el tiempo t se obtiene que el numerador también se anula. Por supuesto, el resultado obtenido en este límite es el mismo que resulta de calcular directamente (3.53) cuando $E_a = E_b$. Haciendo dicho límite, que es cuando la función que multiplica al elemento de matriz es máxima, y dado que la probabilidad debe ser menor que uno, se tiene que el resultado anterior es válido para,

$$|\langle b'|H'|a'\rangle|^2\, t^2/\hbar^2 \ll 1, \tag{3.55}$$

esta restricción es así más estricta conforme el tiempo aumenta.

Para $E_a \neq E_b$ la situación es más favorable dado que de (3.54) se require que,

$$\frac{4|\langle b'|H'|a'\rangle|^2}{(E_b - E_a)^2} \ll 1 \;, \tag{3.56}$$

es decir, los elementos de matriz de la perturbación deben ser mucho menores que las diferencias entre las energías del Hamiltoniano no perturbado.

Una aplicación muy importante de la fórmula (3.54) es para el caso del espectro continuo. Supongamos que E_b esté contenido en el intervalo $E_a - \Delta E/2 < E_b < E_a + \Delta E/2$ y que $P(E)$ sea la función de distribución de estados de energía, tal que

$$P(E)dE \;, \tag{3.57}$$

es el número de estados contenidos en el elemento infinitesimal dE. La integral (3.54) en dicho intervalo de energía nos da la probabilidad de que tenga lugar la transición,

$$P_{\Delta E} \simeq |\langle b'|H'|a'\rangle|^2 \int_{\Delta E} dE\, P(E)\, \frac{4\text{sen}^2(E-E_a)t/2\hbar}{(E-E_a)^2} \;, \tag{3.58}$$

donde hemos supuesto que el elemento de matriz $\langle b'|H'|a'\rangle$ es una función suave de la energía E y que para intervalos suficientemente pequeños se puede extraer fuera. Lo mismo supondremos a continuación también para $P(E)$. Haciendo además el cambio de variable

$$x = \frac{t}{2\hbar}(E - E_a) \;, \tag{3.59}$$

resulta

$$\begin{aligned} P_{\Delta E} &\simeq |\langle b'|H'|a'\rangle|^2 P(E) 4\frac{t}{2\hbar}\int dx\, \frac{\text{sen}^2 x}{x^2} \;, \\ &\simeq |\langle b'|H'|a'\rangle|^2 P(E) \frac{2t}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{\text{sen}^2 x}{x^2} \;. \end{aligned} \tag{3.60}$$

Donde hemos cambiado el límite de integración bajo la suposición razonable que

$$\frac{\Delta E\, t}{\hbar} \gg 1 \;, \tag{3.61}$$

que siempre se cumplirá para tiempos suficientemente grandes. Finalmente tenemos:

$$P_{\Delta E} \simeq P(E)|\langle b'|H'|a'\rangle|^2 \frac{2\pi t}{\hbar} \;. \tag{3.62}$$

Esta fórmula debida a Dirac ha tenido muchas aplicaciones para el estudio en teoría de perturbaciones de procesos de transiciones entre estados estacionarios de sistemas diversos. Por eso Fermi la bautizó como "Regla de Oro". Dado que $P_{\Delta E}$ debe ser mucho menor que uno, esta fórmula es aplicable para el caso en que:

$$|\langle b'|H'|a'\rangle|^2 t/\hbar\Delta E \ll 1 \; , \tag{3.63}$$

es importante tener en cuenta a su vez que la restricción (3.61) queda violada para $t \sim \hbar/\Delta E$. Introduciendo este tiempo en la expresión anterior:

$$\frac{|\langle b'|H'|a'\rangle|^2}{(\Delta E)^2} \ll 1 \; , \tag{3.64}$$

restricción con sentido en la medida en que ΔE sea del orden de cualquier elemento típico de matriz de H_0 que se suponen mucho mayores que aquellos de H'. Por lo tanto (3.64) se prevé que se cumpla en buena aproximación en el intervalo de tiempo que cumpla (3.61). No obstante, pueden ocurrir ciertas supresiones de origen puramente cinemático y no dinámico que haga que ΔE sea inusualmente pequeño.

Diferenciando la ecuación (3.62) respecto del tiempo se obtiene la probabilidad de transición por unidad de tiempo,

$$\dot{P}_{\Delta E} = P(E)|\langle b'|H'|a'\rangle|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \; , \tag{3.65}$$

de gran importancia ya que de ella se puede obtener la vida media del sistema sin mas que linealizando la ley de desintegración exponencial, $\exp^{-t\Gamma} = 1 - t\Gamma + \cdots$ e identificado $\Gamma = -\dot{P}_{\Delta E}$.

3.4. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo

Salvo casos contados, por ejemplo los más habituales serían el potencial de Coulomb, oscilador armónico, potenciales delta y pozos cuadrados, no se pueden obtener algebraicamente las autofunciones de un Hamiltoniano genérico H. Es necesario recurrir a la teoría de perturbaciones estacionaria que presentamos en este punto descomponiendo H en la suma de un Hamiltoniano cuya solución es conocida, H_0, y de una perturbación $H' \ll H_0$ (en el sentido especificado en (3.66)). El estudio de la teoría de perturbaciones independiente del tiempo ya se ha realizado en el curso de *Física Cuántica* del tercer curso. Presentamos aquí un formalismo compacto que englobe tanto subespacios degenerados como no degenerados de H_0. Nos centraremos en el espectro discreto de H_0 dado que el espectro continuo es propio de teoría de colisiones y en el capítulo 11 desarrollaremos métodos aproximados para resolver el problema de colisiones.

Supongamos que $H = H_0 + H'$, donde H_0 se sabe resolver y son conocidas sus autofunciones. Supondremos que H' es pequeño comparado con H_0 tal que,

$$|\langle E_m^{(0)}, q|H'|E_n^{(0)}, p\rangle| \ll |\langle E_m^{(0)}, q|H_0|E_m^{(0)}, q\rangle - \langle E_n^{(0)}, p|H_0|E_n^{(0)}, p\rangle| \; , \; E_m^{(0)} \neq E_n^{(0)} \; , \tag{3.66}$$

donde el superíndice (0) indica que las energías y autovectores lo son de H_0 y los índices $p(q)$ se refieren a otros números cuánticos que caracterizan las autofunciones además de la energía y que son compatibles con H_0.

Buscamos nuevos autoestados tales que,

$$
\begin{aligned}
(H_0 + H' - E_n)\,|E_n, p\rangle &= 0 \;, \\
\lim_{H'\to 0} E_n &= E_n^{(0)} \;, \\
\lim_{H'\to 0} |E_n, p\rangle &= |E_n^{(0)}, p\rangle \;.
\end{aligned}
\tag{3.67}
$$

El índice p en los autoestados $|E_n, p\rangle$ se refiere a que dicho vector tiende a $|E_n^{(0)}, p\rangle$ cuando $H' \to 0$[#4]. Tengamos en cuenta que H' no conmuta con los observables que caracterizan al índice p, que sí lo hacen con H_0. Multiplicando por $\langle E_n^{(0)}, q|$ a (3.67) tenemos,

$$
\begin{aligned}
0 &= \langle E_n^{(0)}, q|E_n, p\rangle(E_n^{(0)} - E_n) + \langle E_n^{(0)}, q|H'|E_n, p\rangle \;, \\
E_n - E_n^{(0)} &= \frac{\langle E_n^{(0)}, q|H'|E_n, p\rangle}{\langle E_n^{(0)}, q|E_n, p\rangle} \;,
\end{aligned}
\tag{3.68}
$$

que nos permite calcular E_n una vez conocido $|E_n, p\rangle$. Es conveniente emplear esta ecuación para $p = q$, dado que entonces es válida para el caso en que el subespacio de $E_n^{(0)}$ sea no degenerado y el límite $H' \to 0$ es más suave dado que el denominador tiende a 1.

El operador $H_0 - E_n^{(0)}$ tiene al menos un autovalor nulo y, por lo tanto, su inversa es singular. Sea P_n el proyector sobre el subespacio de autoestados de H_0 de energía $E_n^{(0)}$, $Q_n = 1 - P_n$ es entonces el proyector sobre el subespacio ortogonal y $\Delta_n = E_n - E_n^{(0)}$. Veamos que $(\Delta_n - H')|E_n, p\rangle$ está contenido en el subespacio ortogonal a $\{|E_n^{(0)}, p\rangle\}$ puesto que su componente sobre cualquier estado base $|E_n^{(0)}, q\rangle$ es nula,

$$
\langle E_n^{(0)}, q|\Delta_n - H'|E_n, p\rangle = \langle E_n^{(0)}, q|E_n, p\rangle\Delta_n - \langle E_n^{(0)}, q|H'|E_n, p\rangle \;, \tag{3.69}
$$

y por la primera de las expresiones en (3.68) es cero. Por otra parte, el operador $H_0 - E_n^{(0)}$ conmuta con P_n y Q_n por la propia definición de éstos y, por lo tanto, la ecuación (3.67) se descompone en los subespacios paralelo y ortogonal en:

$$
\begin{aligned}
(H_0 - E_n^{(0)})P_n|E_n, p\rangle &= 0 \;, \\
(H_0 - E_n^{(0)})Q_n|E_n, p\rangle &= (\Delta_n - H')|E_n, p\rangle \;.
\end{aligned}
\tag{3.70}
$$

Para ello, sumar y restar $E_n^{(0)}$ en (3.67), expresar $|E_n, p\rangle = P_n|E_n, p\rangle + Q_n|E_n, p\rangle$ y tener en cuenta el resultado anterior de que $(\Delta_n - H')|E_n, p\rangle$ está contenido en el subespacio ortogonal a $\{|E_n^{(0)}, p\rangle\}$.

La primera de las ecuaciones (3.70) se cumple trivialmente dado que la base $\{|E_n^{(0)}, p\rangle\}$ que genera el subespacio sobre el que proyecta P_n tiene autovalor común $E_n^{(0)}$ de H_0. Por otra parte, el operador $H_0 - E_n^{(0)}$ tiene inversa en el subespacio ortogonal a $E_n^{(0)}$ y por lo tanto de (3.70) tenemos,

$$
Q_n|E_n, p\rangle = \frac{1}{H_0 - E_n^{(0)}}(\Delta_n - H')|E_n, p\rangle \;. \tag{3.71}
$$

[#4]El límite $H' \to 0$ se debe hacer sin variar la dependencia funcional de H' con las variables dinámicas, haciendo tender a cero un parámetro multiplicativo que aparezcan en H'.

Notemos que los pasos seguidos hasta ahora han sido exactos. Es en la solución de la componente normal dada por la solución de (3.71) donde se plantea la parte perturbativa del problema.

Reescribimos (3.67) como,

$$\left(H_0 - E_n^{(0)}\right)|E_n, p\rangle = (\Delta_n - H')\,|E_n, p\rangle \ . \tag{3.72}$$

y en la nueva notación (3.68) es,

$$0 = \langle E_n^{(0)}, q|E_n, p\rangle\Delta_n - \langle E_n^{(0)}, q|H'|E_n, p\rangle \ . \tag{3.73}$$

Esta ecuación es exacta. No obstante si pensamos resolver (3.67) como una serie en potencias de H' (la perturbación en el sentido de (3.66)), la ecuación anterior tiene sentido para $p = q$ pero no para $p \neq q$ puesto que el primer término es $\mathcal{O}(H'^{\,2})$ mientras que el segundo es $\mathcal{O}(H')$. Por tanto, se requiere necesariamente que $\langle E_n^{(0)}, q|H'|E_n^{(0)}, p\rangle = 0$ para $p \neq q$ y por ende hay que tomar en el subespacio degenerado $E_n^{(0)}$ la base que diagonalice a H' (restringido a dicho subespacio), para poder proseguir con el desarrollo perturbativo. Dado que H_0 ya es diagonal e igual a $E_n^{(0)}\mathbb{I}$ en el subespacio $\{|E_n^{(0)}, p\rangle\}$, podemos plantear el problema como la diagonalización del Hamiltoniano total H. Matricialmente si dicho subespacio tiene una degeneración de rango g entonces se ha de resolver el problema de diagonalizar H restringida al subespacio $\{|E_n^{(0)}, p\rangle\}$,

$$H - \mathcal{E}_{n,\lambda}\mathbb{I} = \begin{pmatrix} E_n^{(0)} + H'_{11} - \mathcal{E}_{n,\lambda} & H'_{12} & H'_{13} & ... & H'_{1g} \\ H'_{21} & E_n^{(0)} + H'_{22} - \mathcal{E}_{n,\lambda} & H'_{23} & ... & H'_{2g} \\ . & & & & . \\ . & & & & . \\ . & & & & . \\ H'_{g1} & H'_{g2} & H'_{g3} & ... & E_n^{(0)} + H'_{gg} - \mathcal{E}_{n,\lambda} \end{pmatrix} \ , \tag{3.74}$$

que como es bien sabido sólo tiene solución no trivial si

$$\det(H - \mathcal{E}_{n,\lambda}\mathbb{I}) = 0 \ . \tag{3.75}$$

Ésta es una ecuación algebraica de grado g que tiene por solución los autovalores $\mathcal{E}_{n,\lambda}$, $\lambda = 1, \ldots, g$, determinados los cuales se obtienen las correspondientes autofunciones de H que serán las que hay que emplear para poder hacer cualquier cálculo perturbativo. En el supuesto de que algunas de las energías $\mathcal{E}_{n,\lambda}$ sean iguales, mediante el procedimiento de Gram-Schmidt se tomarán siempre autoestados ortogonales. Téngase en mente que en el caso de subespacio no degenerado este proceso es trivial.

Supongamos primero el caso no degenerado, de (3.71) tenemos,

$$|E_n, p\rangle \ = \ N|E_n^{(0)}, p\rangle + \frac{1}{H_0 - E_n^{(0)}} Q_n(\Delta_n - H')|E_n, p\rangle \ , \tag{3.76}$$

donde N es una constante de normalización tal que $\langle E_n, p|E_n, p\rangle = 1$. Notemos que la ecuación (3.70) para la componente $P_n|E_n, p\rangle$ es homogénea y, por lo tanto, no fija el coeficiente delante de $|E_n^{(0)}, p\rangle$.

La autoenergía viene dada por (3.68) para $p = q$,

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle E_n^{(0)}, p|H'|E_n, p\rangle/N \ . \tag{3.77}$$

Procedamos con el desarrollo explícito en potencias de H'.

Primer orden

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= E_n^{(0)} + \langle E_n^{(0)}, p|H'|E_n^{(0)}, p\rangle \ , \\ |E_n^{(1)}, p\rangle &= \left(1 + \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} Q_n H'\right)|E_n^{(0)}, p\rangle \\ &= |E_n^{(0)}, p\rangle + \sum_{q,m\neq n} |E_m^{(0)}, q\rangle \frac{\langle E_m^{(0)}, q|H'|E_n^{(0)}, p\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \ . \end{aligned} \tag{3.78}$$

El autovector anterior está normalizado adecuadamente a $\mathcal{O}(H')$ dado que en la serie anterior $\langle E_n^{(0)}, p|E_m^{(0)}, q\rangle = 0$ al pertenecer a subespacios ortogonales, $m \neq n$. Por la misma razón hemos eliminado Δ_n en (3.78).

Segundo orden Para hallar $E_n^{(2)}$ hemos de expresar $|E_n, p\rangle$ hasta orden $\mathcal{O}(H')$. Este es un hecho general, para obtener $E_n^{(n)}$ hay primero que hallar $|E_n^{(n-1)}, p\rangle$ y sustituirlo en (3.77). De (3.78) tenemos:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle E_n^{(0)}, p|H'|E_n^{(1)}, p\rangle = \\ &= E_n^{(0)} + \langle E_n^{(0)}, p|H' \left(1 + \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} Q_n H'\right)|E_n^0, p\rangle \\ &= E_n^{(1)} + \sum_{q,m\neq n} \frac{|\langle E_m^{(0)}, q|H'|E_n^{(0)}, p\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \ , \end{aligned} \tag{3.79}$$

notemos que la serie anterior a segundo orden siempre es negativa si se trata de estudiar el efecto de la perturbación sobre la energía del estado fundamental.

Si consideramos las series (3.78) y (3.79) queda clara la imposición del requerimiento (3.66), aunque éste es sólo una condición necesaria para el buen comportamiento de las series anteriores.

Ahora consideremos el caso en que $E_n^{(0)}$ sea un autovalor degenerado. Recordemos que en este caso hemos de resolver primero (3.75) y determinar las autofunciones $|E_{n,\lambda}^{(0)}\rangle$, con $\lambda = 1, \ldots, g$, de forma que en esta base H' sea diagonal en el subespacio $\{|E_n^{(0)}, p\rangle\}$, dado que de otro modo no tiene sentido el desarrollo perturbativo. Aparte de este hecho, la resolución de la ecuación (3.67) no dice nada más sobre el subespacio de autovalor $E_n^{(0)}$, ya que simplemente se transforma en la primera de las ecuaciones (3.70) que se cumple trivialmente. Para la parte ortogonal se procede igual que en el caso no degenerado.

Por lo tanto, tomando la base $\{|E_{n,\lambda}^{(0)}\rangle\}$ para el subespacio de autovectores de energía $E_n^{(0)}$ de H_0, escribimos la solución al problema de autofunciones de (3.67) como,

$$|E_{n,\lambda}\rangle = N|E_{n,\lambda}^{(0)}\rangle + \frac{1}{H_0 - E_n^{(0)}} Q_n(\Delta_n - H')|E_{n,\lambda}\rangle \ , \tag{3.80}$$

donde N es una constante de normalización tal que $\langle E_{n,\lambda}|E_{n,\lambda}\rangle = 1$. Es importante recalcar que $|E_{n,\lambda}\rangle$ es el autoestado que para $H' \to 0$ se transforma en $|E^{(0)}_{n,\lambda}\rangle$. De la segunda de las relaciones (3.68), tenemos además que:

$$E_{n,\lambda} = E^{(0)}_n + \langle E^{(0)}_{n,\lambda}|H'|E_{n,\lambda}\rangle/N \ . \tag{3.81}$$

Calculemos la serie para $E_{n,\lambda}$ hasta segundo orden en el desarrollo en potencias de H'.

<u>Primer orden:</u>

$$\begin{aligned} E^{(1)}_{n,\lambda} &= E^{(0)}_n + \langle E^{(0)}_{n,\lambda}|H'|E^{(0)}_{n,\lambda}\rangle = \mathcal{E}_{n,\lambda} \ , \\ |E^{(1)}_{n,\lambda}\rangle &= |E^{(0)}_{n,\lambda}\rangle + \frac{1}{E^{(0)}_n - H_0} Q_n H' |E^{(0)}_{n,\lambda}\rangle \ , \end{aligned} \tag{3.82}$$

puesto que una vez resuelto el problema de autovalores (3.75) se tiene que

$$\mathcal{E}_{n,\lambda} = \langle E^{(0)}_{n,\lambda}|H|E^{(0)}_{n,\lambda}\rangle = E^{(0)}_n + \langle E^{(0)}_{n,\lambda}|H'|E^{(0)}_{n,\lambda}\rangle \ . \tag{3.83}$$

Téngase en cuenta que a este orden el autoestado (3.82) está correctamente normalizado.

<u>Segundo orden:</u>

$$\begin{aligned} E^{(2)}_{n,\lambda} &= E^{(0)}_n + \langle E^{(0)}_{n,\lambda}|H' \left(1 + \frac{1}{E^{(0)}_n - H_0} Q_n H'\right) |E^{(0)}_{n,\lambda}\rangle \\ &= \mathcal{E}_{n,\lambda} + \sum_{q,m\neq n} \frac{|\langle E^{(0)}_m, q|H'|E^{(0)}_{n,\lambda}\rangle|^2}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_m} \ . \end{aligned} \tag{3.84}$$

De nuevo para las correcciones a la energía del estado fundamental, la serie de segundo orden da lugar a una contribución negativa.

Capítulo 4

Desplazamientos espaciales

4.1. El operador de traslaciones

Consideremos dos observadores $\mathcal{O}$ y $\mathcal{O}'$ desplazados uno del otro por un vector $\vec{a}$, tal y como se indica en la figura 4.1. Designemos por $\{|c'\rangle\}$ una base ortonormal de $\mathcal{O}$ y por $\{|c';\vec{a}\rangle\}$ la base de estados de $\mathcal{O}'$ que prepara idénticamente a como $\mathcal{O}$ prepara los $\{|c'\rangle\}$. Es decir, $\{|c';\vec{a}\rangle\}$ es la base de estados formada por los transformados de los estados $|c'\rangle$ de $\mathcal{H}_{\mathcal{O}}$.

Clásicamente una traslación para un sistema de partículas se caracteriza por $\vec{r}\,'_j = \vec{r}_j + \vec{a}$ y $\vec{p}\,'_j = \vec{p}_j$, donde el subíndice se refiere a la partícula j-ésima. Desde un punto de vista cuántico imponemos la conservación de los módulos de los productos escalares bajo una traslación,

$$|\langle a'|b'\rangle| = |\langle a';\vec{a}|b';\vec{a}\rangle| \;, \tag{4.1}$$

en virtud de nuestra caracterización de descripciones equivalentes dadas en la sección (2.5). De acuerdo al teorema de Wigner, si designamos por $U(\vec{a})$ el operador de traslación por un vector tridimensional $\vec{a}$,

$$U(\vec{a})|c'\rangle = |c';\vec{a}\rangle \;. \tag{4.2}$$

dicho operador será unitario o antiunitario. No obstante como $\vec{a}$ viene dado por un conjunto de tres parámetros continuos, por ejemplo a través de sus componentes en una base cartesiana, queda

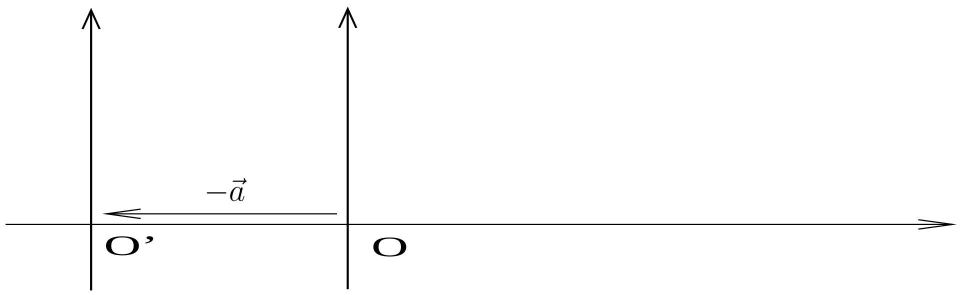

Figura 4.1: Los sistemas de referencia asociados a los observadores $\mathcal{O}$ y $\mathcal{O}'$ están desplazados $\vec{a}$.

claro que dicho operador debe ser unitario, aplicando (2.117). De hecho $U(\vec{a})$ debe satisfacer:

$$\begin{aligned}U(\vec{a}_3) &= U(\vec{a}_1+\vec{a}_2)=U(\vec{a}_1)U(\vec{a}_2)~,~~\vec{a}_3=\vec{a}_1+\vec{a}_2~, \\ U(\vec{0}) &= 1~,\end{aligned} \tag{4.3}$$

dado que esta misma regla de composición de traslaciones es la satisfecha por los operadores de traslación en el espacio ordinario, y debe satisfacerse independientemente del espacio vectorial o de Hilbert sobre el que las traslaciones actúen, ya que constituye una propiedad intrínseca del grupo de traslaciones espaciales. Por otra parte, de (4.3) se sigue que,

$$\begin{aligned}U^\dagger(\vec{a}) &= U(\vec{a})^{-1}=U(-\vec{a})~, \\ U(\vec{a}_1)U(\vec{a}_2) &= U(\vec{a}_2)U(\vec{a}_1)~,\end{aligned} \tag{4.4}$$

y por lo tanto las traslaciones conmutan, hecho éste bien conocido de la actuación de las traslaciones en $\mathbb{R}^3$.

Si consideramos un desplazamiento infinitesimal por un vector $\delta\vec{a}$ escribimos $U(\delta\vec{a})$ como,

$$U(\delta\vec{a})=1+\delta U(\delta\vec{a})~. \tag{4.5}$$

Imponiendo el carácter unitario de $U(\delta\vec{a})$ y a primer orden en δU,

$$U(\delta\vec{a})U^\dagger(\delta\vec{a})=1+\delta U(\delta\vec{a})+\delta U^\dagger(\delta\vec{a})=1~. \tag{4.6}$$

De lo que se deduce que $\delta U(\delta\vec{a})$ es antihermítico. Por otra parte, dado que

$$U(\delta\vec{a}_1)U(\delta\vec{a}_2)=U(\delta\vec{a}_1+\delta\vec{a}_2)~, \tag{4.7}$$

implica que $\delta U(\delta\vec{a}_1+\delta\vec{a}_2)=\delta U(\delta\vec{a}_1)+\delta U(\delta\vec{a}_2)$ y por lo tanto $\delta U(\delta\vec{a})$ es lineal en $\delta\vec{a}$. Teniendo en cuenta además el probado carácter antihermítico de $\delta U(\delta\vec{a})$, implica que

$$\delta U(\delta\vec{a})=-i\delta\vec{a}\vec{P}/\hbar~, \tag{4.8}$$

con $\vec{P}=(P_x,P_y,P_z)\equiv(P_1,P_2,P_3)$ un operador hermítico vectorial cuyas componentes son los generadores de los desplazamientos espaciales. Dicho operador $\vec{P}$ se llama momento lineal total del sistema.

El operador $U(\vec{a})$ satisface la siguiente ecuación diferencial,

$$\delta U(\vec{a})=U(\vec{a}+\delta\vec{a})-U(\vec{a})=U(\delta\vec{a})U(\vec{a})-U(\vec{a})=-i\frac{\delta\vec{a}\vec{P}}{\hbar}U(\vec{a})=\frac{\partial U(\vec{a})}{\partial\vec{a}}\delta\vec{a}~. \tag{4.9}$$

Se llega así a la ecuación diferencial:

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial U(\vec{a})}{\partial\vec{a}} &= \vec{P}U(\vec{a})~, \\ U(\vec{0}) &= 1~.\end{aligned} \tag{4.10}$$

En componentes cartesianas:

$$i\hbar\frac{\partial U(\vec{a})}{\partial a_i}=P_iU(\vec{a})~. \tag{4.11}$$

Como P_i no depende de $\vec{a}$ y conmuta consigo mismo, la integración de la ecuación diferencial anterior para un desplazamiento $a_i\hat{e}_i$, con $\hat{e}_i$ el vector unitario según el eje cartesiano i-ésimo, es directa e igual a:

$$U(a_i\hat{e}_i) = e^{-ia_iP_i/\hbar} , \tag{4.12}$$

Teniendo en cuenta la ley de composición (4.3) se obtiene la siguiente expresión para $U(\vec{a})$,

$$U(\vec{a}) = U(\sum_{i=1}^{3} a_i\hat{e}_i) = \prod_{i=1}^{3} U(a_i\hat{e}_i) = e^{-ia_1P_1/\hbar}e^{-ia_2P_2/\hbar}e^{-ia_3P_3/\hbar} . \tag{4.13}$$

Al conmutar las traslaciones espaciales, ello implica que las distintas componentes del momento lineal conmutan entre sí $[P_i, P_j] = 0$. Este hecho, que debe resultar evidente a partir de (4.13), se puede demostrar sin más que evaluando el conmutador $[U(\epsilon_i\hat{e}_i), U(\epsilon_j\hat{e}_j)] = 0$ haciendo el desarrollo de $U(\vec{\epsilon})$ hasta segundo orden en $\vec{\epsilon}$,

$$\begin{aligned}
[U(\epsilon_i\hat{e}_i), U(\epsilon_j\hat{e}_j)] &= 0 = [1 - i\frac{\epsilon_i P_i}{\hbar} - \frac{1}{2}\frac{\epsilon_i^2 P_i^2}{\hbar^2} + \mathcal{O}(\epsilon^3), 1 - i\frac{\epsilon_j P_j}{\hbar} - \frac{1}{2}\frac{(\epsilon_j^2 P_j^2}{\hbar^2} + \mathcal{O}(\epsilon^3)] \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \epsilon_i\epsilon_j[P_i, P_j] + \mathcal{O}(\epsilon^3) ,
\end{aligned} \tag{4.14}$$

con lo que efectivamente

$$[P_i, P_j] = 0 . \tag{4.15}$$

Como consecuencia de este resultado, la expresión (4.13) se puede expresar simplemente como:

$$U(\vec{a}) = e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar} . \tag{4.16}$$

Si $|\vec{p}\,'\rangle$ es un autoestado de $\vec{P}$, tal que $P_i|\vec{p}\,'\rangle = p_i'|\vec{p}\,'\rangle$, entonces el estado físico es invariante bajo traslaciones, dado que el vector asociado a dicho estado sólo experimenta un cambio de fase:

$$e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}|\vec{p}\,'\rangle = e^{-i\vec{a}\vec{p}\,'/\hbar}|\vec{p}\,'\rangle . \tag{4.17}$$

Dado un operador A su transformado por traslaciones, de acuerdo a (2.60), es:

$$A' = U(\vec{a})AU(\vec{a})^\dagger . \tag{4.18}$$

Si $[A, \vec{P}] = 0$ dicho operador es invariante bajo traslaciones ya que $A' = A$. En este caso sus elementos de matriz son invariantes bajo traslaciones dado que,

$$\langle\psi; \vec{a}|A|\varphi; \vec{a}\rangle = \langle\psi|U^\dagger(\vec{a})AU(\vec{a})|\varphi\rangle = \langle\psi|A|\varphi\rangle . \tag{4.19}$$

Si el Hamiltoniano conmuta con $\vec{P}$, $[H, \vec{P}] = 0$, tal y como ocurre para sistemas cerrados, entonces son observables compatibles y el operador $\vec{P}$ es independiente del tiempo en la imagen de Heisenberg así como sus elementos de matriz. Y viceversa, dado que $[H, \vec{P}] = 0$, resulta entonces que H es independiente de traslaciones así como sus elementos de matriz. Este hecho es análogo al de mecánica clásica por el que los generadores de cualquier grupo continuo de transformaciones canónicas, bajo las cuales el Hamiltoniano es invariante, son constantes de movimiento.

Bajo una traslación infinitesimal $U(\delta\vec{a}) = 1 - i\delta\vec{a}\vec{P}/\hbar$ y la ley de transformación (4.18) a primer orden en $\delta\vec{a}$ se reduce a:

$$A' = A - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a}[\vec{P}, A] . \tag{4.20}$$

4.2. Sistemas con análogos clásicos

Introduciremos el observable posición haciendo uso del principio de correspondencia con mecánica clásica. De este modo, el operador vectorial de posición, que lo designamos por $\vec{X}$, lo definimos en términos de su descomposición espectral como,

$$\vec{X} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x'\, \vec{x}\,'\, |\vec{x}\,'\rangle\langle\vec{x}\,'| \;, \tag{4.21}$$

con $|\vec{x}\,'\rangle$ el autoestado de posición definida $\vec{x}\,'$. #1

Como consecuencia de una traslación, véase la figura 4.1,

$$|\vec{x}\,'\rangle \rightarrow |\vec{x}\,';\vec{a}\rangle = e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}|\vec{x}\,'\rangle \propto |\vec{x}\,'+\vec{a}\rangle \;, \tag{4.22}$$

ya que si $|\vec{x}\,'\rangle$ es un autovector de $\mathcal{O}$ con autovalor $\vec{x}\,'$, entonces desde el punto de vista de $\mathcal{O}\,'$ su autovalor es $\vec{x}\,'+\vec{a}$. En la expresión anterior el signo de proporcionalidad tiene en cuenta la posible diferencia de fase entre $e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}|\vec{x}\,'\rangle$ y $|\vec{x}\,'+\vec{a}\rangle$. De la descomposición espectral (4.21) se sigue que el observable $\vec{X}\,'$, transformado de $\vec{X}$ por una traslación, es:

$$\vec{X}' = U(\vec{a})\vec{X}U^\dagger(\vec{a}) = \int d^3x'\,\vec{x}\,'|\vec{x}\,'+\vec{a}\rangle\langle\vec{x}\,'+\vec{a}| = \int d^3x'(\vec{x}\,'-\vec{a})|\vec{x}\,'\rangle\langle\vec{x}\,'| = \vec{X}-\vec{a} \;. \tag{4.23}$$

Considerando una transformación infinitesimal $\delta\vec{a}$ y manteniendo términos lineales a primer orden en $\delta\vec{a}$,

$$e^{-i\delta\vec{a}\vec{P}/\hbar}\vec{X}e^{i\delta\vec{a}\vec{P}/\hbar} = \vec{X} - i\sum_{j=1}^{3}\frac{\delta a_j}{\hbar}[P_j,\vec{X}] = \vec{X}-\delta\vec{a} \;, \tag{4.24}$$

de donde se siguen las relaciones de conmutación canónicas de los operadores $\vec{P}$ y $\vec{X}$,

$$\begin{aligned}
[X_i,P_j] &= i\hbar\delta_{ij} \;, \\
[P_i,P_j] &= 0 \;, \\
[X_i,X_j] &= 0 \;.
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Las dos últimas igualdades se siguen de (4.15) y de la representación espectral de $\vec{X}$ (4.21). Todo par de operadores que satisfacen relaciones de conmutación como las expuestas en (4.25) se dice que son canónicamente conjugados.

Como consecuencia de estas reglas de conmutación, si $G(\vec{P})$ y $F(\vec{X})$ son funciones que admiten un desarrollo en serie de potencias en función de $\vec{P}$ y $\vec{X}$, entonces se sigue que:

$$\begin{aligned}
\left[X_i,G(\vec{P})\right] &= i\hbar\frac{\partial G}{\partial P_i} \;, \\
\left[P_i,F(\vec{X})\right] &= -i\hbar\frac{\partial F}{\partial X_i} \;.
\end{aligned} \tag{4.26}$$

#1 Este modo de introducirlo es el más directo. No obstante, la existencia del operador posición se puede establecer haciendo uso de invarianza galileo, ya que, ésta implica los generadores K_j en términos de los cuales es trivial definir operadores con las propiedades adecuadas para ser las componentes cartesianas del operador de posición. Véase el tema 5.

Autoestados de $\vec{X}$ y $\vec{P}$. A partir de las relaciones de conmutación (4.26), se sigue que:

$$\begin{aligned}\vec{X}e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}|\vec{x}\,'\rangle &= \left\{e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}\vec{X}+[\vec{X},e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}]\right\}|\vec{x}\,'\rangle = \left\{\vec{x}\,'+i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{P}}\right\}e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}|\vec{x}\,'\rangle \\ &= (\vec{x}\,'+\vec{a})\,e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}|\vec{x}\,'\rangle \ . \end{aligned} \tag{4.27}$$

Por lo tanto $e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}|\vec{x}\,'\rangle$ es un autovector de $\vec{X}$ con autovalor $\vec{x}\,'+\vec{a}$, de hecho definimos:

$$|\vec{x}\,'+\vec{a}\rangle = e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}|\vec{x}\,'\rangle \ , \tag{4.28}$$

con lo que fijamos la fase de $|\vec{x}\,'+\vec{a}\rangle$ presente en (4.22). Consistentemente para $\vec{a}=\vec{0}$, $e^{-i\vec{a}\vec{P}/\hbar}=1$. Identificando $\vec{x}\,'=\vec{0}$ y $\vec{a}=\vec{x}\,'$ tenemos que los autoestados del operador de posición $\vec{X}$ vienen dados por:

$$|\vec{x}\,'\rangle = e^{-i\vec{x}\,'\vec{P}/\hbar}|0_X\rangle \ , \tag{4.29}$$

siendo el estado $|0_X\rangle$ el vector localizado en el origen de coordenadas.

Podemos proceder de idéntica manera con el observable $\vec{P}$ dada la dualidad en las relaciones de conmutación (4.25), de forma que el estado $e^{i\vec{q}\vec{X}/\hbar}|\vec{p}\,'\rangle$ tiene como autovalor $\vec{p}\,'+\vec{q}$. De hecho definimos,

$$|\vec{p}\,'+\vec{q}\rangle = e^{i\vec{q}\vec{X}/\hbar}|\vec{p}\,'\rangle \ , \tag{4.30}$$

y como $\vec{q}$ es un vector arbitrario se sigue que el espectro del operador momento lineal $\vec{P}$ coincide con $\mathbb{R}^3$. Identificando $\vec{p}\,'=0$ y $\vec{q}=\vec{p}\,'$ tenemos que los autoestados del operador de momento lineal $\vec{P}$ vienen dados por:

$$|\vec{p}\,'\rangle = e^{i\vec{p}\,'\vec{X}/\hbar}|0_P\rangle \ , \tag{4.31}$$

siendo el estado $|0_P\rangle$ el vector con momento lineal nulo.

Por analogía a los razonamientos anteriores para determinar el espectro y autoestados de $\vec{X}$ y $\vec{P}$ podemos determinar que t no es la variable canónicamente conjugada de H, siguiendo un razonamiento debido a Pauli. El cuadrivector momento en relatividad especial se compone de $P_\mu = (H,-\vec{P})$, mientras que el cuadrivector posición consta de $X_\mu=(\tau,-\vec{X})$, siendo τ el hipotético operador cuyo espectro es la variable tiempo, $-\infty<t<\infty$. Imponiendo covarianza Lorentz, y dadas las relaciones de conmutación canónicas satisfechas por $\vec{X}$ y $\vec{P}$ en (4.25), se sigue que

$$[X_\mu,P_\nu] = -i\hbar\, g_{\mu\nu} \ . \tag{4.32}$$

De este modo,

$$\begin{aligned}[\tau,H] &= -i\hbar \ , \\ [\tau,M(H)] &= -i\hbar\frac{\partial M}{\partial H} \ , \end{aligned} \tag{4.33}$$

para toda función $M(H)$ que se puede expresar en desarrollo de potencias de H. Esta última relación de conmutación es del mismo tipo que la última en (4.26), con lo que siguiendo el mismo tipo de razonamiento empleado para demostrar que el espectro de P_i es $-\infty<p_i'<\infty$, concluiríamos que el espectro del Hamiltoniano también incluiría cualquier valor de la recta real, es decir, $-\infty < E' < +\infty$ y, por lo tanto, la energía no estaría acotada inferiormente, aspecto éste insostenible para cualquier teoría física. Llegamos por lo tanto a la conclusión de que el tiempo t no es el espectro de ningún operador τ canónicamente conjugado con H y que la usualmente denominada relación de incertidumbre energía–tiempo (que nos apareció al final de la sección 1.1) no se puede equiparar con la relación de incertidumbre de posición y momento, o en general con la de cualquier par de operadores que no conmuten entre sí que se estableció en la sección 2.4.

Dado que los operadores $\vec{X}$ y $\vec{P}$ poseen un espectro continuo, sus autoestados están normalizados a deltas de Dirac tal y como vimos en la sección 2.3,

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}\,'|\vec{x}\,''\rangle &= \delta(\vec{x}\,'-\vec{x}\,'') \;, \\ \int d^3x'\,|\vec{x}\,'\rangle\langle\vec{x}\,'| &= 1 \;, \\ \langle \vec{p}\,'|\vec{p}\,''\rangle &= \delta(\vec{p}\,'-\vec{p}\,'') \;, \\ \int d^3p'\,|\vec{p}\,'\rangle\langle\vec{p}\,'| &= 1 \;. \end{aligned} \tag{4.34}$$

<u>Mecánica ondulatoria.</u> La mecánica ondulatoria consiste en expresar las relaciones entre estados y operadores propias de la mecánica cuántica y expuestas en la sección (2.3), así como las correspondientes ecuaciones de evolución temporal en cualquiera de las imágenes, empleando la base de posiciones $\{|\vec{x}\,'\rangle\}$ o de momentos $\{|\vec{p}\,'\rangle\}$. La función de onda $\psi(\vec{x}\,',t)$ no es más que la componente del vector $|\psi(t)\rangle$ sobre el vector base $|\vec{x}\,'\rangle$. Bajo una traslación como la considerada en la figura 4.1, la función de onda se transforma como:

$$\psi'(\vec{x}\,') = \langle \vec{x}\,'|\psi;\vec{a}\rangle = \langle \vec{x}\,'-\vec{a}|\psi\rangle = \psi(\vec{x}\,'-\vec{a}) \;, \tag{4.35}$$

y, por lo tanto, la función de onda se transforma como un escalar. Pero además, dado que,

$$\psi(\vec{x}\,'-\vec{a}) = e^{-\vec{a}\vec{\nabla}}\psi(\vec{x}\,') = e^{-i\vec{a}(-i\hbar\vec{\nabla})/\hbar}\psi(\vec{x}\,') \;, \tag{4.36}$$

comparando esta expresión con (4.16), tenemos:

$$\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{x}\,'} \;, \tag{4.37}$$

en la base de posiciones. Es directo comprobar además que $\vec{P}$ dado en (4.37) verifica las relaciones de conmutación canónicas (4.25).

Establezcamos la función de onda de un autoestado de momento lineal definido para un sistema de N partículas. De (4.29) tenemos:

$$\langle \vec{x}\,'_1 ... \vec{x}\,'_N|\vec{p}\,'_1...\vec{p}\,'_N\rangle = \langle 0_X|\prod_{i=1}^N e^{i\vec{P}_i\vec{x}\,'_i/\hbar}|\vec{p}\,'_1...\vec{p}\,'_N\rangle \;, \tag{4.38}$$

donde $|O_X\rangle$ es el estado en el que todas las partículas están localizadas en el origen de coordenadas. La relación anterior se puede reescribir como,

$$\prod_{i=1}^N e^{i\vec{p}\,'_i\vec{x}\,'_i/\hbar}\langle 0_X|\vec{p}\,'_1...\vec{p}\,'_N\rangle = \prod_{i=1}^N e^{i\vec{p}\,'_i\vec{x}\,'_i/\hbar}\langle 0_X|\prod_{j=1}^N e^{i\vec{p}\,'_j\vec{X}\,'_j/\hbar}|0_P\rangle = \langle 0_X|0_P\rangle\prod_{i=1}^N e^{i\vec{p}\,'_i\vec{x}\,'_i/\hbar} \;, \tag{4.39}$$

con $|0_P\rangle$ el estado en el que todas las partículas tienen momento lineal nulo. El factor $\langle 0_X|0_P\rangle$ lo determinamos imponiendo la condición de normalización de los estados con momento lineal definido (4.34),

$$\prod_{i=1}^{N}\delta(\vec{p}\,'_i-\vec{p}\,''_i)=\langle\vec{p}\,'_1...\vec{p}\,'_N|\vec{p}\,''_1...\vec{p}\,''_N\rangle=\int d^3x'_1...d^3x'_N\,\langle\vec{p}\,'_1...\vec{p}\,'_N|\vec{x}\,'_1...\vec{x}\,'_N\rangle\langle\vec{x}\,'_1...\vec{x}\,'_N|\vec{p}\,''_1...\vec{p}\,''_N\rangle\ . \tag{4.40}$$

Haciendo uso del resultado (4.39),

$$\begin{aligned}\prod_{i=1}^{N}\delta(\vec{p}_i\,'-\vec{p}_i\,'') &= |\langle 0_X|0_P\rangle|^2\int d^3x'_1...d^3x'_N\left(\prod_{i=1}^{N}e^{-i\vec{p}\,'_i\vec{x}\,'_i/\hbar}\right)\left(\prod_{j=1}^{N}e^{i\vec{p}\,''_j\vec{x}\,'_j/\hbar}\right)\\ &= |\langle 0_X|0_P\rangle|^2\prod_{i=1}^{N}(2\pi\hbar)^3\delta(\vec{p}\,''_i-\vec{p}\,'_i)\ ,\end{aligned}\tag{4.41}$$

de donde se deduce que:

$$|\langle 0_X|0_P\rangle|=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N/2}}\ . \tag{4.42}$$

Fijando la fase de $|0_P\rangle$ siempre podemos tomar

$$\langle 0_X|0_P\rangle=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N/2}}\ , \tag{4.43}$$

con lo que la función de onda (4.38) es finalmente:

$$\langle\vec{x}\,'_1...\vec{x}\,'_N|\vec{p}\,'_1...\vec{p}\,'_N\rangle=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N/2}}\prod_{i=1}^{N}e^{i\vec{p}\,'_i\vec{x}\,'_i/\hbar}\ . \tag{4.44}$$

Una vez obtenida la función de onda de un estado con momento lineal definido podemos determinar la relación entre las funciones de onda en espacio de momentos y posiciones de un estado arbitrario $|\psi\rangle$,

$$\psi(\vec{x}\,')=\langle\vec{x}\,'|\psi\rangle=\int d^3p'\,\langle\vec{x}\,'|\vec{p}\,'\rangle\langle\vec{p}\,'|\psi\rangle=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3p'\,\phi(\vec{p}\,')e^{i\vec{p}\,'\vec{x}\,'/\hbar}\ , \tag{4.45}$$

donde hemos denominado por $\phi(\vec{p}\,')=\langle\vec{p}\,'|\psi\rangle$ a la función de onda en el espacio de momentos, que de (4.45) vemos que es la transformada de Fourier de la función de onda en el espacio de coordenadas $\psi(\vec{x}\,')$,

$$\phi(\vec{p}\,')=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3x'\,\psi(\vec{x}\,')e^{-i\vec{p}\,'\vec{x}\,'/\hbar}\ . \tag{4.46}$$

Ya hemos determinado en (4.37) el operador momento lineal en base de posiciones. Hemos visto que es proporcional al operador gradiente, de modo que sus elementos de matriz son,

$$\langle\vec{x}\,'|\vec{P}|\vec{x}\,''\rangle=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{x}\,'}\delta(\vec{x}\,'-\vec{x}\,'')\ , \tag{4.47}$$

puesto que

$$\langle \vec{x}\,'|\vec{P}|\psi\rangle = -i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{x}\,') = \int d^3x''\,\langle \vec{x}\,'|\vec{P}|\vec{x}\,''\rangle\langle \vec{x}\,''|\psi\rangle = \int d^3x''\,\langle \vec{x}\,'|\vec{P}|\vec{x}\,''\rangle\psi(\vec{x}'') \;, \tag{4.48}$$

de donde se sigue (4.47). Dado que $-\vec{X}$ es el generador de las traslaciones en el espacio de momentos, como se desprende de (4.30), de la misma forma que $\vec{P}$ es el generador de las traslaciones espaciales, su representación en el espacio de momentos vendrá dada por:

$$\langle \vec{p}\,'|\vec{X}|\vec{p}\,''\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}\,'}\delta(\vec{p}\,' - \vec{p}\,'') \;. \tag{4.49}$$

Capítulo 5

Invarianza de Galileo

En mecánica clásica dos observadores inerciales son equivalentes, de forma que las leyes de la mecánica clásica son invariantes bajo toda transformación entre uno y otro sistema de referencia. Las transformaciones que relacionan las observaciones entre dos observadores que se mueven con una velocidad relativa $\vec{v}$ son las transformaciones de Galileo. En este capítulo se determinará la representación de dichas transformaciones en el espacio de Hilbert de la MC, así como las restricciones que debe obedecer todo Hamiltoniano tal que se tenga invarianza bajo una transformación de Galileo, esto es, que la transformada por una transformación de toda solución de la ecuación de Schrödinger siga siendo una solución de la misma.

5.1. Transformaciones de Galileo

Consideremos dos observadores $\mathcal{O}$ y $\mathcal{O}'$ tal que el segundo se mueve con una velocidad $-\vec{v}$ respecto del primero, ver figura 5.1. Si $\vec{x}$ es un vector de posición y $\vec{p}$ un vector trimomento, entonces sus transformados por una transformación de Galileo son:

$$\begin{aligned} \vec{x}\,' &= \vec{x}+\vec{v}t\ , \\ \vec{p}\,' &= \vec{p}+M\vec{v}\ , \end{aligned} \tag{5.1}$$

siendo M la masa de la partícula. De este modo si $|\vec{x}\rangle$ es un estado de $\mathcal{O}$ localizado en $\vec{x}$ como consecuencia de la transformación de Galileo corresponderá a un estado localizado en $\vec{x}+\vec{v}t$ según

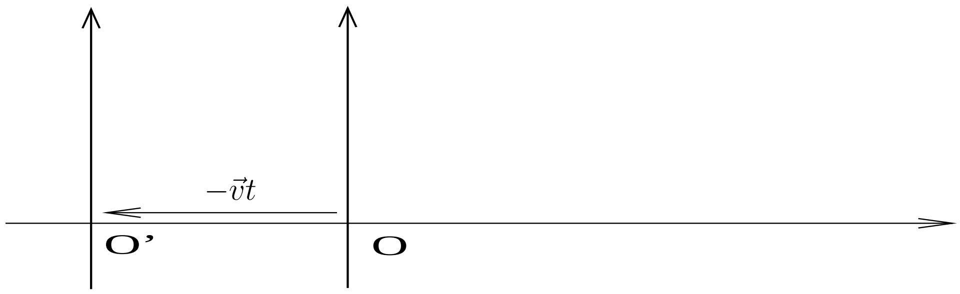

Figura 5.1: Los sistemas de referencia asociados a los observadores $\mathcal{O}$ y $\mathcal{O}'$ están desplazados $\vec{v}t$.

$\mathcal{O}'$. Si designamos por $\Gamma(t,\vec{v})$ el operador que en el espacio de Hilbert realiza las transformaciones de Galileo tendremos pues:

$$\Gamma(t,\vec{v})|\vec{x}\rangle \propto |\vec{x}+\vec{v}t\rangle \; , \tag{5.2}$$

donde el factor de normalización es debido a una posible fase de diferencia (que de hecho la hay) entre el estado de la izquierda y el de la derecha de la igualdad. Análogamente, para un autoestado de momento lineal $|\vec{p}\rangle$, tendremos la transformación:

$$\Gamma(t,\vec{v})|\vec{p}\rangle \propto |\vec{p}+M\vec{v}\rangle \; , \tag{5.3}$$

con el factor de proporcionalidad un número complejo de modulo unidad.

Procediendo del mismo modo que el empleado para determinar $\vec{X}\,'$ bajo una traslación espacial en (4.23), expresamos $\vec{P}$ a través de su descomposición espectral y, teniendo en cuenta (5.3), se sigue que:

$$\begin{aligned}\vec{P}\,' &= \Gamma(t,\vec{v})\vec{P}\Gamma(t,\vec{v})^\dagger = \int d^3p'\,\vec{p}\,'\Gamma(t,\vec{v})|\vec{p}\,'\rangle\langle\vec{p}\,'|\Gamma(t,\vec{v})^\dagger = \int d^3p'\,(\vec{p}\,'-M\vec{v})\,|\vec{p}\,'\rangle\langle\vec{p}\,'| \\ &= \vec{P}-M\vec{v} \; .\end{aligned} \tag{5.4}$$

Del mismo modo, a raíz de (5.2) determinamos que:

$$\vec{X}\,' = \Gamma(t,\vec{v})\vec{X}\Gamma(t,\vec{v})^\dagger = \vec{X}-\vec{v}t \; . \tag{5.5}$$

Dos transformaciones de Galileo, $\Gamma(t,\vec{v}_1)$ y $\Gamma(t,\vec{v}_2)$ satisfacen la ley de composición:

$$\Gamma(t,\vec{v}_1)\Gamma(t,\vec{v}_2) = \Gamma(t,\vec{v}_1+\vec{v}_2) \; . \tag{5.6}$$

Por lo tanto, si consideramos una transformación de Galileo infinitesimal, podemos aplicar los mismos razonamientos empleados para los desplazamientos temporales y espaciales infinitesimales para concluir que:

$$\Gamma(t,\delta\vec{v}) = 1 - i\frac{\delta\vec{v}\,\vec{K}}{\hbar} \; , \tag{5.7}$$

con $\vec{K}$ un operador hermítico, independiente de $\vec{v}$, dado que el origen de velocidades es arbitrario. Estudiando la transformación de los observables $\vec{X}$ y $\vec{P}$ bajo transformaciones de Galileo infinitesimales podemos determinar las relaciones de conmutación de $\vec{K}$ con $\vec{X}$ y $\vec{P}$,

$$\Gamma(t,\delta\vec{v})X_i\Gamma(t,\delta\vec{v})^\dagger = X_i - i\sum_{j=1}^{3}\frac{\delta v_j}{\hbar}[K_j,X_i] = X_i - \delta v_i t \; , \tag{5.8}$$

de (5.5). Por lo tanto:

$$[K_j,X_i] = -i\hbar t\delta_{ij} \; . \tag{5.9}$$

Del mismo modo, teniendo en cuenta la ley de transformación (5.4), tenemos:

$$\Gamma(t,\delta\vec{v})P_i\Gamma(t,\delta\vec{\delta v})^\dagger = P_i - i\sum_{j=1}^{3}\frac{\delta v_j}{\hbar}[K_j,P_i] = P_i - M\delta v_i \; , \tag{5.10}$$

y por lo tanto:
$$[K_j, P_i] = -i\hbar M \delta_{ij} \ . \tag{5.11}$$
Las relaciones de conmutación anteriores quedan satisfechas por el operador
$$K_j = tP_j - MX_j \ , \tag{5.12}$$
que, por lo tanto, proporciona las correctas transformaciones de los operadores $\vec{X}$ y $\vec{P}$ bajo una transformación de Galileo infinitesimal.#1 Dado que una transformación de Galileo con velocidad finita en un instante de tiempo fijo se puede obtener como aplicación sucesiva de transformaciones infinitesimales, se tiene que,
$$\Gamma(t,\vec{v}) = \lim_{N\to\infty}\left(\Gamma(t,\frac{\vec{v}}{N})\right)^N = \lim_{N\to\infty}\left(1 - i\frac{\vec{v}\vec{K}}{\hbar N}\right)^N \ , \tag{5.13}$$
donde en el último paso hemos despreciado términos $\mathcal{O}(N^{-2})$ dado que quedan suprimidos al menos por N^{-1}, y conocida la igualdad:
$$\lim_{N\to\infty}(1+\frac{A}{N})^N = e^A \ , \tag{5.14}$$
se llega a que:
$$\Gamma(t,\vec{v}) = e^{-i\vec{v}\vec{K}/\hbar} \ . \tag{5.15}$$
Si en lugar de una partícula tenemos un sistema de N partículas, la transformación de Galileo resultante será el producto de las transformaciones de Lorentz sobre cada partícula de modo que:
$$\Gamma(t,\vec{v}) = \exp\left(-i\vec{v}\vec{K}_1/\hbar\right)\cdot ... \cdot \exp\left(-i\vec{v}\vec{K}_N/\hbar\right) = \exp(-i\vec{v}\vec{K}/\hbar) \ , \tag{5.16}$$
donde
$$\vec{K} = \sum_{i=1}^N \vec{K}_i = t\sum_{i=1}^N \vec{P}_i - \sum_{i=1}^N m_i\vec{X}_i = t\vec{P} - M\vec{R} \ , \tag{5.17}$$
donde $\vec{P} = \sum_i \vec{P}_i$ es el momento total del sistema, $M = \sum_i m_i$ es la masa total y
$$\vec{R} = \frac{\sum_i m_i \vec{X}_i}{M} \ , \tag{5.18}$$
es el operador vectorial posición del CM.

Invarianza de las ecuaciones de movimiento bajo una transformación de Galileo.

#1 De (4.26) queda claro que (5.12) está indefinida en una constante a partir de (5.9) y (5.11). No obstante, dicha variación siempre se puede reabsorber en una redefinición de la fase global de los estados de $\mathcal{O}'$. Además dado que $\exp\{-i\vec{K}\vec{v}/\hbar\}\exp\{-i\vec{P}\vec{a}/\hbar\} = \exp\{iM\vec{v}\vec{a}/\hbar\}\exp\{-i(\vec{K}\vec{v}+\vec{P}\vec{a})/\hbar\}$, ver problema 3.4, se establece una regla de superselección en MC no relativista, de forma que se prohibe la superposición de estados con masas distintas, puesto que la relación anterior es entre operadores y no debe dar lugar a fases relativas. Esta regla de superselección se puede evitar aumentando el álgebra de Galileo introduciendo un operador que conmute con el resto de generadores y cuyos autovalores sean las masas totales de los estados.

Sea $|\psi(t_0)\rangle$ un estado preparado por $\mathcal{O}$ en el instante de tiempo t_0, y sea $|\psi'(t_0)\rangle = \Gamma(t_0, \vec{v})|\psi(t_0)\rangle$ el estado correspondiente para $\mathcal{O}'$. Consideremos esta misma transformación un tiempo posterior $t_1 > t_0$,

$$|\psi'(t_1)\rangle = \Gamma(t_1, \vec{v})|\psi(t_1)\rangle = \Gamma(t_1, \vec{v})U_{\mathcal{O}}(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle \ . \tag{5.19}$$

Por otra parte, $|\psi'(t_1)\rangle$ es el evolucionado temporal de $|\psi'(t_0)\rangle$ desde el punto de vista del observador $\mathcal{O}'$, por lo tanto,

$$|\psi'(t_1)\rangle = U_{\mathcal{O}'}(t_1, t_0)|\psi'(t_0)\rangle \ , \tag{5.20}$$

donde hemos designado por $U_{\mathcal{O}'}(t_1, t_0)$ al operador de evolución temporal para $\mathcal{O}'$ y por $U_{\mathcal{O}}(t_1, t_0)$ al operador correspondiente para $\mathcal{O}$. Por lo tanto, llegamos a la relación:

$$U_{\mathcal{O}'}(t_1 - t_0)\Gamma(t_0, \vec{v}) = \Gamma(t_1, \vec{v})U_{\mathcal{O}}(t_1 - t_0) \ . \tag{5.21}$$

Imponemos además el principio de relatividad de Galileo, que afirma que dos sistemas de referencia inerciales deben tener las mismas ecuaciones de movimiento. De este modo, para que tanto $\mathcal{O}$ como $\mathcal{O}'$ tengan la misma ecuación de Schrödinger, se ha de cumplir que $H_{\mathcal{O}'} = H_{\mathcal{O}}$ y, por tanto,

$$U_{\mathcal{O}'}(t_1 - t_0) = U_{\mathcal{O}}(t_1 - t_0) \ . \tag{5.22}$$

Así, de aquí en adelante, suprimimos el subíndice $\mathcal{O}$ y $\mathcal{O}'$ para referirnos al operador de evolución, dado que es el mismo en ambos sistemas de referencia. Las expresiones (5.21) y (5.22) constituyen el contenido de la invarianza de las ecuaciones de movimiento bajo transformaciones de Galileo,

$$U(t_1 - t_0)\Gamma(t_0, \vec{v}) = \Gamma(t_1, \vec{v})U(t_1 - t_0) \ , \tag{5.23}$$

es decir, el estado evolucionado temporalmente según $\mathcal{O}$ y transformado entonces a $\mathcal{O}'$ por medio de una transformación de Galileo, es el mismo estado que transformado desde un principio a $\mathcal{O}'$ donde evoluciona temporalmente hasta el mismo instante de tiempo.

La relación anterior se pede reescribir como:

$$\Gamma(t_1, \vec{v}) = U(t_1 - t_0)\Gamma(t_0, \vec{v})U^\dagger(t_1 - t_0) \ , \tag{5.24}$$

y expresa simplemente que $\Gamma(t_1, \vec{v})$ es el operador transformado temporalmente del operador inicial $\Gamma(t_0, \vec{v})$.

Considerando una transformación de Galileo infinitesimal en (5.23), y manteniendo términos de primer orden en $\delta\vec{v}$, tenemos,

$$M\left[\vec{R}, U(t - t_0)\right] = t\vec{P}U(t, t_0) - t_0 U(t, t_0)\vec{P} \ . \tag{5.25}$$

Si suponemos adicionalmente invarianza bajo traslaciones espaciales, $[\vec{P}, H] = [\vec{P}, U(t - t_0)] = 0$, lo cual es siempre cierto para sistemas cerrado, la expresión anterior se puede simplificar como:

$$M\left[\vec{R}, U(t - t_0)\right] = \{tU(t - t_0) - t_0 U(t - t_0)\}\, \vec{P} \ . \tag{5.26}$$

Teniendo en cuenta que en la imagen de Heisenberg $\vec{R}(t) = U^\dagger(t - t_0)\vec{R}\, U(t - t_0)$, de la expresión anterior se tiene que:

$$\vec{R}(t) = \vec{R} + \frac{\vec{P}}{M}(t - t_0) \ , \tag{5.27}$$

que es completamente análoga al movimiento libre del CM en mecánica clásica para un sistema cerrado. Esta conclusión queda generalizada en (5.27) para sistemas cuánticos también.

Volviendo de nuevo a la imagen de Schrödinger y tomando $t - t_0 = \delta t$ infinitesimal, de (5.26) resulta:

$$M[\vec{R}, 1 - \frac{i\delta t}{\hbar} H] = \vec{P}\delta t \ , \tag{5.28}$$

a primer orden en δt. De este modo:

$$\Big[M\vec{R}, H\Big] = i\hbar\vec{P} \ . \tag{5.29}$$

Expresando el operador $\vec{R}$ en base de momentos, la expresión anterior implica para un sistema de N partículas:

$$\sum_{i=1}^{N} \left(m_i \frac{\partial H}{\partial \vec{P}_i} - \vec{P}_i \right) = 0 \ . \tag{5.30}$$

Consideremos el caso de una única partícula libre. En este supuesto H no puede depender de $\vec{X}$, ya que por invarianza bajo traslaciones $[\vec{P}, H] = 0$, con lo que $H = H(\vec{P})$. De este modo la ecuación anterior se reduce a:

$$M \frac{\partial H}{\partial \vec{P}} = \vec{P}, \tag{5.31}$$

cuya solución es $H(\vec{P}) = \vec{P}^{\,2}/2M + cte$. La constante cte la podemos eliminar ya que no influye en las ecuaciones de movimiento. Sólo daría lugar a una fase global común a todos los vectores del espacio de Hilbert que no tiene implicaciones físicas. Por lo tanto, hemos deducido el importante resultado de que el término de energía cinética de una partícula libre viene fijado por invarianza bajo transformaciones de Galileo.

Retomemos de nuevo el caso general de varias partículas y veamos que H dado por,

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{P}_i^2}{2m_i} + V(\vec{X}_1, \vec{X}_2, \ldots, \vec{X}_N) \ , \tag{5.32}$$

es solución de (5.30). Introduciendo (5.32) en (5.30) llegamos a que,

$$\sum_{i=1}^{N} m_i \frac{\partial V}{\partial \vec{P}_i} = 0 \ , \tag{5.33}$$

que se cumple trivialmente dado que V, por definición, no depende de $\vec{P}_i$, sino sólo de $\vec{X}_i$. Recordemos que para llegar a (5.29) hemos impuesto además invarianza bajo traslaciones, $[\vec{P}, H] = 0$. Esta restricción adicional se cumple de forma directa imponiendo que V sea función sólo de las diferencias entre los operadores vectoriales de posición de las distintas partículas, esto es, $V \equiv V(\vec{X}_1 - \vec{X}_2, \ldots, \vec{X}_{N-1} - \vec{X}_N)$. A la función V se le suele denominar potencial.

Capítulo 6

Rotaciones y momento angular

6.1. Rotaciones

Las rotaciones en $\mathbb{R}^N$ constituyen el grupo de transformaciones que dejan invariante el producto escalar de un vector consigo mismo o módulo al cuadrado. Sea R una rotación, entonces

$$\vec{x}\,' = R\vec{x}\ ,\ \ |\vec{x}\,'|^2 = \sum_{i=1}^{N}(x_i')^2 = \sum_{i=1}^{N} x_i^2\ . \tag{6.1}$$

En lenguaje matricial:

$$x_i' = \sum_{j=1}^{N} R_{ij}x_j\ ,\ \ |\vec{x}\,'|^2 = \sum_{i,j,k=1}^{N} R_{ik}R_{ij}x_k x_j = \sum_{i=1}^{N} x_i^2\ , \tag{6.2}$$

por lo tanto las rotaciones corresponden al grupo de transformaciones ortonormales $O(N)$ que verifican,

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N} R_{ik}R_{ij} &= \delta_{kj}\ ,\ \ \text{por lo tanto}\ ,\\ R^T\cdot R &= R\cdot R^T = 1\ .\end{aligned} \tag{6.3}$$

Como es bien conocido, las rotaciones, a diferencia de las traslaciones espaciales no conmutan entre sí, tal y como se muestra en la figura 6.1. Para especificar una rotación son necesarios tres parámetros *continuos*, que se pueden tomar como el ángulo de giro y las coordenadas del eje de giro $\hat{n}$. Otro conjunto también habitual son los ángulos de Euler que trataremos en detalle más abajo. Como consecuencia del teorema de Wigner, visto en la sección 2.5, las rotaciones vendrán por tanto representadas por operadores unitarios (que para espacios vectoriales reales son equivalentes a matrices ortonormales).

Dado que las rotaciones satisfacen (6.3), se obtiene que

$$(\det R)^2 = 1\ , \tag{6.4}$$

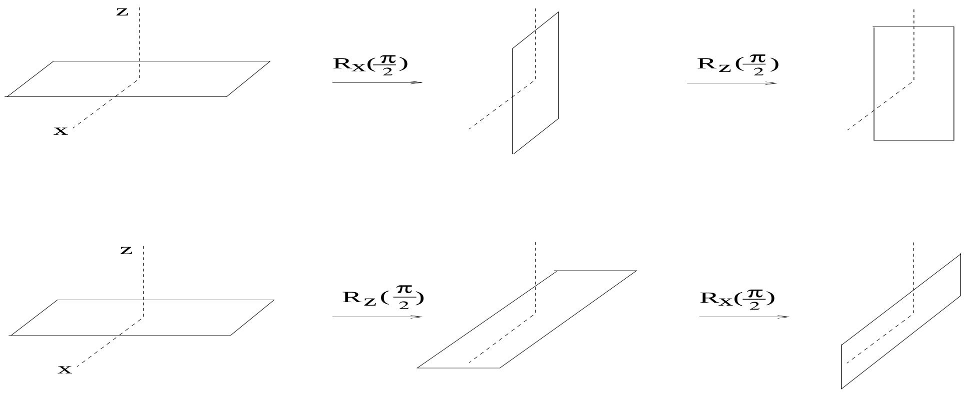

Figura 6.1: En esta figura se muestra cómo dos rotaciones sucesivas de 90^o alrededor de los ejes x y z no conmutan.

y por lo tanto su determinante es ± 1. Si el det$R$=+1 la rotación se llama propia, de lo contrario se llama impropia. Las rotaciones propias constituyen un subgrupo del grupo de rotaciones dado que el producto de dos rotaciones propias vuelve a ser una rotación propia, la inversa de una rotación propia también tiene determinante +1 y la identidad también tiene determinante +1. Por el contrario, las rotaciones impropias no constituyen un subgrupo del grupo de rotaciones dado que el producto de dos rotaciones impropias tiene determinante +1 y es una rotación propia.

En lo que sigue estudiaremos el subgrupo de rotaciones propias. La primera razón es que son éstas las únicas que están conectadas continuamente con la identidad. Esto es debido a que la identidad tiene determinante +1 y, como estamos considerando aquellas rotaciones que se conectan continuamente con la identidad, necesariamente estas rotaciones han de tener determinante +1 ya que de lo contrario se produciría un salto discontinuo en el determinante pasando de +1 a -1 violando continuidad. La segunda razón es que una vez caractericemos las rotaciones propias, lo habremos hecho también con las rotaciones impropias, dado que éstas se pueden escribir como el producto de una inversión espacial por una rotación propia. Este hecho es evidente si escribimos la rotación impropia como $R_i = P \cdot R$, siendo R un rotación propia y P la inversión espacial o paridad. Como el operador P tiene inversa siempre existe una matriz R que satisface la ecuación anterior con det$R = +1$ puesto que det$R_i = -1 = \det P \det R$ y det$P = -1$. Por otra parte, también es directo comprobar que R es de hecho una rotación ya que $R^T R = R_i^T P^T P R_i = 1$ y $P^T = P = P^{-1}$. En el siguiente capítulo estudiaremos el operador paridad.

Sigamos adelante, y consideremos la expresión en tres dimensiones para una rotación alrededor del eje z de ángulo ϕ. Como es bien sabido:

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos\phi & -\mathrm{sen}\phi & 0 \\ \mathrm{sen}\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} ~, \\
R_z(\phi) &= \begin{pmatrix} \cos\phi & -\mathrm{sen}\phi & 0 \\ \mathrm{sen}\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} ~. \qquad (6.5)
\end{aligned}
$$

Si consideramos que el ángulo ϕ es infinitesimal, $\phi \equiv \epsilon$, y dado que una rotación sobre un mismo eje conmuta consigo misma y es unitaria, ya sabemos por el capítulo dedicado a las traslaciones espaciales, temporales y transformaciones de Galileo que $R_z(\epsilon)-1$ es proporcional a ϵ y escribimos,

$$R_z(\epsilon) = 1 - i\frac{\epsilon J_z}{\hbar} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \ . \tag{6.6}$$

Imponiendo a su vez que R_z sea ortonormal,

$$R_z^T(\epsilon) R_z(\epsilon) = 1 = 1 - i\frac{J_z^T \epsilon}{\hbar} - i\frac{J_z \epsilon}{\hbar} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \ , \tag{6.7}$$

entonces

$$J_z^T = -J_z \ , \tag{6.8}$$

una matriz antisimétrica. Desarrollando la matriz $R_z(\phi)$ dada en la expresión (6.5) hasta primer orden en ϕ y comparando con (6.6), obtenemos la siguiente expresión para J_z,

$$J_z = i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \ . \tag{6.9}$$

La presencia de la unidad imaginaria i en J_z, junto con el carácter antisimétrico de dicho operador, establecen que J_z es un operador hermítico, y por lo tanto R_z es unitario, como tiene que ser debido al teorema de Wigner y el hecho de que los parámetros que caracterizan las rotaciones son continuos. Al operador J_z se le denomina generador de las rotaciones alrededor del eje z.

Del mismo modo podemos proceder para $R_x(\phi)$ y $R_y(\phi)$,

$$\begin{aligned} R_x(\phi) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & -\text{sen}\phi \\ 0 & \text{sen}\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \ , \\ R_y(\phi) &= \begin{pmatrix} \cos\phi & 0 & \text{sen}\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\text{sen}\phi & 0 & \cos\phi \end{pmatrix} \ , \end{aligned} \tag{6.10}$$

y para los generadores J_x y J_y,

$$\begin{aligned} J_x &= i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \\ J_y &= i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \ . \end{aligned} \tag{6.11}$$

De forma compacta podemos expresar,

$$(J_i)_{jk} = -i\hbar\epsilon_{ijk} \ , \tag{6.12}$$

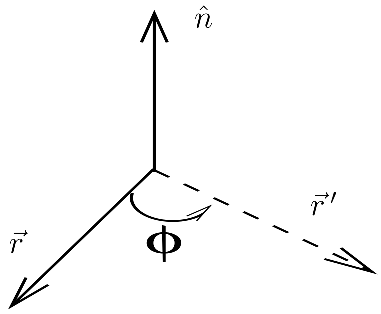

Figura 6.2: Rotación de ángulo de giro ϕ alrededor del eje $\hat{n}$, $R_n(\phi)\vec{r} = \vec{r}\,'$.

siendo ϵ_{ijk} el tensor completamente antisimétrico en dimensión 3 con $\epsilon_{123} = +1$.

Consideremos a continuación una rotación genérica alrededor del eje $\hat{n}$ y con un ángulo de giro ϕ, ver figura 6.2. Sea el caso infinitesimal con ángulo de giro $\delta\phi$ y manteniendo hasta primer orden en $\delta\phi$ tenemos:

$$\begin{aligned}
\delta\vec{r} &= \delta\phi\,\hat{n}\times\vec{r}\;, \\
\delta r_i &= \delta\phi\sum_{j,k=1}^{3}\epsilon_{ijk}n_j r_k = -i\frac{\delta\phi}{\hbar}\sum_{j,k=1}^{3}(J_j n_j)_{ik}\,r_k = -i\frac{\delta\phi}{\hbar}\sum_{k=1}^{3}(\vec{J}\hat{n})_{ik}r_k\;.
\end{aligned} \tag{6.13}$$

También hemos tenido en cuenta la expresión (6.12) para expresar los generadores de las rotaciones, o momento angular, J_i tal que $\vec{J} = (J_1, J_2, J_3)$.

La expresión (6.13) nos indica que el generador de una rotación arbitraria alrededor de un cierto eje es la proyección del vector de momento angular $\vec{J}$ según el eje de giro $\hat{n}$. Como caso particular vemos que para las rotaciones anteriores alrededor de los ejes x, y y z recuperamos las matrices J_1, J_2 y J_3 como generadores. Finalmente, dado que una rotación alrededor de un eje $\hat{n}$ de ángulo ϕ se puede obtener como una aplicación sucesiva de rotaciones alrededor del mismo eje de giro, tenemos la fórmula análoga a (5.13) pero ahora aplicada a rotaciones:

$$R_n(\phi) = \lim_{N\to\infty}\left(1 - i\frac{\phi}{N\hbar}(\vec{J}\hat{n})\right)^N = e^{-i\phi\vec{J}\hat{n}/\hbar}\;, \tag{6.14}$$

donde de nuevo se ha empleado el resultado (5.14).

<u>Álgebra de momento angular.</u>

Como consecuencia de (6.14) los generadores J_i constituyen una base de un espacio vectorial de dimensión tres, dado que el argumento de la exponencial es una superposición lineal arbitraria de los generadores J_i y cualquier otra combinación lineal e invertible de los mismos sería igualmente válida para expresar cualquier rotación, simplemente cambiarían los parámetros que definirían entonces a las rotaciones.

Por otra parte, se demuestra directamente que los generadores J_i dados en (6.12) satisfacen las relaciones de conmutación,

$$[J_i, J_j] = i\hbar\sum_{\ell=1}^{3}\epsilon_{ij\ell}J_\ell\;, \tag{6.15}$$

que definen el álgebra del momento angular. Se denomina álgebra dado que la operación (6.15) actuando sobre un par de J_i es cerrada y bilineal.

Hay que destacar que las relaciones de conmutación anteriores son intrínsecas a los operadores J_i, independientemente de los estados sobre los que actúen. Para ello considérese el producto de rotaciones,

$$R_{n_2}(\phi_2)R_n(\phi_1)R_{n_2}(\phi_2)^T \ , \tag{6.16}$$

donde ϕ_1 y ϕ_2 son infinitésimos O(ϵ). Desarrollando el producto (6.16) hasta O(ϵ^2), tenemos:

$$\begin{aligned} R_{n_2}(\phi_2)R_n(\phi_1)R_{n_2}(\phi_2)^T &= 1 - i\frac{\phi_1(\vec{J}\hat{n})}{\hbar} - \frac{1}{2}\frac{\phi_1^2(\vec{J}\hat{n})^2}{\hbar^2} - \frac{\phi_1\phi_2}{\hbar^2}\sum_{k,\ell=1,3} n_{2k}n_\ell[J_k,J_\ell] + \mathcal{O}(\epsilon^3) \\ &= e^{-i\phi_1(\vec{J}\hat{n})/\hbar}e^{-\phi_1\phi_2\sum_{k,\ell}n_{2k}n_\ell[J_k,J_\ell]} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \ . \end{aligned} \tag{6.17}$$

De la expresión anterior se deduce que, para que el lado derecho en la última línea sea una rotación de acuerdo a su expresión genérica dada en (6.14), se debe tener que $[J_k, J_\ell] = i\sum_i C_{k\ell i}J_i$ y que esta relación debe ser independiente del espacio vectorial o espacio de Hilbert donde actúen las rotaciones, puesto que es una consecuencia de la ley de multiplicación del grupo de rotaciones. En particular, los coeficientes $C_{k\ell i}$ (las llamadas constantes de estructura del grupo de rotaciones) las hemos deducido en (6.15) teniendo en cuenta la expresión explícita de los generadores para tres dimensiones. También se llega al mismo resultado teniendo en cuenta que el producto dado en (6.16) corresponde a una rotación de ángulo ϕ_1 pero sobre el eje $\hat{n}' = R_{n_2}(\phi_2)\hat{n}$, que es el eje que resulta de aplicar la rotación $R_{n_2}(\phi_2)$ al eje de giro original $\hat{n}$. Queda claro que las relaciones (6.15) entre los generadores de las rotaciones J_i son características del grupo de rotaciones como tal, independientemente de que éstas actúen sobre vectores de $\mathbb{R}^n$, tensores, funciones de onda, etc, aun cuando las matrices que representen los generadores J_i, no sean las mismas. Por ejemplo, los vectores en $\mathbb{R}^3$ constituyen un espacio vectorial de dimensión 3 mientras que los tensores de rango 2 constituyen un espacio vectorial de dimensión 9. Con ello las matrices correspondientes a los generadores J_i son en el primer caso matrices 3×3 mientras que en el segundo son matrices 9×9.

Ángulos de Euler.

Consideremos los ejes de coordenadas $\hat{x}_1$, $\hat{y}_1$ y $\hat{z}_1$, que tras una rotación se transforman en los ejes $\hat{x}_3$, $\hat{y}_3$, $\hat{z}_3$. El paso de la triada inicial a la final se puede conseguir aplicando el siguiente conjunto de rotaciones:

1) Una rotación de ángulo α, $\alpha \in [0, 2\pi[$, alrededor del eje $\hat{z}_1$, $R_{z_1}(\alpha)$.

2) Una rotación de ángulo β, $\beta \in [0, \pi]$, alrededor del eje $\hat{y}_2$, $R_{y_2}(\beta)$, con $\hat{y}_2 = R_{z_1}(\alpha)\hat{y}_1$.

3) Una rotación de ángulo γ, $\gamma \in [0, 2\pi[$, alrededor del eje $\hat{z}_2 = \hat{z}_3$, $R_{z_3}(\gamma)$, con $\hat{z}_3 = R_{y_2}(\beta)\hat{z}_1$.

Con 1) se consigue que $\hat{y}_2$ sea perpendicular al plano formado por $\hat{z}_1$-$\hat{z}_3$. A continuación en 2) se hace la rotación alrededor de $\hat{y}_2$ tal que $\hat{z}_1$ coincida con $\hat{z}_2 = \hat{z}_3$. Finalmente, se realiza en 3) la rotación alrededor del eje $\hat{z}$ final hasta que los vectores $\hat{x}_2$ e $\hat{y}_2$ coincidan con los ejes $\hat{x}_3$ e $\hat{y}_3$. Esto siempre es posible puesto que los ejes $\hat{x}_2$ e $\hat{y}_2$ son perpendiculares a $\hat{z}_3$ y, por tanto, necesariamente están contenidos en el plano perpendicular a $\hat{z}_3$ donde están contenidos los ejes $\hat{x}$ e $\hat{y}$ finales.

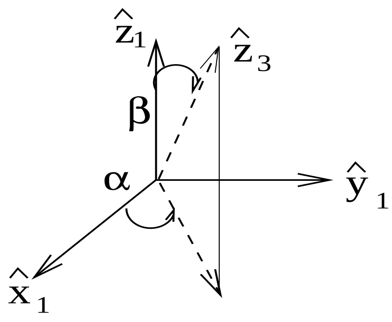

Figura 6.3: Ángulos de Euler. En la figura se indican el sistema de referencia inicial y el eje $\hat{z}_3$ del sistema de referencia final, así como los ángulos β y α.

Una rotación dada en función de los ángulos de Euler la designaremos por $R(\alpha,\beta,\gamma)$. Teniendo en cuenta la secuencia de rotaciones de 1), 2) y 3),

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = \exp(-i\gamma J_{z_3}/\hbar)\exp(-i\beta J_{y_2}/\hbar)\exp(-i\alpha J_{z_1}/\hbar)~. \tag{6.18}$$

La expresión anterior se puede simplificar de modo que todas las rotaciones estén referidas a los ejes iniciales, si tenemos en cuenta que el operador transformado por una transformación unitaria, como lo es una rotación, viene dado de acuerdo a (2.60). De este modo,

$$\begin{aligned}
\exp(-i\beta J_{y_2}/\hbar) &= \exp(-i\alpha J_{z_1}/\hbar)\exp(-i\beta J_{y_1}/\hbar)\exp(i\alpha J_{z_1}/\hbar)~,\\
\exp(-i\gamma J_{z_3}/\hbar) &= \exp(-i\beta J_{y_2}/\hbar)\exp(-i\gamma J_{z_1}/\hbar)\exp(i\beta J_{y_2}/\hbar)\\
&= \exp(-i\alpha J_{z_1}/\hbar)\exp(-i\beta J_{y_1}/\hbar)\exp(i\alpha J_{z_1}/\hbar)\\
&\times \exp(-i\gamma J_{z_1}/\hbar)\exp(-i\alpha J_{z_1}/\hbar)\exp(i\beta J_{y_1}/\hbar)\exp(i\alpha J_{z_1}/\hbar) \qquad (6.19)\\
&= \exp(-i\alpha J_{z_1}/\hbar)\exp(-i\beta J_{y_1}/\hbar)\exp(-i\gamma J_{z_1}/\hbar)\exp(i\beta J_{y_1}/\hbar)\exp(i\alpha J_{z_1}/\hbar)~.
\end{aligned}$$

En la expresión anterior hemos tenido en cuenta que rotaciones sobre un mismo eje conmutan. Introduciendo (6.19) en (6.18), tenemos finalmente:

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{-i\beta J_y/\hbar}e^{-i\gamma J_z/\hbar}~, \tag{6.20}$$

donde no se han indicado los subíndices que especifican los ejes dado que todas las rotaciones están referidas a los ejes iniciales.

A diferencia de la mecánica clásica, donde el espacio de configuración de una partícula es el propio espacio $\mathbb{R}^3$, en MC nuestra descripción de los procesos físicos se establece en un espacio de Hilbert. Ello implica que hayamos de desarrollar un lenguaje algebraico abstracto donde hablemos del grupo de rotaciones, por una parte, y por otra del espacio de Hilbert, donde dicho grupo de rotaciones actúe. Como grupo, el producto de dos rotaciones $R_1\cdot R_2$ corresponde a una rotación R_3, y ésta es una relación entre las rotaciones como elementos pertenecientes al grupo de rotaciones e independiente del espacio de Hilbert donde actúen dichas rotaciones. Las rotaciones pueden actuar sobre vectores, tensores en $\mathbb{R}^3$ o sobre otros objetos y, según las propiedades del espacio en cuestión bajo transformación por rotaciones, hablamos de una *representación* u otra del grupo de rotaciones. Pero en toda representación se conserva la ley de composición de dos rotaciones.

Teniendo en cuenta esta discusión, en lo que sigue designaremos por $\mathcal{D}(R(\alpha,\beta,\gamma))$, o simplemente por $\mathcal{D}(\alpha,\beta,\gamma)$, a la matriz que actúa sobre el espacio de Hilbert soporte de la MC y que corresponda a la rotación $R(\alpha,\beta,\gamma)$ en $\mathbb{R}^3$. Como la ley de composición entre matrices se debe conservar independiente de representación, se tiene que,

$$\mathcal{D}(R_1)\mathcal{D}(R_2) = \mathcal{D}(R_1R_2) = \mathcal{D}(R_3) \;, \tag{6.21}$$

si $R_1R_2 = R_3$. Los operadores $\mathcal{D}(R)$ son unitarios como consecuencia del teorema de Wigner, dado que establecen descripciones equivalentes y son operadores que dependen de parámetros continuos.

Los operadores $\mathcal{D}(R)$ seguirán dados por las expresiones (6.14) o por (6.20), pero los generadores J_i corresponderán a matrices distintas a las dadas en (6.9) y (6.11) para el caso especial de actuación del grupo de rotaciones sobre vectores de $\mathbb{R}^3$. Por supuesto, los operadores J_i seguirán cumpliendo el álgebra del momento angular (6.15) dado que, como se argumentó, es intrínseca al grupo e independiente del espacio vectorial o de Hilbert sobre el que actúe el grupo de rotaciones.

La transformación de los operadores bajo una rotación, como ya hemos empleado en (6.19), viene dada por:

$$X \to X' = \mathcal{D}(R)X\mathcal{D}(R)^\dagger \;. \tag{6.22}$$

Para una rotación infinitesimal y a primer orden en $\delta\phi$,

$$X' = \left(1 - i\delta\phi\frac{\vec{J}\hat{n}}{\hbar}\right) X \left(1 + i\delta\phi\frac{\vec{J}\hat{n}}{\hbar}\right) = X - i\delta\phi\frac{\hat{n}}{\hbar}[\vec{J},X] \;. \tag{6.23}$$

Por lo tanto, un observable X es independiente bajo rotaciones si conmuta con el momento angular $\vec{J}$, $[\vec{J},X]=0$. En este caso, se dice que X es un escalar. De (6.15) se deduce directamente que,

$$\vec{J}^2 = \sum_{i=1}^{3} J_i^2 \;, \tag{6.24}$$

es invariante bajo rotaciones dado que $[J_i,\vec{J}^2]=0$.

En particular, para sistemas cerrados el Hamiltoniano es invariante bajo rotaciones con lo que,

$$[\vec{J},H] = 0 \;, \tag{6.25}$$

y H conmuta con el momento angular y, por lo tanto, éste es una constante de movimiento de acuerdo a (3.37). Vemos de nuevo un ejemplo de dos generadores de grupos uniparamétricos de transformaciones que son invariantes bajo las transformaciones asociadas a los mismos al conmutar entre ellos. Esta situación ya es conocida en mecánica analítica como se indicó tras (4.19) en relación a P_i y H.

6.2. Autovalores y autoestados del momento angular

Como consecuencia del álgebra del momento angular (6.15) construimos en esta sección los espacios vectoriales mínimos que son cerrados bajo la actuación sobre ellos de una rotación cualquiera.

Dichos espacios vectoriales vendrán caracterizados unívocamente por el autovalor que $\vec{J}^2$ adopta sobre los mismos, que como sabemos es invariante bajo cualquier rotación.

De (6.15) queda claro que las distintas componentes de momento angular son observables mutuamente incompatibles dado que no conmutan. Por convenio, busquemos los autovalores y autovectores de la tercera componente del momento angular, J_z. Dado que $\vec{J}^2$ conmuta con todos los J_i, lo hará en particular con J_z y así diagonalizaremos simultáneamente a J_z y $\vec{J}^2$. Los autovalores de ambos operadores los designaremos por a y b respectivamente, y a los autovectores por $|a,b\rangle$ de forma que:

$$\begin{aligned} \vec{J}^2|a,b\rangle &= a|a,b\rangle \ , \\ J_z|a,b\rangle &= b|a,b\rangle \ , \\ \langle a'b'|ab\rangle &= \delta_{aa'}\delta_{bb'} \ . \end{aligned} \tag{6.26}$$

A partir de los operadores J_x y J_y podemos construir los operadores escalera J_+ y J_- definidos por:

$$J_\pm = J_x \pm i\, J_y \ , \tag{6.27}$$

de donde se sigue que

$$J_- = J_+^\dagger \ . \tag{6.28}$$

De (6.15), deducimos las siguientes importantes relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= 2\hbar J_z \ , \\ [J_z, J_\pm] &= \pm\hbar J_\pm \ , \\ \left[\vec{J}^2, J_\pm\right] &= 0 \ . \end{aligned} \tag{6.29}$$

De las relaciones de conmutación anteriores deducimos,[#1]

$$\begin{aligned} J^2 J_\pm|a,b\rangle &= J_\pm J^2|a,b\rangle = aJ_\pm|a,b\rangle \ , \\ J_z J_\pm|a,b\rangle &= J_\pm J_z|a,b\rangle \pm \hbar J_\pm|a,b\rangle = (b\pm\hbar)J_\pm|a,b\rangle \ . \end{aligned} \tag{6.30}$$

Por lo tanto $J_\pm|a,b\rangle$ es un autoestado de J_z con autovalor $b\pm\hbar$, a no ser que $J_\pm|a,b\rangle$ sea cero. Si éste no es el caso, entonces $J_\pm|a,b\rangle = c_\pm|a,b\pm\hbar\rangle$ siendo $c_\pm$ una constante que determinaremos más adelante.

Nos encontramos en situación de deducir qué valores pueden adoptar los números reales a y b. Supongamos que aplicamos sucesivamente n veces J_+ sobre un autoestado $|a,b\rangle$. Como consecuencia de (6.30) aumentamos en $n\hbar$ el autovalor de J_z, b, mientras que a no cambia. No obstante n no puede hacerse arbitrariamente grande puesto que de lo contrario el operador definido positivo $J^2 - J_z^2 = J_x^2 + J_y^2$ acabaría teniendo autovalores negativos. En efecto,

$$\langle a,b|J^2 - J_z^2|a,b\rangle = a - b^2 = \frac{1}{2}\langle a,b|J_+J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+|a,b\rangle \geq 0 \ . \tag{6.31}$$

[#1]En lo que sigue $J^2 \equiv \vec{J}^2$.

Por lo tanto, $b^2 \leq a$ y si al aplicar sucesivamente J_+ pasamos de b a $b+n\hbar$ para n suficientemente grande queda claro que se violaría (6.31). Así, de (6.30) debe existir un b_{max} tal que

$$J_+|a, b_{max}\rangle = 0 \; . \tag{6.32}$$

Del mismo modo, a partir del estado anterior podemos aplicar J_- sucesivamente y, para n suficientemente grande, $b_{max} - \hbar n$ violaría (6.31). Por lo tanto, de (6.30) debe existir un b_{min},

$$b_{min} = b_{max} - n\hbar \; , \tag{6.33}$$

tal que

$$J_-|a, b_{min}\rangle = 0 \; . \tag{6.34}$$

Teniendo en cuenta que $J_-J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$ y que $J_+J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z$, se sigue que:

$$\begin{aligned} J_-J_+|a, b_{max}\rangle = (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|a, b_{max}\rangle = (a - b_{max}^2 - \hbar b_{max})|a, b_{max}\rangle &= 0 \\ J_+J_-|a, b_{min}\rangle = (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z)|a, b_{min}\rangle = (a - b_{min}^2 + \hbar b_{min})|a, b_{min}\rangle &= 0 \; . \end{aligned} \tag{6.35}$$

De la primera ecuación deducimos que $a = b_{max}(b_{max} + \hbar)$ y de la segunda que $a = b_{min}(b_{min} - \hbar)$. Igualando tenemos:

$$b_{max}^2 + \hbar b_{max} = b_{min}^2 - \hbar b_{min} \; , \tag{6.36}$$

con dos soluciones posibles, o $b_{max} = -b_{min}$ o $b_{max} = b_{min} - 1$. La segunda solución se descarta dado que necesariamente $b_{max} \geq b_{min}$. De (6.33) se sigue que:

$$b_{max} - n\hbar = b_{min} = -b_{max} \;\; \to \;\; b_{max} = n\frac{\hbar}{2} \; , \tag{6.37}$$

con $n \in \mathbb{N}$. Es costumbre designar a b_{max} por $\hbar j$. Mediante el operador escalera J_- pasamos del estado con $\hbar j$ a cualquier otro, y por lo tanto de (6.30) $b = \hbar(j - n)$ tras aplicar n veces J_-. Así todos los autovalores de J_z, $b = j_z = \hbar m$, cumplen que $-\hbar j \leq \hbar m \leq \hbar j$ tal que la diferencia entre dos de tales autovalores es un múltiplo entero de $\hbar$ y por lo tanto hay $2j + 1$ autoestados con m entero o semientero. Además de (6.35) resulta,

$$a = \hbar^2 j(j + 1) \; . \tag{6.38}$$

Designando finalmente a los estados $|a, b\rangle$ por $|jm\rangle$, se tiene en resumen:

$$\begin{aligned} J^2|jm\rangle &= \hbar^2 j(j + 1)|jm\rangle \; , \\ J_z|jm\rangle &= \hbar m|jm\rangle \; , -j \leq m \leq j \; , \;\; j \text{ es semientero o entero.} \end{aligned} \tag{6.39}$$

Como los vectores $|jm\rangle$ son autoestados de los operadores autoadjuntos J^2 y J_z, son ortogonales a no ser que los dos autovalores j y m sean iguales tal y como vimos en la sección 2.3. Además puesto que el espectro es discreto los normalizamos a la unidad, tal y como expresamos en (6.26). De este modo,

$$\langle j'm'|jm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'} \; . \tag{6.40}$$

A continuación, vamos a determinar la constante $c_\pm$ que introdujimos tras (6.30). Para ello, calculemos el módulo al cuadrado de $J_+|jm\rangle$,

$$\langle jm|J_-J_+|jm\rangle = \langle jm|J^2 - J_z^2 - \hbar J_z|jm\rangle = \hbar^2(j(j+1) - m(m+1)) \ . \tag{6.41}$$

Por lo tanto $|c_+|^2 = \hbar^2(j(j+1) - m(m+1))$. Eligiendo la fase de $|jm\rangle$ tal que c_+ sea real y positivo, tenemos:

$$J_+|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}|jm+1\rangle \ . \tag{6.42}$$

Una vez definida la actuación de J_+ queda definida la de J_- pues este operador no es más que $J_+^\dagger$. En efecto, teniendo en cuenta (6.42)

$$\begin{aligned} J_-|jm\rangle &= \frac{J_-J_+|jm-1\rangle}{\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}} = \frac{(J^2-J_z^2-\hbar J_z)|jm-1\rangle}{\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}} \\ &= \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|jm-1\rangle \ . \end{aligned} \tag{6.43}$$

De las simples actuaciones de los operadores J_+ y J_- dadas en (6.42) y (6.43), y de la definición de los $J_\pm$ en (6.27), se puede deducir la actuación de J_x y J_y sobre los estados $|jm\rangle$.

Resumiendo, vemos que los espacios vectoriales mínimos cerrados o irreducibles[#2] bajo la actuación de los J_i y, por tanto, de las matrices $\mathcal{D}(R)$, vienen caracterizados por un número entero o semientero j, son de dimensión $2j+1$ y cualquier autoestado $|j(j-m)\rangle$ se puede obtener aplicando m veces el operador escalera J_- sobre $|jj\rangle$ según (6.43), que fija las fases de todos los estados $|jm\rangle$ excepto la de $|jj\rangle$. El número j define el espín del sistema y sus valores pueden ser por tanto 0, 1/2, 1, 3/2, ... Como es bien sabido, hay partículas como los electrones que tiene espín 1/2, otras tienen espín 1 como los fotones, espín 3/2 como los bariones $\Delta(1232)$, etc.

6.3. Adición de momento angular

Ya establecimos en la sección (2.3) al hablar de sistemas compuestos que el proceso de considerar sistemas más complejos pasa por el producto directo de los respectivos espacios de Hilbert de las partículas individuales. Nos planteamos en esta sección el problema de descomponer el producto directo de dos momentos angulares asociados a grados de libertad independientes (por ejemplo, los espines de dos partículas) como suma de espacios vectoriales con espín bien definido del momento angular total, suma de los dos momentos angulares independientes. Por ejemplo, si en $\mathbb{R}^3$ consideramos el tensor cartesiano de rango dos x^ix^j a partir de él podemos formar la traza x^ix^i, que es invariante bajo rotaciones, su producto vectorial $\sum_{ij}\epsilon_{kij}x^ix^j$ que se transforma como un vector, y $x^ix^j - \delta^{ij}x^\ell x^\ell/3$ que se transforma como un espín de rango 2. Estos razonamientos los vamos a generalizar en esta sección para el caso de combinar dos espines arbitrarios j_1 y j_2.

Dado que dichos espines actúan sobre espacios vectoriales independientes deben conmutar,

$$[J_{1\,i}, J_{2\,j}] = 0 \ . \tag{6.44}$$

[#2] También denominados multipletes.

Por lo tanto, una rotación que actúe sobre el espacio producto directo $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, será el producto directo de las rotaciones que actúan sobre los espacios de Hilbert individuales,

$$\mathcal{D}(R) = e^{-i\phi \vec{J}_1 \hat{n}/\hbar} e^{-i\phi \vec{J}_2 \hat{n}/\hbar} \;, \tag{6.45}$$

dado que la base producto directo se transforma bajo una rotación como:

$$\begin{aligned} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle &\rightarrow e^{-i\phi \vec{J}_1 \hat{n}/\hbar} |j_1 m_1\rangle e^{-i\phi \vec{J}_2 \hat{n}/\hbar} |j_2 m_2\rangle \\ &= e^{-i\phi \vec{J}_1 \hat{n}/\hbar} e^{-i\phi \vec{J}_2 \hat{n}/\hbar} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \\ &= e^{-i\phi (\vec{J}_1 + \vec{J}_2) \hat{n}/\hbar} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \;, \end{aligned} \tag{6.46}$$

puesto que $\vec{J}_1$ y $\vec{J}_2$ conmutan y, por lo tanto, el momento angular total es,

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \;. \tag{6.47}$$

Así, $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ es el generador de las rotaciones en el espacio producto directo resultante de la composición de dos momentos angulares. Por lo tanto, el operador de momento angular total $\vec{J}$ satisface el álgebra de momento angular (6.15), como también se puede demostrar explícitamente. En (6.46) hemos introducido la notación $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$.

Al igual que en la sección anterior 6.2, diagonalizaremos simultáneamente los operadores $\vec{J}^{\,2}$ y J_z, puesto que conmutan, junto con los operadores escalares $\vec{J}_1^{\,2}$ y $\vec{J}_2^{\,2}$ que por tanto conmutan también con todas las componentes J_i del momento angular total, como también se puede comprobar explícitamente. Los autovectores de J^2, J_z, J_1^2 y J_2^2 los designaremos por $|j_1 j_2 j m\rangle$. Estos estados constituirán la nueva base de momento angular total definido y determinaremos en esta sección los coeficientes del cambio de base. Merece la pena remarcar la conservación del número de operadores que constituyen el conjunto completo de observables mutuamente compatibles empleado, dado que el número de grados de libertad para caracterizar un sistema se debe conservar. Inicialmente teníamos el conjunto completo de observables compatibles J_1^2, $J_{1\,z}$, J_2^2 y $J_{2\,z}$ y de éste pasamos a J^2, J_z, J_1^2 y J_2^2.

Los estados de la nueva base, dado que son autovectores de operadores hermíticos de espectro discreto se pueden elegir que satisfagan:

$$\langle j_1 j_2 j m | j_1' j_2' j' m' \rangle = \delta_{j_1 j_1'} \delta_{j_2 j_2'} \delta_{j j'} \delta_{m m'} \;, \tag{6.48}$$

con lo que constituyen una base ortonormal al igual que la base producto directo $\{|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle\}$. El cambio de base lo expresamos como:

$$\begin{aligned} |j_1 j_2 j m\rangle &= \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \;, \\ |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= \sum_{j} \sum_{m=-j}^{j} \langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2\rangle |j_1 j_2 j m\rangle \;, \end{aligned} \tag{6.49}$$

los límites en la suma sobre j serán establecidos más abajo. Los coeficientes implicados en el cambio de base $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle$ se denominan coeficientes de Clebsch-Gordan. Como $J_z = J_{1\,z} + J_{2\,z}$, en la suma primera sobre m_1 y m_2 se debe cumplir que $m = m_1 + m_2$, con lo que dicha suma involucra únicamente sumar sobre m_1 o sobre m_2. Debido a que ambas bases son ortonormales se cumplen las siguientes relaciones de ortogonalidad:

$$\begin{aligned}
\sum_{jm} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle \langle jm | j_1' m_1' j_2' m_2' \rangle &= \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} \delta_{j_1 j_1'} \delta_{j_2 j_2'} \ , \\
\sum_{m_1} \langle jm | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j' m' \rangle &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \ ,
\end{aligned} \tag{6.50}$$

con $m_2 = m - m_1$.

Estudiemos a continuación el espectro de J^2 y J_z. Para ello tengamos en cuenta los resultados obtenidos en la sección anterior que se aplican a cualquier momento angular.

a) La base consta de $(2j_1+1)(2j_2+1)$ vectores que es el número de vectores en la base producto directo de $\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}$.

b) Para cada valor de j tenemos que m ha de cumplir (6.39) y por tanto $-j \le m \le j$ con m entero o semientero.

c) Dado que $J_z = J_{1\,z} + J_{2\,z}$ entonces el elemento de la base producto directo $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ tiene autovalor de J_z igual a $\hbar(m_1 + m_2)$.

Aplicamos el método basado en los operadores escalera, similarmente a como hicimos en la sección anterior. De c) el valor más alto de j es $j_1 + j_2$ dado que éste es el valor máximo de m, habiendo sólo un estado que tenga $m_1 = j_1$ y $m_2 = j_2$, con lo que identificamos:

$$|j_1 j_2 (j_1 + j_2)(j_1 + j_2)\rangle = |j_1 j_1 j_2 j_2\rangle \ . \tag{6.51}$$

El siguiente valor más alto de m será $j_1 + j_2 - 1$ y hay dos estados, $|j_1 j_1 j_2 j_2 - 1\rangle$ y $|j_1 j_1 - 1 j_2 j_2\rangle$, con lo que $|j_1 j_2 (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)\rangle$ será combinación lineal de ambos estados. Aplicando J_- a (6.51) de (6.43) se sigue que,

$$\begin{aligned}
J_- |j_1 j_2 (j_1 + j_2)(j_1 + j_2)\rangle &= \hbar\sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 j_2 (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)\rangle \\
&= (J_{1\,-} + J_{2\,-}) |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle \\
&= \hbar\sqrt{2j_1} |j_1 j_1 - 1 j_2 j_2\rangle + \hbar\sqrt{2j_2} |j_1 j_1 j_2 j_2 - 1\rangle \ ,
\end{aligned} \tag{6.52}$$

con lo que:

$$|j_1 j_2 (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 - 1)\rangle = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1 j_2 j_2 - 1\rangle + \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 j_1 - 1 j_2 j_2\rangle \ . \tag{6.53}$$

De este modo, aplicando sucesivamente J_- al estado (6.51) generamos todos los $2(j_1 + j_2) + 1$ estados con $j = j_1 + j_2$.

A continuación calculamos todos los estados con $j = j_1 + j_2 - 1$ aplicando sucesivamente J_- al estado con m máxima, $j_1 + j_2 - 1$, para este j. Dicho estado se obtiene imponiendo que sea ortogonal a (6.53) y de norma unidad. Este proceso deja libre una fase que fijaremos tal que el coeficiente que multiplique al estado con m_1 máximo sea positivo. Específicamente para nuestro caso con $j = j_1 + j_2 - 1$ se tiene,

$$|j_1 j_2 (j_1 + j_2 - 1)(j_1 + j_2 - 1)\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}|j_1 j_1 j_2 j_2 - 1\rangle - \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}|j_1 j_1 - 1 j_2 j_2\rangle \ , \tag{6.54}$$

y, por lo tanto, el resto de los estados se obtiene aplicando sucesivamente J_- a este estado.

Este proceso se aplica de forma iterativa. Así para determinar los estados con un cierto j, determinamos el estado $|j_1 j_2 j j\rangle$ con $m = j$ máxima tal que sea ortogonal y de norma unidad a los estados ya fijados con $j' = j + 1$, $j + 2$, ..., $j_1 + j_2$ y $m = j$. El resto de vectores con el mismo autovalor j se obtienen aplicando sucesivamente J_- hasta obtener el estado $|j - j\rangle$. De este modo, se determinan los coeficientes del cambio de base o coeficientes de Clebsch-Gordan. Este procedimiento está basado en la actuación de J_- dada en (6.43) sobre el estado (6.51) $|j_1 j_2 (j_1 + j_2)(j_1 + j_2)\rangle$ y en el proceso posterior de ortogonalización, y, por lo tanto, los coeficientes de Clebsch-Gordan son reales. De este modo, en (6.49) se tiene que,

$$\langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle \ . \tag{6.55}$$

Determinemos a continuación el valor mínimo de j. Para ello, hemos de asegurar que el número de estados en las dos bases deben coincidir. Por lo tanto,

$$\sum_{j=j_{min}}^{j=j_{max}} 2j + 1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \ . \tag{6.56}$$

De aquí se sigue la ecuación $j_1^2 + j_2^2 - 2j_1 j_2 = j_{min}^2$ cuya solución es

$$j_{min} = |j_1 - j_2| \ , \tag{6.57}$$

puesto que $j_{min} > 0$. Con ello,

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \ , \tag{6.58}$$

en pasos de uno en uno. Podemos por tanto completar el sumatorio sobre j en (6.49) y reescribirla como:

$$\begin{aligned} |jm\rangle &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \ , \\ |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^{j} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle |j_1 j_2 j m\rangle \ , \end{aligned} \tag{6.59}$$

donde se ha tenido en cuenta que $m_2 = m - m_1$. Cumpliéndose,

$$\sum |\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm \rangle|^2 = 1 \ , \tag{6.60}$$

tanto al sumar sobre m como sobre m_1.

Relación de recurrencia de los coeficientes de Clebsch-Gordan. Consideremos el estado de m máximo para un cierto j,

$$|jj\rangle = \sum_{m_1} \langle j_1 m_1 j_2 j - m_1 | jj\rangle | j_1 m_1 j_2 j - m_1\rangle \ . \tag{6.61}$$

Dado que $J_+|jj\rangle = 0$ resulta la siguiente condición,

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{m_1} \Big(\langle j_1 m_1 - 1 j_2 j - m_1 + 1 | jj\rangle \sqrt{(j_1 - m_1 + 1)(j_1 + m_1)} \\ &+ \langle j_1 m_1 j_2 j - m_1 | jj\rangle \sqrt{(j_2 - j + m_1)(j_2 + j - m_1 + 1)} \Big) | j_1 m_1 j_2 j - m_1 + 1\rangle \ . \end{aligned} \tag{6.62}$$

Igualando a cero cada uno de los sumandos del término de la derecha,

$$\begin{aligned} &\langle j_1 m_1 - 1 j_2 j - m_1 + 1 | jj\rangle \sqrt{(j_1 - m_1 + 1)(j_1 + m_1)} \\ + &\langle j_1 m_1 j_2 j - m_1 | jj\rangle \sqrt{(j_2 - j + m_1)(j_2 + j - m_1 + 1)} = 0 \ , \end{aligned} \tag{6.63}$$

se obtiene una relación de recurrencia que relaciona el coeficiente de Clebsch-Gordan de m_1 con el de $m_1 - 1$. Aplicando sucesivamente (6.63) se pueden obtener todos los coeficientes de Clebsch-Gordan para el estado $|jj\rangle$ en función del coeficiente de Clebsch-Gordan con m_1 máximo.[#3] Éste último Clebsch-Gordan se determina tal que se cumpla (6.60) sumando sobre m_1 y fijando la fase tal que sea positivo, según nuestro convenio. El resto de coeficientes de Clebsch-Gordan para m menor y el mismo j se obtienen aplicando sucesivamente J_- a $|jj\rangle$.

Disponemos de dos métodos para calcular los coeficientes de Clebsch-Gordan. Uno de ellos basado en la aplicación sucesiva del operador escalera J_- y el otro basado en la relación de recurrencia (6.63).

Propiedades de simetría de los coeficientes de Clebsch-Gordan.

Existen muchos textos dedicados exclusivamente al estudio de las rotaciones y sus representaciones en MC que estudian exhaustivamente las propiedades de los coeficientes de Clebsch-Gordan. Aquí enumeramos algunas de las más importantes y remitimos el lector interesado a [9] para su demostración y un listado muy completo de referencias.

$$\begin{aligned} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3\rangle &= (-1)^{j_1 + j_2 - j_3} \langle j_1 - m_1 j_2 - m_2 | j_3 - m_3\rangle \ , \\ \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3\rangle &= (-1)^{j_1 + j_2 - j_3} \langle j_2 m_2 j_1 m_1 | j_3 m_3\rangle \ , \\ \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3\rangle &= (-1)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{2j_3 + 1}{2j_2 + 1}} \langle j_1 m_1 j_3 - m_3 | j_2 - m_2\rangle \ . \end{aligned} \tag{6.64}$$

De las propiedades anteriores se pueden deducir:

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3\rangle = (-1)^{j_2 + m_2} \sqrt{\frac{2j_3 + 1}{2j_1 + 1}} \langle j_3 - m_3 j_2 m_2 | j_1 - m_1\rangle \ ,$$

[#3]Para hallar dicho valor máximo de m_1, $m_1|_{max}$, téngase en cuenta que $m_1 = j - m_2$ y que el valor mínimo de $m_2 = -j_2$. Así, dado $j + j_2$ se tienen dos opciones: i) $j + j_2 > j_1$ con lo que $m_1|_{max} = j_1$ o ii) $j + j_2 \le j_1$ con lo que $m_1|_{max} = j + j_2$.

$$
\begin{aligned}
\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle &= (-1)^{j_1-m_1}\sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_2+1}}\langle j_3 m_3 j_1 - m_1 | j_2 m_2 \rangle \ , \\
\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle &= (-1)^{j_2+m_2}\sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_1+1}}\langle j_2 - m_2 j_3 m_3 | j_1 m_1 \rangle \ . \qquad (6.65)
\end{aligned}
$$

Simplemente mencionamos los símbolos $3-j$ o coeficientes de Wigner,

$$
\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \ , \qquad (6.66)
$$

que se obtienen considerando la suma simétrica $\vec{J}_1 + \vec{J}_2 + \vec{J}_3 = 0$ en lugar de la antisimétrica $\vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{J}_3$ que hemos tomado como punto de partida para estudiar los coeficientes de Clebsch-Gordan. La relación entre ambos tipos de coeficientes es:

$$
\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}}\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle \qquad (6.67)
$$

Ejemplo. Calculemos los coeficientes de Clebsch-Gordan de la composición de dos espines 1/2. De (6.58) se deduce que,

$$
\frac{1}{2}\otimes\frac{1}{2} = 1 \oplus 0 \ . \qquad (6.68)
$$

Con espín total igual a 1 hay tres estados posibles con $m=-1$, 0 y 1, de ahí que se llame un triplete de espín, mientras que sólo hay un estado con espín nulo que se llama singlete de espín.

Triplete:

$$
\begin{aligned}
|\frac{1}{2}\frac{1}{2}11\rangle &= |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \ , \\
|\frac{1}{2}\frac{1}{2}10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \ , \\
|\frac{1}{2}\frac{1}{2}1-1\rangle &= |\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle \ . \qquad (6.69)
\end{aligned}
$$

Singlete:

$$
|\frac{1}{2}\frac{1}{2}00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \ . \qquad (6.70)
$$

De (6.69) y (6.70) podemos comprobar las relaciones de simetría cuando se intercambian $j_1 \leftrightarrow j_2$ de acuerdo a (6.64). De este modo los estados del triplete son simétricos mientras que los estados del singlete son antisimétricos.

Es interesante recalcar que para todo j_1 y j_2 el estado $|j_1 j_2 (j_1+j_2) - (j_1+j_2)\rangle$ viene dado por $|j_1 - j_1 j_2 - j_2\rangle$. Queda claro que $|j_1 j_2 (j_1+j_2) - (j_1+j_2)\rangle$ sólo puede ser $\pm|j_1 - j_1 j_2 - j_2\rangle$ puesto que es el único estado con $m=-j_1-j_2$ y los coeficientes de Clebsch-Gordan son reales. El que se pueda descartar el signo menos se debe a que $|j_1 j_2 (j_1+j_2) - (j_1+j_2)\rangle$ es proporcional a $(J_-)^{2(j_1+j_2)}|j_1 j_2 (j_1+j_2)(j_1+j_2)\rangle$ con el coeficiente positivo dada la actuación de J_- según (6.43).

6.4. Matrices de rotación

De la expresión (6.20) se tiene que:

$$\mathcal{D}(\alpha,\beta,\gamma)=e^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{-i\beta J_y/\hbar}e^{-i\gamma J_z/\hbar}~. \tag{6.71}$$

Consideremos la actuación de la matriz de rotación anterior sobre el espacio vectorial de los estados con espín definido j y calculemos sus elementos de matriz.

$$\begin{aligned}\langle jm|\mathcal{D}(\alpha,\beta,\gamma)|jm'\rangle &= \mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma)=\langle jm|e^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{-i\beta J_y/\hbar}e^{-i\gamma J_z/\hbar}|jm'\rangle\\ &= e^{-i\alpha m}d^{(j)}_{mm'}(\beta)e^{-i\gamma m'}~,\end{aligned} \tag{6.72}$$

donde

$$d^{(j)}_{mm'}(\beta)=\langle jm|e^{-i\beta J_y/\hbar}|jm'\rangle~, \tag{6.73}$$

es el elemento de matriz de una rotación de ángulo β alrededor del eje y. En las expresiones anteriores hemos introducido el superíndice j para indicar que las rotaciones están actuando sobre el espacio vectorial de estados con momento angular definido e igual a j. Recordemos que el módulo del momento angular no cambia cuando se aplican rotaciones. Por lo tanto, el problema de determinar los elementos de matriz de las matrices de rotación $\mathcal{D}^{(j)}$ queda resuelto una vez deduzcamos los elementos de matriz $d^{(j)}_{mm'}(\beta)$.

Las matrices $\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(\alpha,\beta,\gamma)$ son matrices $(2j+1)\times(2j+1)$ y conectan entre sí los $2j+1$ estados $|jm\rangle$ con $-j\le m\le j$ y constituyen la que se llama representación irreducible $2j+1$ del grupo de rotaciones. El adjetivo de irreducible se refiere sencillamente a que no hay estados con espín j que no se puedan conectar entre sí mediante alguna rotación. Éste no es el caso cuando se componen dos momentos angulares. Por ejemplo, hemos visto en la sección anterior que $1/2\otimes 1/2=1\oplus 0$, de forma que los subespacios triplete y singlete no se conectan bajo la actuación del grupo de rotaciones dado que tienen distintos autovalores de J^2. Por lo tanto, cualquier matriz de rotación $\mathcal{D}(R)$ actuando sobre $1/2\otimes 1/2$ se descompone en forma diagonal a bloques,

$$\mathcal{D}(R)=\left(\begin{array}{c|c}\mathcal{D}^{(1)}(R) & 0\\ \hline 0 & \mathcal{D}^{(0)}(R)\end{array}\right)~. \tag{6.74}$$

Este resultado es genérico. Dado el espacio vectorial producto directo de dos momentos angulares $\mathcal{H}_{j_1}\otimes\mathcal{H}_{j_2}$, ése se puede expresar como la suma directa $\oplus\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\mathcal{H}_j$, que involucra subespacios con distintos autovalores de J^2. Entonces, las matrices de rotación $\mathcal{D}(R)$ se descomponen como,

$$\mathcal{D}(R)=\oplus\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\mathcal{D}^{(j)}(R)~, \tag{6.75}$$

que da lugar a una estructura diagonal a bloques:

$$\mathcal{D}(R)=\left(\begin{array}{cccc}\mathcal{D}^{(j_1+j_2)}(R) & 0 & ... & 0\\ 0 & \mathcal{D}^{(j_1+j_2-1)}(R) & ... & 0\\ 0 & 0 & ... & 0\\ 0 & 0 & ... & \mathcal{D}^{(|j_1-j_2|)}(R)\end{array}\right)~. \tag{6.76}$$

Dado que las rotaciones son transformaciones unitarias y con ello las $\mathcal{D}^{(j)}$, se tiene que:

$$\sum_{m''=-j}^{j} \mathcal{D}^{(j)}_{mm''}(\alpha,\beta,\gamma)\mathcal{D}^{(j)}_{m'm''}(\alpha,\beta,\gamma)^* = \delta_{mm'} \ . \tag{6.77}$$

Por la misma razón,

$$\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(-\gamma,-\beta,-\alpha) = \mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)^* \ , \tag{6.78}$$

ya que

$$\mathcal{D}^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)\mathcal{D}^{(j)}(-\gamma,-\beta,-\alpha) = 1 \ . \tag{6.79}$$

Dado un estado base $|jm\rangle$, éste se transforma bajo una rotación como:

$$\mathcal{D}^{(j)}(R)|jm\rangle = \sum_{m'=-j}^{j} \langle jm'|\mathcal{D}^{(j)}(R)|jm\rangle|jm'\rangle = \sum_{m'=-j}^{j} |jm'\rangle\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R) \ . \tag{6.80}$$

Las componentes de un vector se transforman de forma distinta. De,

$$\mathcal{D}^{(j)}(R)\sum_m C_m|jm\rangle = \sum_{m\,m'} C_m|jm'\rangle\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R) \ , \tag{6.81}$$

se sigue que:

$$C'_m = \sum_{m'=-j}^{j} \mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(R)C_{m'} \ . \tag{6.82}$$

Ejemplo: Matrices de rotación para espín 1/2.

Los generadores para espín 1/2 vienen dados en función de las matrices de Pauli σ_i como,

$$J_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i \ . \tag{6.83}$$

Teniendo en cuenta que las matrices de Pauli[#4] cumplen:

$$\begin{aligned} \{\sigma_i,\sigma_j\} &= 2\delta_{ij} \ , \\ [\sigma_i,\sigma_j] &= \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk}\sigma_k \ , \end{aligned} \tag{6.84}$$

se obtiene que en efecto las J_i dadas en (6.83) verifican las relaciones de conmutación del momento angular (6.15).

[#4]

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ , \ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \ , \ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \ .$$

De (6.72) basta con conocer $d^{(1/2)}(\beta)$ para fijar los elementos de matriz $\mathcal{D}^{(1/2)}_{mm'}(R)$. De las relaciones (6.84) deducimos,

$$e^{-i\beta J_y/\hbar} = e^{-i\beta\sigma_y/2} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-i\frac{\beta}{2}\sigma_y\right)^n , \tag{6.85}$$

separando entre n pares e impares,

$$\begin{aligned} e^{-i\beta J_y/\hbar} &= \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m}{(2m)!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^{2m} - i\frac{\beta}{2}\sigma_y\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m}{(2m+1)!}\left(\frac{\beta}{2}\right)^{2m} \\ &= \cos\beta/2 - i\sigma_y \mathrm{sen}\beta/2 \ . \end{aligned} \tag{6.86}$$

Por lo tanto, teniendo en cuenta (6.72) y el resultado anterior,

$$\mathcal{D}^{(1/2)}(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\mathrm{sen}\beta/2 \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2}\mathrm{sen}\beta/2 & e^{i(\alpha+\gamma)/2}\cos\beta/2 \end{pmatrix} . \tag{6.87}$$

6.4.1. Descomposición del producto de matrices de rotación

Consideremos de nuevo el producto directo de dos espines j_1 y j_2 y tengamos en cuenta el cambio de base entre la base producto directo y la de momento angular total definido dado en (6.59). De este modo podemos escribir $\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}$, con $j = j_1 + j_2$, $j_1 + j_2 - 1$, ..., $|j_1 - j_2|$ como combinación lineal de $\mathcal{D}^{(j_1)}(R)\mathcal{D}^{(j_2)}(R)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(R) &= \langle j_1 j_2 jm|\mathcal{D}(R)|j_1 j_2 jm'\rangle = \sum_{m_1,m_1'}\langle j_1 m_1 j_2 m_2|j_1 j_2 jm\rangle \\ &\times \ \langle j_1 m_1 j_2 m_2|\mathcal{D}^{(j_1)}(R)\mathcal{D}^{(j_2)}(R)|j_1 m_1' j_2 m_2'\rangle\langle j_1 m_1' j_2 m_2'|j_1 j_2 jm'\rangle , \end{aligned} \tag{6.88}$$

donde $m_2 = m - m_1$ y $m_2' = m' - m_1'$. Por lo tanto,

$$\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(R) = \sum_{m_1,m_1'}\langle j_1 m_1 j_2 m_2|jm\rangle\mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(R)\mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(R)\langle j_1 m_1' j_2 m_2'|jm'\rangle . \tag{6.89}$$

Del mismo modo, se puede deducir la relación inversa,

$$D^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(R)D^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(R) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m,m'=-j}^{j}\langle j_1 m_1 j_2 m_2|jm\rangle\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(R)\langle j_1 m_1' j_2 m_2'|jm'\rangle , \tag{6.90}$$

es importante notar que sólo hay una suma sobre el valor del momento angular total j dado que las rotaciones no conectan $\vec{J}^2$ distintos.

La expresión anterior representa de forma explícita la fórmula (6.75) y se conoce como descomposición en coeficientes de Clebsch-Gordan del producto de Kronecker (o directo) de dos representaciones del grupo de rotaciones.

La expresión (6.89) muestra que cualquier matriz de rotación $\mathcal{D}^{(j)}(R)$ se puede obtener a partir de las matrices de rotación de espín 1/2 (6.87) sin más que aplicando reiteradamente $2j$ veces dicha ecuación, puesto que todo momento angular j se puede obtener componiendo $2j$ espines 1/2.

6.4.2. *Relación entre el grupo de rotaciones $SO(3)$ y $SU(2)$

Sea el espacio espinorial compuesto por vectores columna de dos filas,

$$\left(\begin{array}{c} u_1 \\ u_2 \end{array} \right) , \tag{6.91}$$

con u_1, $u_2 \in \mathbb{C}$. Definimos el grupo $SU(2)$ como el conjunto de matrices complejas 2×2 unitarias y unimodulares ($\det U = 1$).

Veamos la forma genérica de una de tales matrices.

$$\begin{aligned} U &= \left(\begin{array}{cc} a & b \\ c & d \end{array} \right) , \\ U^{-1} &= \left(\begin{array}{cc} d & -b \\ -c & a \end{array} \right) = U^\dagger = \left(\begin{array}{cc} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{array} \right) , \end{aligned} \tag{6.92}$$

de donde se deduce que:

$$d = a^* \; , \quad -b = c^* \; , \quad -c = b^* \; . \tag{6.93}$$

Imponiendo además que $\det U = 1$, se sigue que,

$$ad - bc = |a|^2 + |b|^2 = 1 \; . \tag{6.94}$$

Por lo tanto, podemos escribir,

$$U = \left(\begin{array}{cc} a & b \\ -b^* & a^* \end{array} \right) \; , \; |a|^2 + |b|^2 = 1 \; , \tag{6.95}$$

con lo que una matriz $U \in SU(2)$ tiene tres parámetros libres. Se habla de grupo dado que el producto de dos matrices unimodulares unitarias sigue siendo una matriz unitaria y unimodular como se comprueba fácilmente.

Comparando con las matrices de espín 1/2 dadas en (6.87), vemos que éstas son de la forma (6.95) con,

$$\begin{aligned} a &= e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos\beta/2 \; , \\ b &= -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \mathrm{sen}\beta/2 \; , \end{aligned} \tag{6.96}$$

y así a una matriz $\mathcal{D}^{(1/2)}(R)$ le corresponde una matriz $U(a,b) \in SU(2)$. Por lo tanto $\{\mathcal{D}^{(1/2)}(R)\} \subset SU(2)$. Sin embargo, la correspondencia no es biunívoca ya que de (6.96), a las matrices $R(\alpha = 0, \beta = 0, \gamma = 0)$ y $R(\alpha = \pi, \beta = 0, \gamma = \pi)$ les corresponden respectivamente la identidad y menos la identidad de $SU(2)$, de acuerdo a (6.96). Sin embargo, tanto $R(\alpha = 0, \beta = 0, \gamma = 0)$ como $R(\alpha = \pi, \beta, \gamma = \pi)$ corresponden a la rotación identidad. De este modo, a $\mathcal{D}^{(1/2)}(R)$ y a $-\mathcal{D}^{(1/2)}(R)$ les corresponden la misma matriz de rotación. Esto se consigue de las relaciones dadas en (6.96) sin más que pasar $\alpha \to \alpha + 2\pi$ o $\gamma \to \gamma + 2\pi$. Si se realiza la transformación simultáneamente en α y γ se deja invariante (6.96).

De forma más concreta procedamos a hallar α y γ a partir de (6.96) en función de a y b, tenemos:

$$\tan\frac{\alpha+\gamma}{2} = -\frac{\mathrm{Im}a}{\mathrm{Re}a} \; , \; \tan\frac{\alpha-\gamma}{2} = -\frac{\mathrm{Im}b}{\mathrm{Re}b} \; . \tag{6.97}$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \frac{\alpha+\gamma}{2} &= x_1 = \arctan\frac{-\text{Im}a}{\text{Re}a} + n\pi \ , \\ \frac{\alpha-\gamma}{2} &= x_2 = \arctan\frac{-\text{Im}b}{\text{Re}b} + n'\pi \ , \ \text{ con } \arctan\phi \in [0,\pi] \ , \end{aligned} \tag{6.98}$$

donde n y n' son números enteros. Se llega pues a,

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{x_1+x_2}{2} + (n+n')\pi \ , \ \ \alpha \in [0,2\pi[\ . \\ \gamma &= \frac{x_1-x_2}{2} + (n-n')\pi = \frac{x_1-x_2}{2} + (n+n')\pi - 2n'\pi \ , \ \ \gamma \in [0,2\pi[\ . \end{aligned} \tag{6.99}$$

El punto esencial está en que x_1 y x_2 son invariantes si cambiamos de signo independientemente a a y a b, es decir, a $U(a,b)$, $U(-a,b)$, $U(a,-b)$ y $U(-a,-b)$ les corresponden las mismas x_1 y x_2. Sin embargo, a partir de (6.99) sólo generamos dos soluciones de las cuatro posibles, puesto que dados x_1 y x_2 podemos generar dos $\alpha \in [0,2\pi]$ a partir de (6.99) y una γ asociada a cada α. Las otras dos soluciones perdidas difieren de las dos obtenidas por (6.99) en un signo global. Por ejemplo, para $U(a=-i/\sqrt{2}, b=-1/\sqrt{2})$, con α y γ obtenidas de (6.99), sólo se pueden generar $U(\pm a, b)$, con lo que se pierden $U(\pm a,-b)$, esto es, $U(\pm i/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$. El origen del problema radica en la restricción impuesta en el dominio de valores permitidos de α y γ. Basta aumentar este dominio de definición tal que,

$$\alpha \in [0,4\pi[\ \text{ y/o } \ \gamma \in [0,4\pi[\ , \tag{6.100}$$

para generar las cuatro posibles soluciones $U(\pm a, \pm b)$. Obsérvese que de (6.99) ahora hay cuatro valores posibles de α, y por cada valor de α, dos valores de γ (tomando la y en (6.100)). Por supuesto ahora hay soluciones repetidas, aquellas a que tanto a α como a γ se les haya variado simultáneamente módulo 2π. Es por ello que las soluciones son idénticas dos a dos y se generan sólo 4 posibles distintas (a no ser que a o b sean cero, en cuyo caso sólos son dos) y no 8.[#5]

En relación con (6.100), nótese que en $\mathbb{R}^3$ una rotación $R(\alpha,\beta,\gamma)$ y $R(\alpha+2\pi,\beta,\gamma)$ o $R(\alpha,\beta,\gamma+2\pi)$ representan la misma matriz. Sin embargo, esto no ocurre para las matrices $\mathcal{D}^{(1/2)}(R)$ dadas en (6.87), puesto que $\mathcal{D}^{(1/2)}(\alpha+2\pi,\beta,\gamma) = \mathcal{D}^{(1/2)}(\alpha,\beta,\gamma+2\pi) = -\mathcal{D}^{(1/2)}(\alpha,\beta,\gamma)$. Por lo tanto, si $R_1R_2 = R_3$ en general tendremos que en el espacio de espinores el producto de las matrices de rotación de espín 1/2 (6.87), $\mathcal{D}^{(1/2)}(R_1)$ y $\mathcal{D}^{(1/2)}(R_1)$, no será igual a $\mathcal{D}(R_3)$ sino,

$$\mathcal{D}^{(1/2)}(R_1)\cdot\mathcal{D}^{(1/2)}(R_2) = \pm\mathcal{D}^{(1/2)}(R_3) \ . \tag{6.101}$$

Debido a la presencia del signo $\pm$ en la expresión anterior se dice que la representación de espín 1/2 del grupo de rotaciones es bivaluada. Por ejemplo, $\mathcal{D}^{(1/2)}(\pi,0,0)\cdot\mathcal{D}^{(1/2)}(\pi,0,0) = -\mathcal{D}^{(1/2)}(0,0,0)$.

La ley de composición (6.101) no sólo es propia de $j=1/2$ sino de todo espín semientero. La razón se puede ver en la relación (6.89) que permite obtener cualquier matriz de rotación $\mathcal{D}^{(j)}(R)$ como el producto directo de $2j$ matrices de rotación de espín 1/2. Por lo tanto, como para j semientero $2j$ es un número impar, el posible signo menos en (6.101) se mantiene, mientras que para j entero, $2j$ es un par y sólo se tiene el signo más.

[#5] En teoría de grupos la discusión anterior se resume en que $SO(3) = \frac{SU(2)}{Z_2}$, con Z_2 el subgrupo discreto formado por $\pm\mathbb{I}$.

Para j entero aumentar el dominio de acuerdo a (6.100) es superfluo dado que pasar de $\alpha(\gamma)$ a $\alpha(\gamma)+2\pi$ conduce a la misma matriz de rotación, pero no así para j semientero.

Para recuperar la simetría inicial entre los dominios de α y γ, en lo que sigue tomaremos,

$$\alpha \in [0,4\pi]\ ,\ \ \gamma \in [0,4\pi[\ . \tag{6.102}$$

6.5. Armónicos esféricos como matrices de rotación

La ecuación de Schrödinger estacionaria asociada con un potencial central en mecánica ondulatoria da lugar a autofunciones de energía que se determinan mediante el método de separación de variables.

$$\langle \vec{r}|n,\ell m\rangle = \mathcal{R}_{n\ell}(r)Y_\ell^m(\theta,\phi)\ , \tag{6.103}$$

donde $\mathcal{R}_{n\ell}(r)$ es la función de onda radial y los $Y_\ell^m(\theta,\phi)\equiv Y_\ell^m(\hat{n})$ son los armónicos esféricos que dependen de $\cos\theta$ y de ϕ, que fijan la dirección de $\hat{n}$, y corresponden a la parte angular de la autofunción de energía,

$$\begin{aligned}\langle r|n\ell\rangle &= \mathcal{R}_{n\ell}(r)\ ,\\ \langle \hat{r}|\ell m\rangle &= Y_\ell^m(\theta,\phi)\ ,\end{aligned} \tag{6.104}$$

siendo $|\hat{r}\rangle$ el autoestado con variables angulares de posición bien definidas y $|\ell m\rangle$ un autoestado del momento angular orbital,

$$\begin{aligned}\langle \hat{r}|L_z|\ell m\rangle &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}Y_\ell^m(\theta,\phi) = \hbar m Y_\ell^m(\theta,\phi)\ , \qquad (6.105)\\ \langle \hat{r}|L^2|\ell m\rangle &= -\hbar^2\left\{\frac{1}{\text{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\text{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\text{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}Y_\ell^m(\theta,\phi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_\ell^m(\theta,\phi)\ .\end{aligned}$$

Los armónicos esféricos son funciones angulares ortonormales. Esto se puede deducir de:

$$\begin{aligned}\langle \ell' m'|\ell m\rangle &= \delta_{\ell'\ell}\delta_{mm'} = \int_0^{2\pi}d\phi\int_{-1}^{+1}d(\cos\theta)Y_\ell^m(\theta,\phi)Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi)^*\\ &= \int d\Omega\, Y_\ell^m(\theta,\phi)Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi)^*\ ,\end{aligned} \tag{6.106}$$

donde $d\Omega$ es el diferencial de ángulo sólido.

Teniendo en cuenta que,

$$|\hat{n}\rangle = \mathcal{D}(R)|\hat{z}\rangle = \mathcal{D}(\phi,\theta,0)|\hat{z}\rangle\ , \tag{6.107}$$

tal y como se indica en la figura 6.4. Introduciendo la resolución de la identidad

$$\sum_{\ell',m'}|\ell' m'\rangle\langle \ell' m'| = 1\ ,$$

en (6.107), tenemos:

$$|\hat{n}\rangle = \mathcal{D}(\phi,\theta,0)|\hat{z}\rangle = \sum_{\ell'=0}^{\infty}\sum_{m'=-\ell'}^{\ell'}\mathcal{D}(\phi,\theta,0)|\ell' m'\rangle\langle \ell m'|\hat{z}\rangle\ , \tag{6.108}$$

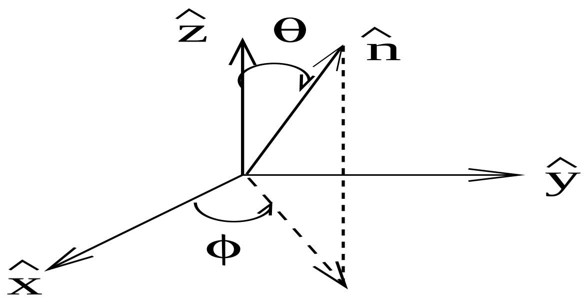

Figura 6.4: Ángulos de Euler para obtener el vector unitario $\hat{n}$ a partir del eje $\hat{z}$ mediante una rotación sobre el eje $\hat{y}$ de ángulo $\beta = \theta$, seguida por una rotación alrededor del eje $\hat{z}$ de ángulo $\alpha = \phi$.

por lo tanto,

$$\langle \ell m | \hat{n} \rangle = Y_\ell^m(\theta,\phi)^* = \sum_{\ell',m'} \langle \ell m | \mathcal{D}(\phi,\theta,0) | \ell' m' \rangle \langle \ell' m' | \hat{z} \rangle \ . \tag{6.109}$$

Teniendo en cuenta que el valor de L^2 no se modifica como consecuencia de una rotación,

$$\langle \ell m | \mathcal{D}(\phi,\theta,0) | \ell' m' \rangle = \delta_{\ell\,\ell'} \mathcal{D}^{(\ell)}_{mm'}(\phi,\theta,0) \ , \tag{6.110}$$

y que de la misma definición de armónicos esféricos [12], se sigue que:

$$\langle \ell' m' | \hat{z} \rangle = Y_{\ell'}^{m'}(0,\phi) = Y_{\ell'}^0(0)\delta_{m'0} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\delta_{m'0} \ . \tag{6.111}$$

Introduciendo (6.110) y (6.111) en (6.109), se obtiene como consecuencia la siguiente expresión de relación entre armónicos esféricos y matrices de rotación,

$$\langle \ell m | \hat{n} \rangle = Y_\ell^m(\theta,\phi)^* = \langle \ell m | \mathcal{D}(\phi,\theta,0) | \ell 0 \rangle \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} = \mathcal{D}^{(\ell)}_{m0}(\phi,\theta,0)\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \ . \tag{6.112}$$

Por lo tanto llegamos a las relaciones,

$$\begin{aligned} Y_\ell^m(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \mathcal{D}^{(\ell)}_{m0}(\phi,\theta,0)^* \ , \\ \mathcal{D}^{(\ell)}_{m0}(\phi,\theta,0) &= \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_\ell^m(\theta,\phi)^* \ . \end{aligned} \tag{6.113}$$

De forma que obtenemos una expresión para las matrices de rotación con j entero y uno de sus subíndices iguales a cero en función de los armónicos esféricos.

Particularizando para $\phi = 0$ tenemos,

$$\begin{aligned} d^{(\ell)}_{m0} &= \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_\ell^m(\theta,0)^* \ , \\ d^{(\ell)}_{00}(\theta) &= \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_\ell^0(\theta,0) = P_\ell(\cos\theta) \ . \end{aligned} \tag{6.114}$$

6.6. *Modelo oscilatorio de Schwinger para el momento angular

Introduzcamos dos osciladores armónicos simples desacoplados, con sus correspondientes operadores de creación y destrucción,

$$[a_+, a_+^\dagger] = 1 \quad [a_-, a_-^\dagger] = 1 \ , \ [a_+, a_-] = [a_+, a_-^\dagger] = 0 \ , \tag{6.115}$$

donde los subíndices $\pm$ distinguen entre los dos osciladores armónicos. Los operadores número de ambos osciladores se definen como,

$$N_+ = a_+^\dagger a_+ \ , \ \ N_- = a_-^\dagger a_- \ , \tag{6.116}$$

que como consecuencia de (6.115) cumplen las siguientes reglas de conmutación:

$$\begin{array}{l} [N_+, N_-] = 0 \\ [N_+, a_+] = -a_+ \quad [N_-, a_-] = -a_- \ , \\ \left[N_+, a_+^\dagger\right] = a_+^\dagger \quad \left[N_-, a_-^\dagger\right] = a_-^\dagger \ . \end{array} \tag{6.117}$$

Sean $|n_+, n_-\rangle$ los autoestados de los operadores número,

$$\begin{aligned} N_+|n_+, n_-\rangle &= n_+|n_+, n_-\rangle \ , \\ N_-|n_-, n_-\rangle &= n_-|n_+, n_-\rangle \ . \end{aligned} \tag{6.118}$$

Dado que los autovalores de N_+ y N_- sólo pueden ser positivos se sigue que debe existir un estado $|0,0\rangle$ tal que $a_-|0,0\rangle = a_+|0,0\rangle = 0$ puesto que de lo contrario aplicando a_+ o a_- sobre un autoestado $|n_+, n_-\rangle$ un número suficientemente grande de veces se obtendría un autovalor negativo, dado que:

$$\begin{aligned} a_+|n_+, n_-\rangle &= \sqrt{n_+}|n_+ - 1, n_-\rangle \ , \\ a_-|n_+, n_-\rangle &= \sqrt{n_-}|n_+, n_- - 1\rangle \ , \\ a_+^\dagger|n_+, n_-\rangle &= \sqrt{n_+ + 1}|n_+ + 1, n_-\rangle \ , \\ a_-^\dagger|n_+, n_-\rangle &= \sqrt{n_- + 1}|n_+, n_- + 1\rangle \ . \end{aligned} \tag{6.119}$$

Las expresiones anteriores se deducen teniendo en cuenta las relaciones de conmutación (6.117) y que,

$$\langle a_+^\dagger n_+ | a_+^\dagger n_+\rangle = \langle n_+|a_+ a_+^\dagger|n_+\rangle = \langle n_+|a_+^\dagger a_+ + [a_+, a_+^\dagger]|n_+\rangle = n_+ + 1 \ , \tag{6.120}$$

y análogamente para $a_-^\dagger$. El mismo tipo de razonamiento se puede emplear para deducir la actuación de los operadores destrucción $a_\pm$. En las expresiones (6.119) se ha elegido la fase de los estados tal que delante de las raíces cuadradas se tenga $+1$. Este procedimiento es muy similar al empleado en (6.42) y (6.43) para determinar la actuación de los operadores escalera $J_\pm$.

De (6.119) se llega a la siguiente expresión para los autoestados $|n_+, n_-\rangle$,

$$|n_+, n_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_+! n_-!}} (a_+^\dagger)^{n_+} (a_-^\dagger)^{n_-} |0,0\rangle \ . \tag{6.121}$$

Obtención del álgebra del momento angular.
El conjunto de operadores,

$$\begin{aligned} J_+ &= \hbar a_+^\dagger a_- \ , \\ J_- &= \hbar a_-^\dagger a_+ \ , \\ J_z &= \frac{\hbar}{2}\left(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-\right) = \frac{\hbar}{2}(N_+ - N_-) \ , \end{aligned} \tag{6.122}$$

satisfacen las relaciones de conmutación (6.29) de los operadores momento angular dado que:

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \ , \tag{6.123}$$
$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \ , \tag{6.124}$$

como se deduce directamente de las relaciones de conmutación (6.115) y (6.117). Por ejemplo,

$$[J_z, J_+] = \frac{\hbar^2}{2}\left[N_+ - N_-, a_+^\dagger a_-\right] = \frac{\hbar^2}{2} a_+^\dagger a_- + \frac{\hbar^2}{2} a_+^\dagger a_- = \hbar J_+ \ . \tag{6.125}$$

Introduciendo el operador número total,

$$N = N_+ + N_- \ , \tag{6.126}$$

se tiene que:

$$\vec{J}^{\,2} = J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) = \frac{\hbar^2}{2} N(\frac{N}{2} + 1) \ . \tag{6.127}$$

De la definición de J_z en (6.122) se sigue que podemos interpretar que cada cuanto del oscilador $+$ corresponde a una unidad fundamental de momento angular $\hbar/2$ y que cada cuanto del oscilador $-$ corresponde a $-\hbar/2$ de tales unidades. De este modo, J_+ destruye una unidad o cuanto de espín abajo $(-\hbar/2)$ y crea una unidad de espín arriba $(+\hbar/2)$. En total crea $+\hbar$ unidades de momento angular. De la misma forma J_- destruye $-\hbar$ unidades de momento angular.

De hecho, si a partir de sus definiciones (6.122) calculemos la actuación de J_+, J_- y J_z sobre los estados $|n_+, n_-\rangle$,

$$\begin{aligned} J_+|n_+, n_-\rangle &= \hbar a_+^\dagger a_- |n_+, n_-,\rangle = \hbar\sqrt{n_-(n_+ + 1)}|n_+ + 1, n_- - 1\rangle \ , \\ J_-|n_+, n_-\rangle &= \hbar\sqrt{n_+(n_- + 1)}|n_+ - 1, n_- + 1\rangle \ , \\ J_z|n_+, n_-\rangle &= \frac{\hbar}{2}(n_+ - n_-)|n_+, n_-\rangle \ . \end{aligned} \tag{6.128}$$

Comparando las igualdades anteriores con (6.39), (6.42) y (6.43), y realizando las identificaciones,

$$\begin{aligned} n_+ &\to j + m \ , \\ n_- &\to j - m \ , \\ |n_+, n_-\rangle &\to |jm\rangle \end{aligned} \tag{6.129}$$

obtenemos de (6.128) exactamente (6.39), (6.42) y (6.43). De (6.127) podemos calcular los autovalores de J^2 y comprobar que en efecto éstos son $\hbar^2 j(j+1)$. En efecto,

$$J^2|jm\rangle = \frac{\hbar^2}{2}(n_+ + n_-)(n_+ + n_- + 1)|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle \ . \tag{6.130}$$

Por lo tanto de (6.121), se deduce que:

$$|jm\rangle = \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}(a_+^\dagger)^{j+m}(a_-^\dagger)^{j-m}|0,0\rangle \ . \tag{6.131}$$

En definitiva, hemos caracterizado cada estado $|jm\rangle$ como compuesto de n_+ unidades básicas de espín arriba $+\hbar/2$ y n_- unidades básicas de espín $-\hbar/2$, únicamente desde el punto de vista de sus propiedades de transformación. Esta imagen de los estados de momento angular definido se conoce como modelo oscilatorio de Schwinger.

6.6.1. *Fórmula explícita para las matrices de rotación

Tomemos desde un principio que $\alpha=\gamma=0$ puesto que para obtener las matrices de rotación el único aspecto no trivial es la obtención de los elementos de matriz $d^{(j)}_{mm'}(\beta)$.

El estado $|jm\rangle$ (6.131) se transforma bajo una rotación $\mathcal{D}(0,\beta,0)$ como:

$$\mathcal{D}(0,\beta,0)|jm\rangle = \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\Big(\mathcal{D}(R)a_+^\dagger\mathcal{D}^\dagger(R)\Big)^{j+m}\Big((\mathcal{D}(R)a_-^\dagger\mathcal{D}^\dagger(R)\Big)^{j-m}\mathcal{D}(R)|0,0\rangle \ , \tag{6.132}$$

ya que $\mathcal{D}\,(a^\dagger)^{j+m}\,\mathcal{D}^\dagger = (\mathcal{D}\,a_+^\dagger\mathcal{D}^\dagger)^{j+m}$ y análogamente para $\mathcal{D}\,(a_-^\dagger)^{j-m}\mathcal{D}^\dagger$. Por otra parte, dado que el estado $|0,0\rangle$ tiene $j=0$ es invariante bajo rotaciones, y por tanto

$$\mathcal{D}(R)|0,0\rangle = |0,0\rangle \ . \tag{6.133}$$

Tomemos una rotación infinitesimal (6.23) bajo la cual a_+ se transforma según,

$$a_+^\dagger \to a_+^\dagger - i\delta\beta\,\frac{[J_y,a_+^\dagger]}{\hbar} = a_+ + \frac{\delta\beta}{2}a_-^\dagger \ , \tag{6.134}$$

teniendo en cuenta las expresiones dadas en (6.122). Vemos que $a_+^\dagger$ se transforma como la componente primera de un espinor de acuerdo a (6.87). Del mismo modo podemos estudiar la transformación de $a_-^\dagger$,

$$a_-^\dagger \to a_-^\dagger - \frac{\delta\beta}{2}a_+^\dagger \ , \tag{6.135}$$

y lo hace como la componente segunda de un espinor. Por lo tanto podemos agrupar a_+ y a_-, en cuanto a sus propiedades de transformación bajo el grupo de rotaciones se refiere, como un espinor $(a_+\ ,\ a_-)^T$ que se transforma de acuerdo a la representación $j=1/2$. De hecho, podemos ver del mismo modo que esta analogía no sólo es válida para transformaciones bajo rotaciones alrededor del eje y sino para cualquier otra rotación. Así teniendo en cuenta (6.86) tenemos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(0,\beta,0)a_+^\dagger\mathcal{D}^\dagger(0,\beta,0) &= a_+^\dagger\cos\beta/2 + a_-^\dagger\mathrm{sen}\beta/2 \ ,\\
\mathcal{D}(0,\beta,0)a_-^\dagger\mathcal{D}^\dagger(0,\beta,0) &= a_-^\dagger\cos\beta/2 - a_+^\dagger\mathrm{sen}\beta/2 \ .
\end{aligned} \tag{6.136}$$

Por lo tanto, podemos reescribir (6.132) como,

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(0,\beta,0)|jm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\left(a_+^\dagger\cos\frac{\beta}{2}+a_-^\dagger\mathrm{sen}\frac{\beta}{2}\right)^{j+m} \\ &\times \left(a_-^\dagger\cos\frac{\beta}{2}-a_+^\dagger\mathrm{sen}\frac{\beta}{2}\right)^{j-m}|0,0\rangle~. \end{aligned}\tag{6.137}$$

Como los operadores $a_+^\dagger$ y $a_-^\dagger$ conmutan podemos aplicar la regla de binomio de Newton para desarrollar los términos entre paréntesis,

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(0,\beta,0)|jm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\sum_{k,l=0}\begin{pmatrix} j+m \\ k\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j-m \\ l\end{pmatrix}\left[a_+^\dagger\cos\frac{\beta}{2}\right]^{j+m-k}\left[a_-^\dagger\mathrm{sen}\frac{\beta}{2}\right]^{k} \\ &\times \left[-a_+^\dagger\mathrm{sen}\frac{\beta}{2}\right]^{j-m-l}\left[a_-^\dagger\cos\frac{\beta}{2}\right]^{l}|0,0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\sum_{k,l=0}\begin{pmatrix} j+m \\ k\end{pmatrix}\begin{pmatrix} j-m \\ l\end{pmatrix}\left(a_+^\dagger\right)^{2j-k-l}\left(a_-^\dagger\right)^{l+k}|0,0\rangle \\ &\times \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{j+m-k+l}\left(\mathrm{sen}\frac{\beta}{2}\right)^{j+k-l}(-1)^{j-m-\ell}~. \end{aligned}\tag{6.138}$$

En las sumas anteriores el límite superior para k y l es tal que los factoriales no sean negativos. Hemos de comparar la expresión anterior con la definición de las matrices $d_{mm'}^{(j)}(\beta)$, tal que:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^{(j)}(0,\beta,0)|jm\rangle &= \sum_{m'} d_{mm'}^{(j)}(\beta)|jm'\rangle \\ &= \sum_{m'} d_{mm'}^{(j)}(\beta)\frac{1}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}}\left(a_+^\dagger\right)^{j+m'}\left(a_-^\dagger\right)^{j-m'}|0,0\rangle~. \end{aligned}\tag{6.139}$$

Comparando las potencias de $a_+^\dagger$ y $a_-^\dagger$ en las expresiones (6.138) y (6.139) se tiene que:

$$\begin{aligned}2j-k-l &= j+m' \\ j-m' &= k+l~, \end{aligned}\tag{6.140}$$

y de ambas igualdades se sigue que $l=j-m'-k$, de modo que sustituimos la suma sobre l en (6.138) por una suma sobre m' y así (6.137) queda:

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\sum_{k=0}\sum_{m'=-j}^{j}\frac{(j+m)!}{k!(j+m-k)!}\frac{(j-m)!\sqrt{(j+m')(j-m')!}}{(j-m-k)!(m'+k-m)!} \\ \times &\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'}\left(\mathrm{sen}\frac{\beta}{2}\right)^{m'-m+2k}(-1)^{m'+k-m}\frac{(a_+^\dagger)^{j+m'}(a_-^\dagger)^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}}|0,0\rangle~. \end{aligned}\tag{6.141}$$

Por lo tanto la identificación es directa con (6.139) y tenemos:

$$\begin{aligned}
d^{(j)}_{m'm}(\beta) &= \sum_{k=0}(-1)^{k+m-m'}\frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!k!(j-k-m)!(k-m+m')}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'}\\
&\times\left(\operatorname{sen}\frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'} , \qquad (6.142)
\end{aligned}$$

con la suma sobre k tal que los factoriales se refieren a números mayores o iguales a cero. Esta expresión explícita para las $d^{(j)}_{mm'}(\beta)$ pone de manifiesto que son reales. Este hecho se puede demostrar haciendo uso de argumentos más genéricos dado que todo momento angular j se puede obtener mediante la combinación de $2j$ espines $1/2$ y con ello las matrices de rotación. Como las σ_y son puramente imaginarias, las $d^{1/2}(\beta)$ son puramente reales y con ello el resultado de aplicar sucesivamente (6.89) y por tanto $d^{(j)}(\beta)$.

6.7. *Integrales con matrices de rotación

De (6.72) tenemos la expresión

$$\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=e^{-im'\alpha}d^{(j)}_{m'm}(\beta)e^{-im\gamma} , \qquad (6.143)$$

para los elementos de matriz de las matrices de rotación. Dada la posibilidad de representaciones multivaluadas, es decir que se tiene en general (6.101), a la hora de integrar (6.143) lo haremos con α, $\gamma\in[0,4\pi[$, de acuerdo a (6.102), y $\beta\in[0,\pi]$. Vamos a demostrar que:

$$\int_0^{4\pi}\frac{d\alpha}{4\pi}\int_0^{4\pi}\frac{d\gamma}{4\pi}\int_0^{\pi}\frac{d\cos\beta}{2}\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=\delta_{m'0}\delta_{m0}\delta_{j0} . \qquad (6.144)$$

De (6.143) el resultado de las integrales sobre α y γ es evidente, aunque notemos que para j semientero es necesario que en efecto el dominio de integración se aumente hasta 4π para α y γ.

Para demostrar el resultado para la integración sobre $\cos\beta$ tomaremos $m'=m=0$ puesto que en caso contrario la integral sobre α y γ da cero como hemos visto. Para j entero se puede aplicar (6.114) con lo que la integración en β es simplemente la integral de $P_\ell(\cos\beta)$ con $P_0(\cos\beta)=1$ y, dado que los polinomios de Legendre son ortogonales, se sigue que dicha integración sólo será distinta de cero para $\ell=0$ valiendo uno en este caso. Para j semientero (6.144) se puede demostrar haciendo uso de (6.142),

$$d^{(j)}_{00}(\beta)=\sum_{k=0}^{j}(-1)^k\frac{(j!)^2}{[(j-k)!]^2(k!)^2}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2(j-k)}\left(\operatorname{sen}\frac{\beta}{2}\right)^{2k} . \qquad (6.145)$$

Introduciendo el cambio de variable $x=\beta/2$, tenemos

$$\int_0^{\pi}d\beta\operatorname{sen}\beta\, d^{(j)}_{00}(\beta) = \sum_{k=0}^{j}4(-1)^k\frac{(j!)^2}{[(j-k)!]^2(k!)^2}\int_0^{\pi/2}dx(\cos x)^{2j-2k+1}(\operatorname{sen}x)^{2k+1}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{k=0}^{j} 2(-1)^k \frac{(j!)^2}{[(j-k)!]^2 (k!)^2} \frac{\Gamma(j-k+1)\Gamma(k+1)}{\Gamma(j+2)} \\
&= \sum_{k=0}^{j} 2(-1)^k \frac{j!}{(j+1)(j-k)!k!} = \frac{2}{j+1}\sum_{k=0}^{j}(1-1)^j = 0 \;, \qquad (6.146)
\end{aligned}
$$

como queríamos demostrar. Por supuesto que esta demostración es también válida para j entero.

Probemos a continuación la relación de ortogonalidad entres dos matrices de rotación. Para simplificar la notación, designamos por

$$
dR = \frac{1}{2}\text{sen}\beta\, d\beta \frac{d\alpha}{4\pi}\frac{d\gamma}{4\pi} \;, \qquad (6.147)
$$

y veamos que:

$$
\int dR\, \mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(R)^* \mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(R) = \frac{\delta_{j_1,j_2}\delta_{m_1,m_2}\delta_{m_1',m_2'}}{2j_1+1} \;. \qquad (6.148)
$$

Para ello, evaluemos primero la integral,

$$
\int dR\, \mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(R) \mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(R) = \sum_j \int dR\, \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle \mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(R) \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | jm'\rangle \;. \qquad (6.149)
$$

Haciendo uso de (6.144) tenemos por lo tanto:

$$
\begin{aligned}
\int dR\, \mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(R) \mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(R) &= \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle \delta_{j0}\delta_{m0}\delta_{m'0} \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | jm'\rangle \\
&= \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | 00\rangle \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | 00\rangle \;. \qquad (6.150)
\end{aligned}
$$

Como los momentos angulares j_1 y j_2 están acoplados al momento angular total $j=0$ se sigue que $j_1 = j_2$, en caso contrario (6.150) se anula. Así para $j_1 = j_2$, dado que,

$$
\langle j_1 m_1 j_1 - m_1 | 00\rangle = (2j_1+1)^{-1/2}(-1)^{j_1 - m_1} \;, \qquad (6.151)
$$

como se obtiene fácilmente de las relaciones de recurrencia de (6.63), se sigue que,

$$
\int dR\, \mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1 m_1'}(R) \mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2 m_2'}(R) = \frac{\delta_{j_1 j_2}\delta_{m_1 - m_2}\delta_{m_1' - m_2'}(-1)^{m_1 - m_1'}}{2j_1+1} \;. \qquad (6.152)
$$

Para obtener (6.148) demostremos a continuación la siguiente propiedad de las matrices de rotación:

$$
\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(R)^* = (-1)^{m-m'}\mathcal{D}^{(j)}_{-m-m'}(R) \;. \qquad (6.153)
$$

Teniendo en cuenta (6.143) y que las $d^{(j)}(\beta)$ son reales, se tiene:

$$
\mathcal{D}^{(j_1)}_{mm'}(R)^* = e^{im\gamma}e^{im'\alpha}d^{(j)}_{mm'}(\beta). \qquad (6.154)
$$

Veamos que,

$$
d^{(j)}_{mm'}(\beta) = (-1)^{m-m'}d^{(j)}_{-m-m'}(\beta) \;. \qquad (6.155)
$$

Fijémonos que,

$$|jm\rangle \propto e^{-iJ_y\pi/\hbar}|j-m\rangle \ , \tag{6.156}$$

puesto que una rotación de 180^o alrededor del eje y pasa el operador J_z a $-J_z$. Sin embargo, el estado $|j(j-m)\rangle$ fue definido en la sección (6.2) como resultado de aplicar J_- sucesivamente m veces sobre $|jj\rangle$ y, por lo tanto, su fase ya está fijada. Para determinar la fase presente en (6.156) hagamos uso de nuevo del hecho de que todo estado con momento angular j se puede construir componiendo $2j$ espines 1/2. En particular, el estado con $m=j$ sólo involucrará estados $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$ que de (6.87) vemos que se transforman a $+|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle$ bajo una rotación $\mathcal{D}(0,\pi,0)$. Por el contrario, $|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle$ se transforma a $-|\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\rangle$ debido a $\mathcal{D}(0,\pi,0)$. Conforme j_z vaya siendo menor en pasos de $\hbar$ tendremos un signo menos debido a la aparición de un estado más $|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle$ en la composición de $|jm-1\rangle$ respecto a $|jm\rangle$. Por lo tanto, en general tenemos,

$$e^{-iJ_y\pi/\hbar}|jm\rangle = (-1)^{j-m}|j-m\rangle \ . \tag{6.157}$$

Teniendo en cuenta este resultado se sigue automáticamente (6.155) puesto que:

$$\begin{aligned} d^{(j)}_{-m-m'}(\beta) &= \langle j-m|e^{-iJ_y\pi/\hbar}|j-m'\rangle = (-1)^{m-m'}\langle jm|e^{iJ_y\pi/\hbar}e^{-iJ_y\pi/\hbar}e^{-iJ_y\pi/\hbar}|jm'\rangle \\ &= (-1)^{m-m'}d^{(j)}_{mm'}(\beta) \ , \end{aligned} \tag{6.158}$$

ya que las rotaciones sobre un mismo eje conmutan.

Finalmente, de los resultados (6.154), (6.155) se sigue (6.153). Combinando dicho resultado con (6.152) tenemos (6.148).

Otra integral que se deduce directamente de (6.148) y de la descomposición del producto directo de dos matrices de rotación en (6.90) es:

$$\int dR\,\mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1m_1'}(R)^*\mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2m_2'}(R)\mathcal{D}^{(j_3)}_{m_3m_3'}(R) \ . \tag{6.159}$$

Descomponiendo según (6.90) el producto directo $\mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2m_2'}(R)\mathcal{D}^{(j_3)}_{m_3m_3'}(R)$ y teniendo en cuenta (6.148) se obtiene,

$$\int dR\,\mathcal{D}^{(j_1)}_{m_1m_1'}(R)^*\mathcal{D}^{(j_2)}_{m_2m_2'}(R)\mathcal{D}^{(j_3)}_{m_3m_3'}(R) = \frac{\langle j_2m_2j_3m_3|j_1m_1\rangle\langle j_2m_2'j_3m_3'|j_1m_1'\rangle}{2j_1+1} \ . \tag{6.160}$$

La frecuente integral de tres armónicos esféricos se deduce directamente de (6.160) sin más que tener en cuenta la expresión (6.113) que expresa los armónicos esféricos en función de las matrices de rotación. El resultado es:

$$\int d\Omega Y^{m_1}_{\ell_1}(\Omega)^*Y^{m_2}_{\ell_2}(\Omega)Y^{m_3}_{\ell_3}(\Omega) = \sqrt{\frac{(2\ell_2+1)(2\ell_3+1)}{4\pi(2\ell_1+1)}}\langle\ell_2m_2\ell_3m_3|\ell_1m_1\rangle\langle\ell_20\ell_30|\ell_10\rangle \ . \tag{6.161}$$

Notemos que en la expresión anterior estamos integrando sobre el elemento de ángulo sólido $d\Omega = d\cos\beta\, d\alpha d\gamma$ con $0\leq\beta\leq\pi$, $0\leq\alpha,\gamma<2\pi$. Existe una expresión explícita para $\langle\ell_10\ell_20|\ell_30\rangle$

[9]:

$$
\begin{aligned}
\langle \ell_1 0 \ell_2 0 | \ell_3 0 \rangle &= 0 \ , \ \ell_1+\ell_2+\ell_3 \ \text{impar} \ , \\
\langle \ell_1 0 \ell_2 0 | \ell_3 0 \rangle &= (-1)^{\ell_1+L} \frac{L!\sqrt{2\ell_1+1}}{(L-\ell_1)!(L-\ell_2)!(L-\ell_3)!} \\
&\times \sqrt{\frac{(\ell_1+\ell_2-\ell_3)!(\ell_2+\ell_3-\ell_1)!(\ell_3+\ell_1-\ell_2)!}{(\ell_1+\ell_2+\ell_3+1)!}} \ ,
\end{aligned}
\tag{6.162}
$$

para $\ell_1+\ell_2+\ell_3$ par y $2L=\ell_1+\ell_2+\ell_3$.

6.8. Operadores tensoriales

Tensor Cartesiano.

Un tensor cartesiano de rango n es un conjunto de operadores $T_{i_1 i_2 \ldots i_n}$, con $i_m \in \{1,2,3\}$, que bajo una rotación se transforman como:

$$
\mathcal{D}^\dagger(R) T_{i_1 i_2 \ldots i_n} \mathcal{D}(R) = \sum_{j_1,j_2,\ldots,j_n=1}^{3} R_{i_1 j_1} R_{i_2 j_2} \ldots R_{i_n j_n} T_{j_1 j_2 \ldots j_n} \ . \tag{6.163}
$$

Como ejemplo de tensores cartesianos de rango 1 tenemos x_i o p_i, a partir de los cuales podemos construir tensores de rango superior sin más que multiplicar las componentes dando estructuras del tipo $x_{i_1} \ldots p_{i_m} \ldots x_{i_n} \ldots$. Veamos que efectivamente x_i se transforma de acuerdo a (6.163) con $n=1$. Bajo una rotación $\vec{x} \to \mathcal{D}(R)\,\vec{x}\mathcal{D}(R)^\dagger$:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{D}(R)\,\vec{x}\mathcal{D}(R)^\dagger &= \int d^3x'\, \vec{x}\,'\, \mathcal{D}(R) |\vec{x}\,'\rangle\langle \vec{x}\,'| \mathcal{D}^\dagger(R) = \int d^3x'\, \vec{x}\,'\, |R(\vec{x}\,')\rangle\langle R(\vec{x}\,')| \\
&= \int d^3x'\, R^{-1}(\vec{x}\,') |\vec{x}\,'\rangle\langle \vec{x}\,'| \ ,
\end{aligned}
\tag{6.164}
$$

en componentes se desprende que:

$$
\mathcal{D}(R) x_i \mathcal{D}^\dagger(R) = \sum_{j=1}^{3} R^{-1}_{ij} x_j \ , \tag{6.165}
$$

por lo tanto, si en lugar de considerar la rotación R, tenemos en cuenta la rotación R^{-1} se llega a la ley de transformación (6.163). La misma demostración se aplicaría para p_i. Por supuesto si consideramos el producto de varias componentes de $\vec{x}$ o de $\vec{p}$ tendremos un tensor cartesiano de rango superior.

Tensores irreducibles de rango s.

Un tensor irreducible de rango s es un conjunto de $2s+1$ operadores $\mathcal{O}_x^{(s)}$ que bajo una rotación se transforman como,

$$
\mathcal{D}(R) \mathcal{O}_x^{(s)} \mathcal{D}^\dagger(R) = \sum_{y=-s}^{s} \mathcal{D}^{(s)}_{yx}(R) \mathcal{O}_y^{(s)} \ . \tag{6.166}
$$

El término de la izquierda corresponde a la forma genérica (2.60) de transformación de un operador bajo una transformación unitaria. Por otro lado, es muy importante darse cuenta de que el término de la derecha es completamente análogo a la transformación de un autoestado de momento angular $|sx\rangle$ teniendo en cuenta (6.80). Así desde el punto de vista de transformación bajo una rotación podemos hacer la identificación

$$\mathcal{O}_x^{(s)} \leftrightarrow |sx\rangle \ . \tag{6.167}$$

De hecho el estado $\mathcal{O}_x^{(s)}|jm\rangle$ se transforma igual que el producto directo de estados $|sx\rangle|jm\rangle$. Por si queda alguna duda,

$$\mathcal{D}(R)\mathcal{O}_x^{(s)}|jm\rangle = \left(\mathcal{D}(R)\mathcal{O}_x^{(s)}\mathcal{D}^\dagger(R)\right)(\mathcal{D}(R)|jm\rangle) = \sum_{m',y}\mathcal{D}_{yx}^{(s)}(R)\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}\mathcal{O}_y^{(s)}|jm'\rangle \ . \tag{6.168}$$

Ejemplo. Veamos que los armónicos esféricos $Y_\ell^m(\hat{n})$ son tensores irreducibles de rango ℓ. Recordemos que:

$$\langle\hat{n}|\ell m\rangle = Y_\ell^m(\hat{n}) \ , \tag{6.169}$$

y bajo una rotación:

$$\langle\hat{n}|\mathcal{D}(R)|\ell m\rangle = \sum_{m'=-\ell}^{\ell}\mathcal{D}_{m'm}^{(\ell)}(R)Y_\ell^{m'}(\hat{n}) = \langle\mathcal{D}^\dagger(R)\hat{n}|\ell m\rangle = Y_\ell^m(R^{-1}(\hat{n})) \ . \tag{6.170}$$

Haciendo uso de la representación espectral de Y_ℓ^m, su transformado viene dado por:

$$\mathcal{D}(R)Y_\ell^m\mathcal{D}^\dagger(R) = \int d\Omega\, Y_\ell^m(\hat{n})|\hat{n}\,'\rangle\langle\hat{n}'| = \int d\Omega\, Y_\ell^m(R^{-1}(\hat{n}))|\hat{n}\rangle\langle\hat{n}| \ . \tag{6.171}$$

Teniendo en cuenta (6.170) se sigue por tanto que:

$$\mathcal{D}(R)Y_\ell^m(\hat{n})\mathcal{D}^\dagger(R) = Y_\ell^m(R^{-1}(\hat{n})) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell}\mathcal{D}_{m'm}^{(\ell)}Y_\ell^{m'}(\hat{n}) \ , \tag{6.172}$$

y en efecto Y_ℓ^m es un tensor irreducible de rango ℓ.

Establecemos a continuación una caracterización infinitesimal de los tensores irreducibles de rango s. Para ello apliquemos (6.166) a una transformación infinitesimal y a primer orden en $\delta\phi$,

$$\left(1 - i\delta\phi\frac{\vec{J}\hat{n}}{\hbar}\right)\mathcal{O}_x^{(s)}\left(1 + i\delta\phi\frac{\vec{J}\hat{n}}{\hbar}\right) = \mathcal{O}_x^{(s)} - i\sum_{y=-s}^{s}\delta\phi\frac{\vec{J}_{yx}\hat{n}}{\hbar}\mathcal{O}_y^{(s)} \ , \tag{6.173}$$

de donde se deduce:

$$\left[J_i, \mathcal{O}_x^{(s)}\right] = \sum_{y=-s}^{s}(J_i)_{yx}\mathcal{O}_y^{(s)} \ . \tag{6.174}$$

Estas relaciones de conmutación se pueden tomar también como definición alternativa de un tensor irreducible de rango s puesto que caracterizan cómo éstos se transforman bajo una rotación infinitesimal, a partir de las cuales de hecho se puede construir cualquier rotación finita, ver (6.14).

Teorema. Dados dos tensores irreducibles $X^{(k_1)}$ y $Z^{(k_2)}$ de rango k_1 y k_2 respectivamente. Entonces los $2k+1$ operadores:

$$T_q^{(k)} = \sum_{q_1} \langle k_1 q_1 k_2 q_2 | k q\rangle \, X_{q_1}^{(k_1)} Z_{q-q_1}^{(k_2)} \ , \tag{6.175}$$

$q = k, k-1, ..., -k$ constituyen un tensor irreducible de rango k.

La demostración es directa si tenemos en cuenta la analogía ya establecida entre operadores irreducibles y autoestados de momento angular en cuanto a sus propiedades de transformación bajo rotaciones. De este modo (6.175) se interpreta como la composición de los autoestados de momento angular $|k_1 q_1\rangle$ y $|k_2 q_2\rangle$ para dar lugar al autoestado de momento angular total $|kq\rangle$, que finalmente corresponde a $T_q^{(k)}$ en virtud de la analogía (6.167).

Como ejercicio se deja al lector comprobar explícitamente que (6.175) verifica (6.166).

6.8.1. Teorema de Wigner-Eckart.

Sean $|j'm', \beta\rangle$ y $|jm, \alpha\rangle$ dos autoestados de momento angular total j' y j, respectivamente. Los números cuánticos indicados globalmente por α y β, no cambian en una rotación. Por ejemplo, podrían referirse a propiedades intrínsecas del sistema como la masa de la partícula, su carga, su espín, también, según casos, a su energía, etc. Entonces el teorema de Wigner-Eckart establece que dado un tensor irreducible de rango s se tiene que:

$$\langle j'm', \beta | \mathcal{O}_\ell^{(s)} | jm, \alpha\rangle = \langle s\ell jm | j'm'\rangle \langle j', \beta || O^{(s)} || j, \alpha\rangle \ , \tag{6.176}$$

y $\langle j', \beta || O^{(s)} || j, \alpha\rangle$ se denomina elemento de matriz irreducible.

Para su demostración haremos uso de nuevo de la analogía (6.167), de modo que:

$$\mathcal{O}_\ell^{(s)} | jm, \alpha\rangle = \sum_{j''} \langle s\ell jm | j'' m+\ell\rangle | j'' m+\ell, j, \mathcal{O}^{(s)}, \alpha\rangle \ , \tag{6.177}$$

donde los símbolos α, j y $\mathcal{O}^{(s)}$ nos indican el origen del estado con momento angular total definido j''. Por lo tanto,

$$\langle j'm', \beta | \mathcal{O}_\ell^{(s)} | jm, \alpha\rangle = \sum_{j''} \langle s\ell jm | j'' m+\ell\rangle \langle j'm', \beta | j'' m+\ell, j, \mathcal{O}^{(s)}, \alpha\rangle \ . \tag{6.178}$$

Dado que autoestados de momento angular con distintos autovalores son ortogonales,

$$\langle j'm', \beta | j'' m+\ell, j, \mathcal{O}^{(s)}, \alpha\rangle = \delta_{j'j''} \delta_{m'\, m+\ell} \, f(j', j, \beta, \alpha, \mathcal{O}^{(s)}) \ . \tag{6.179}$$

Por otra parte, dado que al ser un producto escalar es invariante bajo rotaciones es por lo que los argumentos de f no incluyen ni m ni m'. Designando,

$$f(j', j, \beta, \alpha, \mathcal{O}^{(s)}) = \langle j', \beta || \mathcal{O}^{(s)} || j, \alpha\rangle \ , \tag{6.180}$$

e insertando (6.179) en (6.178) llegamos a:

$$
\begin{aligned}
\langle j'm',\beta|\mathcal{O}_\ell^{(s)}|jm,\alpha\rangle &= \sum_{j''}\delta_{j'j''}\delta_{m'\,m+\ell}\langle j',\beta||\mathcal{O}^{(s)}||j,\alpha\rangle\langle s\ell jm|j''m+\ell\rangle \\
&= \langle s\ell jm|j'm'\rangle\langle j',\beta||O^{(s)}||j,\alpha\rangle \ . \qquad (6.181)
\end{aligned}
$$

Ejemplo. Como aplicación del teorema de Wigner-Eckart (6.176), calculemos el elemento de matriz $\langle\frac{1}{2}\frac{1}{2},\alpha|x|\frac{1}{2}-\frac{1}{2},\beta\rangle$ suponiendo conocido $\langle\frac{1}{2}\frac{1}{2},\alpha|z|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\beta\rangle = A$.

Para ello hemos de construir los tensores irreducibles de rango uno asociados con el operador cartesiano de posición $\vec{x}$. Teniendo en cuenta que los armónicos esféricos son tensores irreducibles de rango 1 como vimos en (6.172), y de las expresiones de $Y_1^1(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\text{sen}\theta\, e^{i\phi}$, $Y_1^{-1}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\text{sen}\theta\, e^{-i\phi}$ y $Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$, se sigue que los operadores,

$$
\begin{aligned}
z &= \frac{r}{\sqrt{3/4\pi}}Y_1^0 \ , \\
x_+ &= \frac{r}{\sqrt{3/4\pi}}Y_1^{+1} \ , \\
x_- &= \frac{r}{\sqrt{3/4\pi}}Y_1^{-1} \ , \qquad (6.182)
\end{aligned}
$$

son tensores esféricos de rango 1. Además teniendo en cuenta las expresiones explícitas anteriores para los armónicos esféricos se sigue que,

$$
\begin{aligned}
x &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x_+ - x_-) \ , \\
y &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x_+ + x_-) \ . \qquad (6.183)
\end{aligned}
$$

Considerando el teorema de Wigner-Eckart tenemos,

$$
\begin{aligned}
\langle\frac{1}{2}\frac{1}{2},\alpha|z|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\beta\rangle &= \langle 10\frac{1}{2}\frac{1}{2}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle\langle\frac{1}{2},\alpha||r||\frac{1}{2},\beta\rangle \ , \\
\langle\frac{1}{2}\frac{1}{2},\alpha|x_-|\frac{1}{2}-\frac{1}{2},\beta\rangle &= \langle 1-1\frac{1}{2}-\frac{1}{2}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle\langle\frac{1}{2},\alpha||r||\frac{1}{2},\beta\rangle = 0 \ , \\
\langle\frac{1}{2}\frac{1}{2},\alpha|x_+|\frac{1}{2}-\frac{1}{2},\beta\rangle &= \langle 11\frac{1}{2}-\frac{1}{2}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle\langle\frac{1}{2},\alpha||r||\frac{1}{2},\beta\rangle \ . \qquad (6.184)
\end{aligned}
$$

De la primera igualdad podemos despejar $\langle\frac{1}{2},\alpha||r||\frac{1}{2},\beta\rangle$,

$$
\langle\frac{1}{2},\alpha||r||\frac{1}{2},\beta\rangle = \frac{A}{\langle 10\frac{1}{2}\frac{1}{2}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle} = \frac{A}{-\sqrt{1/3}} \ . \qquad (6.185)
$$

Por lo tanto,

$$
\langle\frac{1}{2}\frac{1}{2},\alpha|x_+|\frac{1}{2}-\frac{1}{2},\beta\rangle = -\sqrt{2}A \ , \qquad (6.186)
$$

y de (6.183) tenemos el resultado buscado,

$$
\langle\frac{1}{2}\frac{1}{2},\alpha|x|\frac{1}{2}-\frac{1}{2},\beta\rangle = A \ . \qquad (6.187)
$$

6.9. *Estados de helicidad

Supongamos una partícula libre de espín intrínseco $\vec{s}$ y momento angular orbital $\vec{\ell}$. El momento angular total es $\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{s}$ y de (6.59) los autoestados de momento angular total vienen dados por:

$$|p, jj_z\ell s\rangle = \sum_m \langle \ell m s s_z | j j_z\rangle |p, \ell m s s_z\rangle \ . \tag{6.188}$$

Así los estados $|p, jj_z\ell s\rangle$ se caracterizan por tener los números cuánticos j^2, j_z, ℓ^2 y s^2 bien definidos, junto con p que da la energía de una partícula libre, $p^2/2m$. Dado que el valor del espín s^2 es una propiedad intrínseca de la partícula, como lo es por ejemplo su masa, en lo que sigue omitiremos este número cuántico.

Consideremos ahora la construcción de estados con <u>helicidad</u> (λ) bien definida. La helicidad se define como la proyección del espín intrínseco en la dirección del momento $\vec{p}$,

$$\lambda = \hat{p}\cdot\vec{s} \ , \tag{6.189}$$

Por lo tanto, los autovalores de la helicidad son los mismos que s_z, s, $s-1$,...,$-s$. Como $[\vec{\ell}^{\,2}, \hat{p}] \neq 0$, los estados con helicidad bien definida no podrán ser autoestados de ℓ^2. Por otro lado, λ conmuta con s^2 y $\vec{p}$ dado que $[s_i, p_j] = 0$. Designando,

$$\vec{p} = p\hat{n} \ , \tag{6.190}$$

los autoestados que queremos construir los indicaremos por $|p\hat{n}, \lambda\rangle$.

Según las propiedades de transformación del momento lineal bajo rotaciones y dado que λ es un escalar, podemos identificar,

$$|p\hat{n}, \lambda\rangle = \mathcal{D}(\phi, \theta, 0)|p\hat{z}, \lambda\rangle = e^{-i\phi J_z/\hbar} e^{-i\theta J_y/\hbar} |p\hat{z}, \lambda\rangle \ , \tag{6.191}$$

con el convenio de que $\phi = 0$ para $\theta = 0$, π. Los ángulos ϕ y θ son las coordenadas esféricas de $\hat{n}$. Hemos tomado también por convenio $\gamma = 0$, aunque cualquier otra elección hubiese implicado un cambio de fase global en el estado.

Notemos que $|p\hat{z}, \lambda\rangle$ tiene también $j_z = \lambda$ puesto que para este caso el momento está orientado según el eje $\hat{z}$. Podemos, por lo tanto, expresarlo como serie de autoestados con j definido y $j_z = \hbar\lambda$:

$$|p\hat{z}, \lambda\rangle = \sum_{j=|\lambda|}^{\infty} |p, j\lambda, \lambda\rangle\langle p, j\lambda, \lambda|p\hat{z}, \lambda\rangle \ . \tag{6.192}$$

De este resultado podemos reescribir (6.191) como:

$$|p\hat{n}, \lambda\rangle = \sum_{j=|\lambda|}^{\infty} \sum_{m'=-j}^{j} |p, jm', \lambda\rangle \mathcal{D}^{(j)}_{m'\lambda}(\hat{n}) \langle p, j\lambda, \lambda|p\hat{z}, \lambda\rangle \ . \tag{6.193}$$

Si particularizamos (6.193) para partículas sin espín nos queda:

$$|p\hat{n}\rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m'=-\ell}^{\ell} |p, \ell m'\rangle \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} \langle p\ell|p\hat{z}\rangle Y_\ell^{m'}(\hat{n})^* \ , \tag{6.194}$$

teniendo en cuenta la relación entre las matrices de rotación y los armónicos esféricos (6.113). El resultado anterior nos expresa el estado de una partícula sin espín con momento bien definido como superposición de estados con momento angular orbital bien definido. La distribución angular de cada uno de los últimos viene dada por el conjugado del correspondiente armónico esférico.

Haciendo uso de la relación de ortogonalidad entre matrices de rotación (6.148) podemos invertir (6.193). Esta relación de ortogonalidad hay que matizarla para nuestro caso particular puesto que la matriz de rotación en (6.193) no depende de γ, que ha sido fijado a cero. Con lo cual la integral sobre γ en (6.148) se transforma en,

$$\int_0^{4\pi} \frac{d\gamma}{4\pi} = 1 \ , \tag{6.195}$$

y la obviamos. Por otra parte, como en nuestro caso ambas j son o bien semienteras o enteras simultáneamente, puesto que provienen de componer los mismos momentos angulares $\vec{\ell}+\vec{s}$, no hace falta en (6.148) integrar de 0 a 4π sino que es suficiente hacerlo de 0 a 2π, puesto que $m_1 - m_2$ siempre es un número entero. Por lo tanto, en nuestro caso tenemos,

$$\int_0^{4\pi} \frac{d\alpha}{4\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{2} \mathrm{sen}\beta d\beta \, \mathcal{D}^{(j)}_{m\lambda}(\hat{n}) \mathcal{D}^{(j')}_{m'\lambda}(\hat{n})^* = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \mathrm{sen}\beta d\beta \, \mathcal{D}^{(j)}_{m\lambda}(\hat{n}) \mathcal{D}^{(j')}_{m'\lambda}(\hat{n})^* \ , \tag{6.196}$$

y resulta,

$$\int d\hat{n} \, \mathcal{D}^{(j)}_{m\lambda}(\hat{n}) \mathcal{D}^{(j')}_{m'\lambda}(\hat{n})^* = \frac{4\pi}{2j+1} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \ . \tag{6.197}$$

Teniendo en cuenta este resultado, multiplicando por $\mathcal{D}^{(j)}_{m'\lambda}(\hat{n})^*$ a (6.193) e integrando sobre ángulo sólido llegamos a:

$$\begin{aligned} |p, jm, \lambda\rangle &= N \int d\hat{n} \, \mathcal{D}^{(j)}_{m\lambda}(\hat{n})^* \, |p\hat{n}, \lambda\rangle \ , \\ N &= \frac{2j+1}{4\pi} \frac{1}{\langle p, j\lambda, \lambda | p\hat{z}, \lambda\rangle} \ . \end{aligned} \tag{6.198}$$

En estas relaciones se expresan por tanto estados $|p, jm, \lambda\rangle$ con momento angular total bien definido en función de estados con momento lineal $\vec{p}$ bien definido, $|p\hat{n}, \lambda\rangle$. Fijémonos que como la helicidad es un escalar e independiente bajo rotaciones, los estados $|p, jm, \lambda\rangle$ tienen también helicidad definida aunque no dirección definida de momento lineal. El coeficiente N lo podemos fijar, salvo una fase que se reabsorbe en la definición de $|p, jm, \lambda\rangle$, a partir de la normalización,

$$\langle p, jm, \lambda | p', j'm', \lambda'\rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{\lambda\lambda'} \frac{1}{p^2} \delta(p - p') \ . \tag{6.199}$$

Por otra parte los estados $|p\hat{n}, \lambda\rangle$ satisfacen:

$$\langle p\hat{n}, \lambda | p'\hat{n}', \lambda'\rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}\,') \delta_{\lambda\lambda'} \ . \tag{6.200}$$

Calculando (6.199) a partir de (6.198) y teniendo en cuenta (6.200), tenemos:

$$\begin{aligned} \langle p'\hat{n}'\lambda' | p\hat{n}\lambda\rangle &= |N|^2 \int d\hat{n} \, d\hat{n}' \, \mathcal{D}^{(j')}_{m'\lambda'}(\hat{n}') \mathcal{D}^{(j)}_{m\lambda}(\hat{n})^* \, \delta_{\lambda'\lambda} \delta(\vec{p} - \vec{p}\,') \\ &= |N|^2 \delta_{\lambda\lambda'} \frac{\delta(p - p')}{p^2} \frac{4\pi \delta_{m'm} \delta_{j'j}}{2j+1} \ , \end{aligned} \tag{6.201}$$

donde hemos hecho uso de la relación de ortogonalidad entre matrices de rotación (6.197). De la relación anterior (6.201) se deduce que:

$$N = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \;, \tag{6.202}$$

eligiendo la fase en N tal que sea real y positivo. Entonces reescribimos (6.198) como:

$$|p, jm, \lambda\rangle = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \int d\hat{n}\, \mathcal{D}^{(j)}_{m\lambda}(\hat{n})^* \, |p\hat{n}, \lambda\rangle \;, \tag{6.203}$$

que es una relación entre estados de helicidad bien definida y momento angular total o momento lineal también bien definidos. Del valor anterior de N y de (6.198) deducimos el valor de los coeficientes $\langle p, j\lambda | p\hat{z}, \lambda\rangle$:

$$\langle p, j\lambda, \lambda | p\hat{z}, \lambda\rangle = N = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \;. \tag{6.204}$$

Teniendo en cuenta (6.193) y (6.202) se sigue que:

$$|p\hat{n}, \lambda\rangle = \sum_{j=|\lambda|}^{\infty} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \sum_{m=-j}^{j} |p, jm, \lambda\rangle \, \mathcal{D}^{(j)}_{m\lambda}(\hat{n}) \;. \tag{6.205}$$

Del desarrollo anterior es evidente que,

$$\langle p', jm, \lambda' | p\hat{n}, \lambda\rangle = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \frac{\delta(p-p')}{p^2} \delta_{\lambda'\lambda} \, \mathcal{D}^{(j)}_{m\lambda}(\hat{n}) \;. \tag{6.206}$$

Conocido el coeficiente $\langle p, j\lambda, \lambda | p\hat{z}, \lambda\rangle$ de (6.204) lo insertamos en (6.194) y completamos el desarrollo de una onda plana en estados de momento angular orbital bien definido para partículas sin espín,

$$|p\hat{n}\rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m'=-\ell}^{\ell} Y_\ell^{m'}(\hat{n})^* \, |p, \ell m'\rangle \;. \tag{6.207}$$

Capítulo 7

Paridad

7.1. Paridad o inversión espacial

En $\mathbb{R}^3$ dado un vector $\vec{r}$ la operación de paridad P se define como,

$$P(\vec{r}) = \vec{r}\,' = -\vec{r}\ . \tag{7.1}$$

Con lo que el operador de paridad en $\mathbb{R}^3$ corresponde a la matriz:

$$P = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\ ,\ \ \det P = -1\ . \tag{7.2}$$

Consideremos a continuación el operador paridad definido en un espacio de Hilbert genérico. Dicho operador debe satisfacer,

$$\begin{aligned} P\vec{x}P^{-1} &= -\vec{x}\ , \\ P\vec{p}P^{-1} &= -\vec{p}\ , \end{aligned} \tag{7.3}$$

con $\vec{x}$ y $\vec{p}$ los operadores de posición y momento, respectivamente.

Como consecuencia del teorema de Wigner (2.5) sabemos que P ha de ser o un operador unitario o antiunitario. Además, puesto que P no depende de ningún parámetro continuo no podemos concluir que se trate de un operador unitario como en el caso de traslaciones espacio-temporales, transformaciones de Galileo y rotaciones, ya vistos en temas anteriores. Para fijar esta ambigüedad calculemos las relaciones de conmutación de los operadores transformados por paridad de posición y momento lineal. Teniendo en cuenta las propiedades de transformación en (7.3) tenemos:

$$P[x_i, p_j]P^{-1} = [x_i, p_j] = P(i\hbar\delta_{ij})P^{-1}\ . \tag{7.4}$$

De este modo si P fuese antiunitario llegaríamos al resultado contradictorio,

$$P[x_i, p_j]P^{-1} = [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} = Pi\hbar\delta_{ij}P^{-1} = -i\hbar\delta_{ij}\ . \tag{7.5}$$

Sólo para el caso en que P sea unitario no se llega a contradicción.

Otro argumento más intuitivo para concluir que P debe ser un operador unitario es considerar un sistema aislado que evoluciona temporalmente mediante un Hamiltoniano invariante bajo paridad. Para nuestros propósitos es suficiente considerar por ejemplo el Hamiltoniano de una partícula libre.[#1] Dada la invarianza bajo paridad de las ecuaciones de movimiento tenemos,

$$\begin{aligned} U(t)P &= PU(t) \; , \\ e^{-iHt/\hbar}P &= Pe^{-iHt/\hbar} \; , \end{aligned} \tag{7.6}$$

donde se ha tenido en cuenta (3.12). Considerando un desplazamiento temporal infinitesimal se llega a que si P es unitario,

$$[H,P]=0 \; , \tag{7.7}$$

mientras que si es antiunitario,

$$\{H,P\}=0 \; . \tag{7.8}$$

Sea $|E'\rangle$ un autoestado con energía E bien definida y sea $P|E'\rangle$ su transformado bajo paridad.

$$H(P|E'\rangle)=\pm PH|E'\rangle=\pm E'(P|E'\rangle) \; , \tag{7.9}$$

en virtud de (7.7) y (7.8). Por lo tanto, si P fuese antiunitario el espectro de energía no estaría acotado inferiormente. Concluimos así que P debe ser unitario.

Al actuar dos veces consecutivas el operador paridad en $\mathbb{R}^3$ se vuelve al vector inicial dado que $P^2=\mathbb{I}$ de (7.2). En el espacio de Hilbert de los estados físicos en general podremos tener que $P^2=\epsilon_P\cdot\mathbb{I}$, con $\mathbb{I}$ el operador identidad y ϵ_P un número complejo de módulo unidad. No obstante, puesto que P es unitario, siempre podemos definir el nuevo operador $P/\epsilon_P^{1/2}$, tal que:

$$P^2=\mathbb{I} \; . \tag{7.10}$$

Además, dado el carácter unitario de P se tiene, por tanto, que $P=P^\dagger=P^{-1}$. Como consecuencia de esta relación se sigue a su vez que los autovalores de P sólo pueden ser ± 1 puesto que $P^2=\mathbb{I}$.

Veamos la transformación bajo paridad de los autoestados de posición. Dado que $P|\vec{x}\,'\rangle$ es un autoestado del operador de posición $\vec{x}$ con autovalor $-\vec{x}\,'$ debido a (7.3), se tendrá que,

$$P|\vec{x}\rangle=\eta_{\vec{x}}|-\vec{x}\rangle \; , \tag{7.11}$$

siendo $\eta_{\vec{x}}$ un número complejo de norma unidad. Vamos a demostrar a partir de la definición de $|\vec{x}\,'\rangle$ dada en (4.29), que de hecho $\eta_{\vec{x}}=\pm 1$ independientemente de $\vec{x}$,

$$P|\vec{x}\,'\rangle=Pe^{-i\vec{p}\vec{x}\,'/\hbar}|0_X\rangle=Pe^{-i\vec{p}\vec{x}\,'/\hbar}P^{-1}P|0_X\rangle=e^{i\vec{p}\vec{x}\,'/\hbar}\eta|0_X\rangle=\eta|-\vec{x}\,'\rangle \; . \tag{7.12}$$

Por lo tanto, el factor $\eta_{\vec{x}}$ es en efecto independiente de posición e igual a η. De hecho $\eta=\pm 1$ dado que el estado $|0_X\rangle$ es un autoestado de paridad.

Es trivial comprobar que aun cuando $\eta=\pm 1$ sea un número complejo de módulo unidad, no se puede reabsorber mediante una redefinición de la fase de $|0_X\rangle$. En efecto, si designamos por

$$\begin{aligned} |0_X\rangle' &= e^{i\gamma}|0_X\rangle \; , \\ P|0_X\rangle' &= Pe^{i\gamma}|0_X\rangle=\eta|0_X\rangle' \; , \end{aligned} \tag{7.13}$$

[#1] Todas las interacciones excepto las débiles, responsables de ciertos procesos de desintegración nuclear y subnuclear, conservan paridad.

y, por lo tanto, η se mantiene y tiene significado físico.

Consideremos a continuación la transformación de autoestados de momento lineal, veamos que,

$$P|\vec{p}\,'\rangle = \eta|-\vec{p}\,'\rangle \ . \tag{7.14}$$

Para ello consideremos la base de posiciones donde ya se ha fijado la actuación de P (7.12),

$$P|\vec{p}\,'\rangle = P\int d^3x'|\vec{x}\,'\rangle(2\pi\hbar)^{-3/2}e^{i\vec{p}\,'\vec{x}\,'/\hbar} = \int d^3x'\eta|\vec{x}\,'\rangle(2\pi\hbar)^{-3/2}e^{-i\vec{p}\,'\vec{x}\,'/\hbar} = \eta|-\vec{p}\,'\rangle \ . \tag{7.15}$$

Es importante recalcar que η es el mismo número complejo de módulo unidad que en (7.12) y se denomina <u>paridad intrínseca</u>, puesto que es una característica propia de la partícula en cuestión del mismo modo que su masa, su carga, su espín, etc.

Dado que la transformada de una rotación $R_n(\phi)$ por paridad es la misma rotación, tenemos:

$$Pe^{-i\vec{J}\hat{n}\phi/\hbar}P^{-1} = e^{-i\vec{J}\hat{n}\phi/\hbar} \ , \tag{7.16}$$

con lo que se sigue,

$$P\vec{J}P^{-1} = \vec{J} \ , \ \ [P,\vec{J}] = 0 \ . \tag{7.17}$$

Como caso particular de (7.17) consideremos el momento angular orbital $\vec{\ell} = \vec{r}\times\vec{p}$. Teniendo en cuenta las propiedades bajo transformación por paridad dadas en (7.3) se tiene que,

$$P\vec{\ell}P^{-1} = \vec{\ell} \ , \tag{7.18}$$

como en (7.17).

Si generalizamos la ley de transformación de los estados (7.15) teniendo en cuenta la presencia de espín, del hecho de que $[P,\vec{J}]=0$ se sigue que,

$$P|\vec{p},sm\rangle = \eta_m|-\vec{p},sm\rangle \ , \tag{7.19}$$

puesto que el estado $P|\vec{p},sm\rangle$ es autoestado de la tercera componente de espín con el mismo autovalor. Vamos a demostrar a continuación que de hecho η_m no depende de m. Para ello combinemos la actuación de los operadores escalera (6.42) y (6.43) con el operador de paridad,

$$\begin{aligned} PJ_+|\vec{p}\,',sm\rangle &= \hbar\sqrt{(s-m)(s+m+1)}\eta_{m+1}|-\vec{p}\,',sm+1\rangle \\ &= \eta_m\hbar\sqrt{(s-m)(s+m+1)}|-\vec{p}\,',sm+1\rangle \ , \end{aligned} \tag{7.20}$$

donde en la primera línea primero hemos hecho actuar J_+ y después P, y luego al revés en la segunda. Por lo tanto, se concluye que,

$$\eta_m = \eta_{m+1} \equiv \eta \ , \tag{7.21}$$

es decir, η sólo puede depender de las propiedades intrínsecas de la partícula, entre ellas s.

A continuación analizamos la transformación de los autoestados de momento angular orbital definido $|\ell m\rangle$,

$$\langle\hat{r}|P|\ell m\rangle = \eta\langle-\hat{r}|\ell m\rangle = \eta Y_\ell^m(-\hat{r}) = \eta(-1)^\ell Y_\ell^m(\hat{r}) \ , \tag{7.22}$$

y, por lo tanto, los estados $|\ell m\rangle$ son autoestados de paridad con autovalor

$$(-1)^\ell \eta \ , \tag{7.23}$$

es decir, junto a las propiedades intrínsecas de la partícula que fijan η, debido al movimiento orbital espacial de la misma ésta adquiere adicionalmente el factor $(-1)^\ell$. Por lo tanto, para ℓ pares dicho factor es uno, mientras que para ℓ impares el factor es -1. Matemáticamente, dicho factor es simplemente una consecuencia de las propiedades de los armónicos esféricos bajo paridad que han sido utilizadas para deducir (7.22).

Fijada la paridad intrínseca de una partícula podemos fijar la de otras partículas haciendo uso de de (7.22) y de invarianza bajo inversión espacial. Por ejemplo, la partícula $\rho(770)$ se desintegra en dos piones π,

$$\rho \to \pi\pi \ . \tag{7.24}$$

Experimentalmente se determina que en el sistema en reposo de la ρ, los piones tienen un movimiento angular orbital correspondiente a $\ell = 1$, por lo tanto su paridad es,

$$\eta_\rho = \eta_\pi^2 (-1)^1 = -1 \ , \tag{7.25}$$

y se concluye que $\eta_\rho = -1$. Dado que el espín intrínseco de la ρ es 1, se dice que es una partícula vectorial. Si su paridad intrínseca fuese opuesta, $+1$, se diría que sería una partícula axial, como de hecho también las hay.

También se puede determinar experimentalmente la paridad intrínseca del pion a partir de la desintegración,

$$\pi^0 \to \gamma\gamma \ . \tag{7.26}$$

Los fotones en el sistema de referencia en reposo del π^0 tienen una distribución espacial que de nuevo corresponde exclusivamente a $\ell = 1$ y por lo tanto

$$\eta_{\pi^0} = \eta_\gamma^2 (-1)^{-1} = -1 \ . \tag{7.27}$$

Existe un resultado en teoría cuántica de campos que afirma que las paridades intrínsecas de un fermión y su antifermión correspondiente son opuestas, mientras que son las mismas para el caso de bosón y antibosón.[#2] Este resultado lo podemos deducir admitiendo que una partícula y una antipartícula pueden crearse a partir del vacío, administrándose la suficiente energía. Si este es el caso, el par partícula/antipartícula deben poder tener los mismos números cuánticos que el vacío. De este modo, para dar lugar a un sistema espacialmente con simetría esférica, como debe tener el vacío, se requiere que el momento angular orbital del sistema sea $\ell = 0$. Con ello, el espín total $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_1$, también debe ser nulo, dado que el vacío tiene momento angular total nulo. Así bajo paridad, la función de onda, $\phi^{(p)}(\vec{r})\phi^{(ap)}(-\vec{r})|S = 0, s_1^{(p)} s_1^{(ap)}\rangle$, donde los superíndices indican partícula/antipartícula, respectivamente, se transforma en $\eta\eta'\phi^{(p)}(-\vec{r})\phi^{(ap)}(\vec{r})|0, s_1^{(p)} s_1^{(ap)}\rangle$, siendo η y η' las paridades intrínsecas de la partícula y la antipartícula, en orden. Si a continuación, intercambiamos la partícula con la antipartícula, tenemos,

$$\eta\eta'\phi^{(ap)}(-\vec{r})\phi^{(p)}(\vec{r})|0, s_1^{(ap)} s_1^{(p)}\rangle = (-1)^{2s_1}\eta\eta'\phi^{(ap)}(-\vec{r})\phi^{(p)}(\vec{r})|0, s_1^{(p)} s_1^{(ap)}\rangle \ , \tag{7.28}$$

[#2]Recordemos que una partícula y su antipartícula tienen la misma masa y espín, difiriendo en el signo de las cargas, por ejemplo el de la carga eléctrica.

con lo que la función de onda resultante es proporcional a la original. En el último paso hemos empleado las propiedades de simetría de los coeficientes de Clebsch-Gordan dadas en (6.64). Como la función de onda del vacío es invariante bajo las operaciones realizadas, se tiene que $(-1)^{2s_1}\eta\eta' = +1$, y en efecto las paridades intrínsecas de fermión/antifermión son opuestas mientras que aquellas de bosón/antibosón son las mismas.

7.2. *Reflexión en un plano

Sea el plano yz, entonces la reflexión en dicho plano, que designamos por π_{yz}, implica la transformación:

$$\begin{aligned} x &\rightarrow -x \ , \\ y &\rightarrow y \ , \\ z &\rightarrow z \ , \end{aligned} \tag{7.29}$$

por lo tanto $\det\pi_{yz} = -1$. Esta transformación corresponde a lo que se observaría en un espejo plano situado en el plano yz. Análogamente podemos definir las reflexiones en los planos xy y xz, π_{xy} y π_{xz}, respectivamente. Para fijar ideas sigamos con π_{yz}. Al igual que para P tenemos la leyes de transformación:

$$\begin{aligned} \pi_{yz}|xyz\rangle &= \eta_{yz}|-xyz\rangle \ , \\ \pi_{yz}|p_x p_y p_z\rangle &= \eta_{yz}|-p_x p_y p_z\rangle \ , \end{aligned} \tag{7.30}$$

donde el subíndice yz en η indica que se trata de la reflexión en el plano yz. Al igual que para P se puede ver que el número complejo de módulo unidad, η_{yz}, no depende de punto, es decir, es una constante. Análogamente tendríamos para π_{xy} y π_{xz}.

Sin embargo, a diferencia de P, el operador de reflexión en un plano π no conmuta con todas las componentes del operador de momento angular. Ello es obvio si consideramos el momento angular orbital $\ell_i = \sum_{j,k}\epsilon_{ijk}x_j p_k$. A nivel general las relaciones de conmutación de π con las componentes del momento angular se pueden deducir teniendo en cuenta que las rotaciones y π no conmutan en $\mathbb{R}^3$. De este modo tenemos,

$$\begin{aligned} \pi_{xy}R_z\pi_{xy}^{-1} = R_z \quad &\rightarrow \quad \pi_{xy}J_z\pi_{xy}^{-1} = J_z \ , \\ \pi_{xy}R_x\pi_{xy}^{-1} = R_x^{-1} \quad &\rightarrow \quad \pi_{xy}J_x\pi_{xy}^{-1} = -J_x \ , \\ \pi_{xy}R_y\pi_{xy}^{-1} = R_y^{-1} \quad &\rightarrow \quad \pi_{xy}J_y\pi_{xy}^{-1} = -J_y \ . \end{aligned} \tag{7.31}$$

Relaciones análogas se pueden deducir para π_{xz}, π_{yz} donde sólo J_2 y J_1, respectivamente, permanecen inalteradas.

Sigamos con π_{xy}. Puesto que ahora π_{xy} no conmuta con todas las componentes del momento angular, hemos de esperar que η_{xy} dependa de la componente de espín m. Determinemos esta dependencia. Aplicando el operador escalera J_+,

$$\pi_{xy}(S_x + iS_y)|sm\rangle = \hbar\sqrt{(s-m)(s+m+1)}\eta_{m+1}|sm+1\rangle \ . \tag{7.32}$$

Teniendo en cuenta (7.31),

$$\pi_{xy}(S_x+iS_y)|sm\rangle = -(S_x+iS_y)\pi_{xy}|sm\rangle = -\eta_m\hbar\sqrt{(s-m)(s+m+1)}|sm+1\rangle \ . \quad (7.33)$$

Comparando (7.32) y (7.33) se deduce que,

$$\eta_{m+1} = -\eta_m \ , \quad (7.34)$$

siendo una solución

$$\eta_m = \eta_{xy}(-1)^{s-m} \ , \quad (7.35)$$

donde el factor $(-1)^{s-m}$ es debido exclusivamente al espín de la partícula. Para partículas sin espín volvemos a tener sólo el factor η_{xy}.

Para el caso de partículas de espín 1/2, es directo comprobar que (7.35) se cumple si tomamos,

$$\pi_{xy} = \eta_{xy}\sigma_z \ . \quad (7.36)$$

Una vez hemos fijado la actuación de π_{xy} podemos hacer uso de invarianza bajo rotaciones y definir, en términos de dicha reflexión, la reflexión sobre cualquier otro plano. De este modo, los distintos números η se expresan en función únicamente de η_{xy}. Por ejemplo, si queremos determinar π_{yz}, puesto que el plano yz se obtiene al aplicar una rotación de 90^0 sobre el eje y al plano xy, tendremos:

$$\pi_{yz} = R_y(\frac{\pi}{2})\pi_{xy}R_y^{-1}(\frac{\pi}{2}) \ . \quad (7.37)$$

Del mismo modo para π_{xz},

$$\pi_{xz} = R_x^{-1}(\frac{\pi}{2})\pi_{xy}R_x(\frac{\pi}{2}) \ , \quad (7.38)$$

puesto que una rotación $R_x^{-1}(\pi/2)$ lleva al eje z al eje y. Así, todo queda fijado en función de operadores ya determinados y no entran en juego nuevos parámetros asociados a η_{yz} y η_{xz}.

Particularizando de nuevo para partículas de espín 1/2, a partir de (7.36), (7.37) y (7.38) llegamos a que:

$$\pi_{yz} = \eta_{xy}\sigma_x \ , \quad \pi_{xz} = \eta_{xz}\sigma_y \ . \quad (7.39)$$

En un principio podríamos imponer que $\pi^2 = 1$, al igual que en paridad. No obstante no lo vamos a hacer para no restringir el dominio posible de valores de η_{xy} simplemente a ± 1. Si lo hiciésemos así perderíamos relaciones sencillas con el operador de paridad ya introducido. De hecho fijaremos η_{xy} de forma que tengamos que:

$$P = \pi_{yz}\pi_{xz}\pi_{xy} \ . \quad (7.40)$$

Para espín 1/2,

$$\pi_{yz}\pi_{xz}\pi_{xy}|\vec{p}\,sm\rangle = \eta_{xy}^3(\sigma_x\sigma_y\sigma_z)|-\vec{p},sm\rangle = \eta_{xy}^3 i|-\vec{p},sm\rangle \ , \quad (7.41)$$

comparando con (7.19) se deduce que:

$$\eta_{xy} = (-i\eta)^{1/3} \ . \quad (7.42)$$

Para partículas sin espín tenemos por lo tanto,

$$\eta_{xy} = \eta^{1/3}. \quad (7.43)$$

7.3. Propiedades de paridad para autoestados de energía

Teorema: Sea un Hamiltoniano invariante bajo paridad, $[H,P]=0$, y sea $|n\rangle$ un autoestado de H no degenerado. Entonces, $|n\rangle$ es también un autoestado de paridad bien definida.
Para demostrarlo consideramos el estado,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(1\pm P)|n\rangle \ . \tag{7.44}$$

Éste es un autoestado de paridad bien definida y autovalor ± 1. También es un autoestado de la misma autoenergía que $|n\rangle$, dado que $[H,P]=0$. Puesto que $|n\rangle$ es no degenerado se sigue que necesariamente $|n\rangle$ y uno de los estados $\frac{1}{\sqrt{2}}(1\pm P)|n\rangle$ son proporcionales con lo que $|n\rangle$ es también un autoestado con paridad bien definida. El otro estado $\frac{1}{\sqrt{2}}(1\pm P)|n\rangle$ es idénticamente nulo.
Ejemplos.

- El estado fundamental de un oscilador armónico unidimensional tiene una función de onda gaussiana y es, por tanto, un autoestado de paridad con autovalor $+1$. Los autoestados de energía se obtienen aplicando el operador de creación $a^\dagger$ reiteradamente sobre el estado fundamental $|0\rangle$,

$$|n\rangle \propto (a^\dagger)^n|0\rangle \ . \tag{7.45}$$

  Dado que $a^\dagger$ es una combinación lineal del operador x y p se sigue que posee paridad $(-1)^n$.

- Una partícula libre de momento nulo tiene función de onda constante e invariante bajo paridad. Podemos construir a partir de ondas planas estados con paridad bien definida. Si la paridad intrínseca de la partícula es η, los estados,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{p}\rangle \pm \eta|-\vec{p}\rangle\right) \ , \tag{7.46}$$

  tienen paridad igual a ± 1, puesto que:

$$P\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{p}\rangle \pm \eta|-\vec{p}\rangle\right) = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{p}\rangle \pm \eta|-\vec{p}\rangle\right) \ . \tag{7.47}$$

  Los estados anteriores corresponden a ondas planas de la forma $\cos\vec{p}\vec{x}$ y $\mathrm{sen}\vec{p}\vec{x}$, dependiendo de si $\eta=\pm 1$, respectivamente.

7.4. *Reglas de selección en multipolos eléctricos

En la presente y siguiente sección se analizarán las restricciones impuestas por conservación de momento angular y paridad en las transiciones electromagnéticas que tienen lugar entre los distintos niveles de energía atómicos o nucleares. Consideremos primero el caso eléctrostático. Los momentos multipolares aparecen como consecuencia de la bien conocida expansión en armónicos esféricos de la distancia entre dos puntos $\vec{r}$ y $\vec{r}\,'$. Supongamos que $\vec{r}\,'$ es el vector que indica la posición de las fuentes eléctricas y que éstas se encuentran recluidas en una región tal que $|\vec{r}\,'| < R$ con R finito. Para $|\vec{r}| \gg R$, tenemos la serie,

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1}\frac{(r')^\ell}{r^{\ell+1}} Y_\ell^m(\hat{r}')^* Y_\ell^m(\hat{r}) \ . \tag{7.48}$$

Por lo tanto el potencial electrostático admite el desarrollo,

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{r}) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int d^3r' \frac{\rho(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} = \frac{1}{\epsilon_0}\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}\int d^3r' \,\frac{\rho(\vec{r}\,')}{2\ell+1}\frac{(r')^\ell}{r^{\ell+1}} Y_\ell^m(\hat{r}')^* Y_\ell^m(\hat{r}) \\ &= \frac{1}{\epsilon_0}\sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell}(2\ell+1)^{-1} Y_\ell^m(\hat{r}) r^{-\ell-1} Q_{\ell m} \ , \end{aligned} \tag{7.49}$$

donde

$$Q_{\ell m} = \int d^3r' \, r'^{\,\ell} \, \rho(\vec{r}\,') \, Y_\ell^m(\hat{r}')^* \ , \tag{7.50}$$

son los multipolos eléctricos. De la relación $Y_\ell^{-m} = (-1)^m (Y_\ell^m)^*$ los multipolos eléctricos satisfacen,

$$Q^*_{\ell m} = (-1)^m Q_{\ell -m} \ . \tag{7.51}$$

El operador densidad de carga es tal que en el espacio de posiciones sus elementos de matriz vienen dados por,

$$\langle \vec{r}\,''|\rho|\vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r}\,''-\vec{r}\,')\sum_i e_i \delta(\vec{r}\,'-\vec{r}_i) = \delta(\vec{r}\,''-\vec{r}\,')\rho(\vec{r}\,') \ , \tag{7.52}$$

donde $\vec{r}_i$ es el operador de la i-ésima partícula de carga e_i.

Bajo una transformación de paridad, puesto que $\vec{r}_i \to -\vec{r}_i$, se sigue de (7.52) que:

$$P\rho(\vec{r}\,')P^{-1} = \sum_i e_i\delta(\vec{r}+\vec{r}_i) = \rho(-\vec{r}\,') \ . \tag{7.53}$$

Como consecuencia de la definición de $Q_{\ell m}$ se sigue por tanto,

$$\begin{aligned} PQ_{\ell m}P^{-1} &= \int d^3r' \, r'^{\,\ell} \, \rho(-\vec{r}\,') \, Y_\ell^m(\hat{r}')^* = \int d^3r' \, r'^{\,\ell} \, Y_\ell^m(-\hat{r}')^* \rho(\vec{r}\,') \\ &= (-1)^\ell \int d^3r' \, r'^{\,\ell} \, Y_\ell^m(\hat{r}')^* \rho(\hat{r}') \\ &= (-1)^\ell Q_{\ell m} \ . \end{aligned} \tag{7.54}$$

Reglas de selección de paridad.

Sean $|i\rangle$ y $|f\rangle$ dos autoestados con paridad bien definida,

$$P|i\rangle = \eta_i|i\rangle \ , \ \ P|f\rangle = \eta_f|f\rangle \ . \tag{7.55}$$

Por ejemplo, podríamos tener que los estados $|i\rangle$ y $|f\rangle$ correspondan a estados de momento angular definido $|\ell m\rangle$. Tendremos por lo tanto que,

$$\langle f|Q_{\ell m}|i\rangle = \eta_f \eta_i \langle f|P Q_{\ell m} P|i\rangle = \eta_f \eta_i (-1)^\ell \langle f|Q_{\ell m}|i\rangle \ . \tag{7.56}$$

Se llega de este modo a la relación,

$$\eta_f \eta_i (-1)^\ell = +1 \ . \tag{7.57}$$

Por lo tanto para ℓ par, el elemento de matriz es distinto de cero sólo si $\eta_f\,\eta_i = +1$. Por el contrario para ℓ impar, sólo será distinto de cero para $\eta_f\,\eta_i = -1$.

Demostremos a continuación que $Q_{\ell m}$ es un tensor esférico de rango ℓ. Para ello, estudiemos la transformación de $\rho(\vec{r}\,')$ bajo una rotación,

$$R\rho(\vec{r}\,')R^\dagger = \sum_i e_i \delta(\vec{r}\,' - R\vec{r}_i R^{-1}) = \sum e_i \rho(\vec{r}\,' - \mathcal{D}^{(1)}(R)\vec{r}_i) \ . \tag{7.58}$$

Si designamos por $\vec{r}\,'' = \mathcal{D}^{(1)}(R)\vec{r}\,'$, se tiene que:

$$R\rho(\vec{r}\,')R^\dagger = \sum_i e_i \delta(\mathcal{D}^{(1)}(R)(\vec{r}\,'' - \vec{r}_i)) = \rho(\vec{r}\,'') \ , \tag{7.59}$$

puesto que $|\det \mathcal{D}^{(1)}(R)| = 1$. Con ello se concluye que:

$$R Q_{\ell m} R^{-1} = \int d^3r''\, Y_\ell^m(\mathcal{D}^{(1)}(R)^{-1}\hat{r}\,'')\, r''^{\,\ell} \rho(\vec{r}\,'') \ . \tag{7.60}$$

Tal y como vimos en (6.172), $Y_\ell^m(\mathcal{D}^{(1)}(R)^{-1}\hat{r}'') = \sum_{m'} \mathcal{D}^{(\ell)}_{m'm}(R) Y_\ell^{m'}(\hat{r}'')$, insertando esta propiedad en (7.60) se tiene:

$$R Q_{\ell m} R^{-1} = \sum_{m=-\ell}^{\ell} \mathcal{D}^{(\ell)}_{mm'}(R) Q_{\ell m'} \ , \tag{7.61}$$

y, por lo tanto, el multipolo eléctrico $Q_{\ell m}$ es un tensor irreducible de rango ℓ.

Reglas de selección de momento angular.

Si los estados $|i\rangle$ y $|f\rangle$ poseen además momento angular total definido, $|f, JM\rangle$, $|i, J'M'\rangle$, tendremos como consecuencia del teorema de Wigner-Eckart (6.176):

$$\langle f, JM|Q_{\ell m}|i, J'M'\rangle = \langle \ell m J'M'|JM\rangle \langle f, J||Q_\ell||i, J'\rangle \ . \tag{7.62}$$

En particular se sigue por lo tanto que,

$$\begin{aligned} &M = m + M' \ , \\ &|J' - \ell| \le J \le J' + \ell \ . \end{aligned} \tag{7.63}$$

7.5. *Reglas de selección en multipolos magnéticos

Para medios macroscópicos además de la densidad de corriente explícita $\vec{J}(\vec{x})$, se tiene adicionalmente la imanación promedio debido a los momentos magnéticos intrínsecos de los constituyentes del medio material,

$$\vec{M}(\vec{x}) = \langle \sum_i \vec{m}_i \rangle \ . \tag{7.64}$$

De [11] el potencial vector viene dado por,

$$\vec{A}(\vec{x}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int d^3x' \, \frac{\vec{J}(\vec{x}\,') + \vec{\nabla}' \times \vec{M}(\vec{x}\,')}{|\vec{x} - \vec{x}\,'|} \ . \tag{7.65}$$

Podemos por tanto hablar de una densidad de corriente efectiva debida a la imanación,

$$\begin{aligned} \vec{J}_M &= \vec{\nabla} \times \vec{M} \ , \\ \vec{\nabla} \times \vec{B} &= \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \vec{\nabla} \times \vec{M} \ . \end{aligned} \tag{7.66}$$

De la inducción magnética $\vec{B}$ y de la imanación $\vec{M}$, definimos el campo magnético,

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0}\vec{B} - \vec{M} \ . \tag{7.67}$$

Por lo tanto de (7.66) y (7.67) se satisface,

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{J} \ . \tag{7.68}$$

En el caso de ausencia de corrientes $\vec{J} = 0$, por lo tanto $\vec{\nabla} \times \vec{H} = 0$, y podemos escribir que $H(\vec{x}) = -\vec{\nabla}\Phi_M(\vec{x})$, siendo Φ_M el potencial magnético. Dado que $\vec{\nabla}\vec{B} = 0$, de (7.67) se debe cumplir,

$$\nabla^2 \Phi_M = \vec{\nabla}\vec{M} = -\rho_M \ , \tag{7.69}$$

que es la ecuación de Poisson de la magnetostática y $\rho_M = -\vec{\nabla}\vec{M}$ es la densidad de carga magnética efectiva.

La solución de la ecuación (7.69) viene dada por:

$$\Phi_M(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \, \frac{\rho_M(\vec{x}\,')}{|\vec{x} - \vec{x}\,'|} \ . \tag{7.70}$$

Dado que $\vec{B}$ es un vector axial, de (7.67) se sigue que $\vec{H}$ y $\vec{M}$ también lo son. De este modo $\rho_M(\vec{x})$ es un pseudoescalar y por lo tanto:

$$P\rho_M(\vec{r}\,')P^{-1} = -\rho_M(-\vec{r}\,') \ . \tag{7.71}$$

Realizando el desarrollo en armónicos esféricos para $1/|\vec{r} - \vec{r}\,'|$ en las condiciones discutidas en (7.48) se tiene que:

$$\Phi_M(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (2\ell+1)^{-1} Y_\ell^m(\hat{r}) |r|^{-\ell-1} M_{\ell m} \ , \tag{7.72}$$

j	0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{3}{2}$	2
E0	sí	sí	sí	sí	sí
M1	no	sí	sí	sí	sí
E2	no	no	sí	sí	sí
M3	no	no	no	sí	sí

Cuadro 7.1: Momentos esperados de los multipolos eléctricos $E\ell$ y magnéticos $M\ell$ entre distintos estados de paridad y momento angular total definidos.

con

$$M_{\ell m} = \int d^3r' \, r'^{\,\ell} Y_\ell^m(\hat{r}')^* \rho_M(\vec{r}') \ , \tag{7.73}$$

los multipolos magnéticos, que al igual que los multipolos eléctricos satisfacen $M_{\ell -m} = M^*_{\ell m}$. Bajo una transformación por paridad, se pueden repetir los mismos pasos que en el caso de los multipolos eléctricos condujeron a (7.54), pero en este caso tenemos un signo menos adicional dado el carácter pseudoescalar de $\rho_M(\vec{r}')$. Por lo tanto,

$$P M_{\ell m} P^{-1} = (-1)^{\ell+1} M_{\ell m} \ . \tag{7.74}$$

Así, $M_{\ell m}$ con ℓ par sólo conecta a estados con paridades opuestas mientras que para ℓ impar sólo conecta a estados con igual paridad.

También podemos demostrar, de igual modo que en el caso electrostático, que los multipolos magnéticos son tensores irreducibles de rango ℓ puesto que $\rho_M(\vec{r}')$ se transforma bajo rotaciones igual que $\rho(\vec{r}')$ al ser un pseudoescalar. Por lo tanto,

$$R M_{\ell m} R^{-1} = \int d^3r'' \, Y_\ell^m(\mathcal{D}^{(1)}(R)^{-1}\hat{r}'')(r'')^\ell \rho_M(\vec{r}'') = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} \mathcal{D}^{(\ell)}_{m'm}(R) M_{\ell m'} \ . \tag{7.75}$$

Además, por el teorema de Wigner-Eckart,

$$\langle f, JM | M_{\ell m} | i, J'M' \rangle = \langle \ell m J'M' | JM \rangle \langle J, f || M_\ell || i, J' \rangle \ . \tag{7.76}$$

Teniendo en cuenta estas propiedades para los multipolos magnéticos, y (7.54) y (7.62) para los multipolos eléctricos, se obtiene la tabla 7.1 que muestra la potencia de argumentos basados en los principios de simetría. En esta tabla se muestran los valores esperados permitidos y prohibidos por las reglas de selección para los multipolos eléctricos y magnéticos debido a invarianza bajo paridad y rotaciones. El número que sigue a E o M, eléctrico o magnético respectivamente, indica el rango del correspondiente multipolo.

Nótese que no se ha considerado M_{00} puesto que:

$$M_{00} = -\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int dr' \, \vec{\nabla} \vec{M}(\vec{r}') = 0 \ , \tag{7.77}$$

aplicando el teorema de Gauss dado que estamos suponiendo que el medio material está contenido dentro de un radio R finito.

Para una partícula sola su imanación total se llama momento magnético,

$$\vec{\mu} = \frac{1}{2} q \vec{r} \times \vec{v} = \frac{1}{2m} q \vec{\ell} \,, \tag{7.78}$$

siendo q su carga eléctrica. La expresión anterior no tiene en cuenta la contribución del espín intrínseco de la partícula, $\vec{s}$, de modo que a (7.78) hay que añadirle una contribución extra debido al espín de la partículas,

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2m}(\vec{\ell} + g\vec{s}) \,, \tag{7.79}$$

donde g es el factor giromagnético. Notemos la similitud con la expresión (7.66) para medios materiales donde $\vec{J} \to \vec{J} + \vec{\nabla} \times M$, debido a las propiedades intrínsecas del medio. Para el caso particular del electrón la teoría actual de las interacciones electromagnéticas (QED) predice:

$$g = 2\left(1 + \frac{1}{2\pi}\frac{e^2}{4\pi c \epsilon_0 \hbar} + \mathcal{O}(e^4)\right) = 2\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \mathcal{O}(\alpha^2)\right) \simeq 2{,}0023 \,, \tag{7.80}$$

siendo α la constante de estructura final. Experimentalmente se tiene que

$$g/2 = 1{,}001159652187 \pm 0{,}000000000004 \,. \tag{7.81}$$

Este número resulta impresionante por su precisión al igual que el hecho de que la teoría está de acuerdo con la experiencia una vez que correcciones de orden superior en potencias de α son consideradas en (7.80).

Capítulo 8

Inversión temporal

8.1. Inversión temporal en mecánica clásica

Sean $\vec{x}(t)$ y $\vec{p}(t)$ la posición y el momento lineal de una partícula en función del tiempo. La operación de inversión temporal, además de cambiar el signo de t, se define tal que:

$$\begin{aligned} t &\rightarrow -t \ , \\ \vec{r}\,'(-t) &= \vec{r}(t) \ . \end{aligned} \tag{8.1}$$

Como consecuencia,

$$\vec{p}\,'(-t) = -\vec{p}(t) \ , \tag{8.2}$$

puesto que,

$$\vec{v}\,'(t) = \frac{d\vec{r}\,'(t)}{dt} = \frac{d\vec{r}(-t)}{dt} = -\vec{v}(-t) \ . \tag{8.3}$$

La figura 8.1 representa pictóricamente la ley de transformación (8.1). La curva que se indica con (I) corresponde a la trayectoria original mientras que la curva indicada por (II) corresponde a la transformada de acuerdo a (8.1). En el caso en que $\vec{x}$ y $\vec{p}$ no sean funciones del tiempo sino variables dinámicas independientes, se tomarán igualmente las expresiones (8.1) y (8.2) como definiciones de la operación de inversión temporal. Por ejemplo, desde el punto de vista del formalismo canónico, si $H(q,p,t)$ es invariante bajo inversión temporal, esto es, si cumple,

$$H(q,p,t) = H(q,-p,-t) \ , \tag{8.4}$$

entonces la transformación $q(t) \rightarrow q(-t)$, $p(t) \rightarrow -p(-t)$, $t \rightarrow -t$ deja invariante las ecuaciones canónicas, de modo que las variables transformadas cumplen,

$$\dot{q}_i'(t) = \frac{\partial H(q'(t),p'(t),t)}{\partial p_i'(t)} \ , \ \dot{p}_i'(t) = -\frac{\partial H(q'(t),p'(t),t)}{\partial q_i'(t)} \ , \tag{8.5}$$

donde el punto sobre las variables dinámicas indica que se ha tomado la derivada temporal. Para su demostración, si $q(t)$ y $p(t)$ son solución a las ecuaciones de movimiento, entonces,

$$\begin{aligned} \dot{q}_i'(t) &= -\frac{dq_i(-t)}{d(-t)} = -\frac{\partial H(q'(t),p'(t),t)}{\partial p_i(-t)} = \frac{\partial H(q',p',t)}{\partial p_i'(t)} \ , \\ \dot{p}_i'(t) &= \frac{dp_i(-t)}{d(-t)} = -\frac{\partial H(q'(t),p'(t),t)}{\partial q'(t)} \ . \end{aligned} \tag{8.6}$$

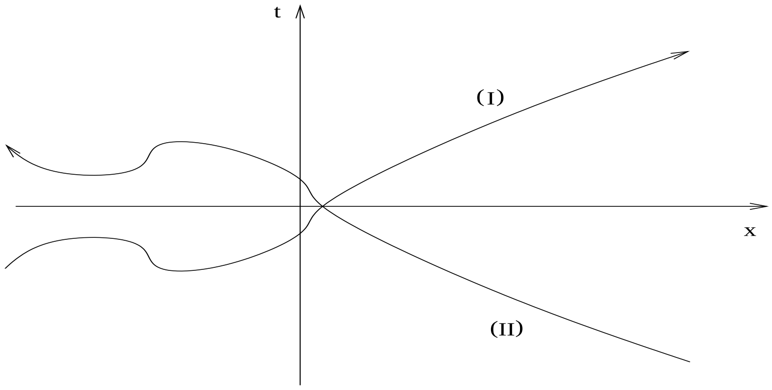

Figura 8.1: Representación gráfica de la ley de transformación (8.1). La curva (II) es la transformada por inversión temporal de la curva (I).

Por lo tanto, las variables dinámicas $q' = q$ y $p' = -p$ son de hecho variables canónicas con el mismo Hamiltoniano original $H(q', p', t)$. Para llegar a esta conclusión hemos hecho uso de que se cumple (8.4).

Un ejemplo sencillo que viola invarianza bajo inversión temporal, es decir, que la transformada de la solución no es solución a su vez de las ecuaciones de movimiento, es el caso del movimiento de una partícula en un campo magnético externo dado. Dicha partícula satisface la ley de movimiento de Newton,

$$m\frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} = \frac{e}{m}\vec{p}(t) \times \vec{B} \ . \tag{8.7}$$

Veamos que $\vec{r}\,'(t) = \vec{r}(-t)$ y $\vec{p}\,'(t) = -\vec{p}(-t)$ no satisfacen,

$$m\frac{d^2\vec{r}\,'(t)}{dt^2} = \frac{e}{m}\vec{p}\,'(t) \times \vec{B}(t) \ . \tag{8.8}$$

En efecto,

$$m\frac{d^2\vec{r}\,'(t)}{dt^2} = m\frac{d^2\vec{r}(-t)}{dt^2} = m\frac{d^2\vec{r}(-t)}{d(-t)^2} = \frac{e}{m}\vec{p}(-t) \times \vec{B}(-t) = -\frac{e}{m}\vec{p}\,'(t) \times \vec{B}(-t) \ . \tag{8.9}$$

Que no es (8.8). Sólo se cumpliría en el supuesto que $\vec{B}(t) \to -\vec{B}(-t)$, que es de hecho el caso cuando el campo magnético esté generado por el propio sistema, pues entonces las corrientes electromagnéticas asociadas cambian de signo, $\vec{j}(t) \to -\vec{j}(-t)$. Pero esto no ocurre para un campo magnético externo.

8.2. Inversión temporal en mecánica cuántica

Consideremos la ecuación de Schrödinger para un potencial $V(\vec{x})$,

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{x},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x},t) \ . \tag{8.10}$$

Si pasamos de t a $-t$ en la ecuación anterior tenemos:

$$i\hbar\frac{\psi(\vec{x},-t)}{\partial(-t)} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi(\vec{x},-t) ~, \tag{8.11}$$

con lo que $\psi(\vec{x},-t)$ no satisface la ecuación de Schrödinger dada la presencia de $-t$ en la derivada temporal, que implica un signo menos delante de $i\hbar$. Sin embargo, si a continuación tomamos el complejo conjugado de (8.11) sí que volvemos a recuperar la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar\frac{\partial\psi^*(\vec{x},-t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x})\right)\psi^*(\vec{x},-t) ~. \tag{8.12}$$

Por lo tanto, si $\psi(\vec{x},t)$ es solución de la ecuación de Schrödinger entonces $\psi^*(\vec{x},-t)$ también lo es y decimos que $\psi^*(\vec{x},-t)$ es la función de onda transformada por inversión temporal de la función de onda inicial. El hecho de que haya sido necesario tomar el complejo conjugado en la función de onda transformada claramente indica que el operador de inversión temporal será un operador antiunitario.

Por el teorema de Wigner sabemos que el operador de inversión temporal θ será unitario o antiunitario. Supongamos un sistema cerrado para el que las ecuaciones de movimiento sean invariantes bajo inversión temporal. Entonces se tiene:

$$U(-t)\theta|\alpha\rangle = \theta U(t)|\alpha\rangle ~, \tag{8.13}$$

siendo $|\alpha\rangle$ un vector arbitrario. Esta expresión simplemente afirma lo que se puede ver directamente en la figura 8.1, esto es, que si dejamos evolucionar el sistema invertido temporalmente hacia tiempos menores se obtiene el mismo estado que si invertimos temporalmente el sistema original evolucionado hacia tiempos mayores. Si consideramos un t infinitesimal y manteniendo términos hasta primero orden en t, tenemos de (8.13) la condición:

$$iH\theta = -\theta H i ~. \tag{8.14}$$

Si θ fuese unitario, tenemos pues que $H\theta = -\theta H$, con lo que si $|n\rangle$ es un autoestado de H con energía E_n entonces $\theta|n\rangle$ es un autoestado con energía $-E_n$ y, por lo tanto, el espectro de energía no estaría acotado inferiormente. Pensemos sencillamente en una partícula libre. En el caso en que θ fuese unitario tendríamos un espectro que iría desde $-\infty$ hasta $+\infty$ que no es permitido. Por el contrario, para θ antiunitario de (8.14) se tiene que $[H,\theta]=0$ y $\theta|n\rangle$ tiene también como autovalor E_n y no se llega a contradicción.

Estudiemos a continuación las reglas de conmutación de θ con los operadores de posición, momento lineal y momento angular. Los transformados por inversión temporal de los operadores de posición y momento lineal son:

$$\begin{aligned}\theta\vec{x}\theta^{-1} &= \vec{x} ~,\\ \theta\vec{p}\theta^{-1} &= -\vec{p} ~,\end{aligned} \tag{8.15}$$

de forma que dados dos autovectores $|\vec{x}\,'\rangle$ y $|\vec{p}\,'\rangle$ de posición y momento lineal sus transformados bajo inversión temporal pasan a ser autoestados con los autovalores $\vec{x}\,'$ y $-\vec{p}\,'$, respectivamente.

De hecho de (8.15) se sigue, al igual que en paridad, que para llegar a un tratamiento consistente de las relaciones de conmutación canónicas se requiere que θ sea antiunitario.

$$\begin{aligned} \theta[x_i,p_j]\theta^{-1} &= \theta i\hbar\delta_{ij}\theta^{-1} = \pm i\hbar\delta_{ij} \;, \\ [x_i,-p_j] &= -i\hbar\delta_{ij} \;, \end{aligned} \tag{8.16}$$

donde el signo $+$ se aplica para el caso de operador unitario mientras que el signo $-$ se aplica para el caso de operador antiunitario. Sólo para θ antiunitario no se llega a contradicción.

La ley de transformación $\theta\vec{p}\theta^{-1} = -\vec{p}$ se sigue también del hecho bien conocido de que una inversión temporal y una traslación espacial conmutan,

$$U(\vec{a})\theta = \theta U(\vec{a}) \;, \tag{8.17}$$

y entonces considerando una traslación infinitesimal se llega por tanto a,

$$\begin{aligned} \vec{p}\theta &= -\theta\vec{p} \;, \\ \theta\vec{p}\theta^{-1} &= -\vec{p} \;, \end{aligned} \tag{8.18}$$

teniendo en cuenta que θ es antiunitario.

Análogamente sucede con las rotaciones pues éstas conmutan con una inversión temporal. De este modo, considerando una rotación infinitesimal se llega a,

$$\begin{aligned} \left(1 - i\alpha\frac{\vec{J}\hat{n}}{\hbar}\right)\theta &= \theta\left(1 - i\alpha\frac{\vec{J}\hat{n}}{\hbar}\right) \;, \\ \theta\vec{J}\theta^{-1} &= -\vec{J} \;. \end{aligned} \tag{8.19}$$

Al igual que ocurre con paridad, la aplicación sucesiva de la operación de inversión temporal (8.1) conduce a la operación identidad. A nivel cuántico tendremos, por lo tanto, que $\theta^2 = \epsilon_T\,\mathbb{I}$, con ϵ_T un número complejo de módulo unidad. Sin embargo, a diferencia de P, y porque θ es un operador antiunitario, se sigue que ϵ_T no puede ser reabsorbido en una redefinición de θ tal que $\theta \to \theta' = \eta\theta$, con $|\eta| = 1$. De hecho, si calculamos $\theta'^{\,2}$ tenemos,

$$\theta'^{\,2} = \eta\theta\eta\theta = \eta\eta^*\theta^2 = \theta^2 = \epsilon_T \;. \tag{8.20}$$

Estudiemos a continuación la actuación de θ sobre estados de partículas sin espín. Procederemos de forma análoga a como lo hicimos para el caso de paridad P haciendo uso de (8.15).

De la definición (4.29) tenemos:

$$\theta|\vec{x}\,'\rangle = \theta e^{-i\vec{p}\vec{x}\,'/\hbar}|0_X\rangle = e^{-i\vec{p}\vec{x}\,'/\hbar}\theta|0_X\rangle = \xi e^{-i\vec{p}\vec{x}\,'/\hbar}|0_X\rangle = \xi|\vec{x}\,'\rangle \;, \tag{8.21}$$

donde ξ es un número complejo de módulo unidad. Dado el carácter antiunitario de θ dicho factor puede reabsorberse en una redefinición del estado $|0_X\rangle$,

$$\begin{aligned} |0_X\rangle' &= \lambda|0_X\rangle \;, \\ \theta|0_X\rangle' &= \lambda^*\theta|0_X\rangle = (\lambda^*)^2\xi|0_X\rangle' \;, \end{aligned} \tag{8.22}$$

con la solución $\lambda = \sqrt{\xi^*}$. En lo que sigue supondremos que dicha redefinición se ha realizado y tomaremos $\xi = 1$.

Utilizando la base de posiciones podemos determinar fácilmente $\theta|\vec{p}\,'\rangle$,

$$\theta|\vec{p}\,'\rangle = \int d^3x'|\vec{x}\,'\rangle\langle\vec{x}\,'|(\theta|\vec{p}\,'\rangle) = \int d^3x'|\vec{x}\,'\rangle(2\pi\hbar)^{-3/2}e^{-i\vec{p}\,'\vec{x}\,'/\hbar} = |-\vec{p}\,'\rangle \ , \tag{8.23}$$

donde hemos empleado en virtud de (8.21) que,

$$\langle\vec{x}\,'|(\theta|\vec{p}\,'\rangle) = \langle\theta\vec{x}\,'|\theta\vec{p}\,'\rangle = \langle\vec{x}\,'|\vec{p}\,'\rangle^* \ , \tag{8.24}$$

al ser θ antiunitario.

La ley de transformación de una función de onda se obtiene de forma directa dado que,

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x},t) &= \langle\vec{x}|\psi_t\rangle \ , \\ \langle\vec{x}|(\theta|\psi_t\rangle) &= \langle\vec{x}|(\theta e^{-iHt/\hbar}|\psi\rangle) = \langle\vec{x}|e^{iHt/\hbar}(\theta|\psi\rangle) = e^{iHt/\hbar}\psi^*(\vec{x},0) = \psi^*(\vec{x},-t) \ , \end{aligned} \tag{8.25}$$

tal y como establecimos al principio de esta sección.

Ahora generalizamos nuestras consideraciones anteriores para el caso de partículas con espín. La relación fundamental es (8.19),

$$\theta J_i\theta^{-1} = -J_i \ , \tag{8.26}$$

que establece como el momento angular se transforma bajo inversión temporal. Como consecuencia,

$$\theta|jm\rangle = \xi_m|j-m\rangle \ , \tag{8.27}$$

donde ξ_m es un número complejo de módulo unidad. La expresión (8.27) se deduce de,

$$J_3\theta|jm\rangle = -\theta J_3|jm\rangle = -\hbar m\theta|jm\rangle \ . \tag{8.28}$$

Para fijar ξ_m hagamos uso de J_+,

$$\theta J_+|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\theta|jm+1\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\xi_m|j-(m+1)\rangle \ . \tag{8.29}$$

Haciendo uso de (8.26) y de que θ es antiunitario tenemos también:

$$\theta J_+|jm\rangle = -J_-\theta|jm\rangle = -J_-\xi_m|j-m\rangle = -\xi_m\hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}|j-(m+1)\rangle \ , \tag{8.30}$$

y por lo tanto, de la comparación entre (8.29) y (8.30), se tiene,

$$\xi_{m+1} = -\xi_m \ . \tag{8.31}$$

Ésta constituye una relación de recurrencia cuya solución es:

$$\xi_m = \xi_j(-1)^{j-m} \ , \tag{8.32}$$

con lo que

$$\theta|jm\rangle = \xi_j(-1)^{j-m}|j-m\rangle \ . \tag{8.33}$$

Como ya discutimos en torno a (8.22), dado el carácter antiunitario de θ sabemos que el número complejo de norma unidad ξ_j no tiene implicaciones físicas ya que puede ser reabsorbido en una fase global en el conjunto de estados $|jm\rangle$. Sin embargo, vimos también que éste no era el caso para ϵ_T. Si a partir de (8.33) calculamos,

$$\theta^2|jm\rangle = \theta\xi_j(-1)^{j-m}|j-m\rangle = \xi_j^*(-1)^{j-m}\theta|j-m\rangle = (-1)^{2j}|jm\rangle \ , \tag{8.34}$$

dado que este resultado es independiente del estado $|jm\rangle$, resulta,

$$\theta^2 = (-1)^{2j} \ , \tag{8.35}$$

y en efecto ξ_j no aparece como debe ser.

Si particularizamos (8.33) para el caso de momento angular orbital,

$$\theta|\ell m\rangle = \xi_\ell(-1)^{\ell-m}|\ell-m\rangle \ . \tag{8.36}$$

Por otra parte, también sabemos,

$$\begin{aligned}\theta|\ell m\rangle &= \int d\Omega\,|\hat{n}\rangle\langle\hat{n}|(\theta|\ell m\rangle) = \int d\Omega\,|\hat{n}\rangle Y_\ell^m(\hat{n})^*|\hat{n}\rangle \\ &= \int d\Omega\,|\hat{n}\rangle(-1)^m Y_\ell^{-m}(\hat{n}) = (-1)^m|\ell-m\rangle = (i)^{2m}|\ell-m\rangle \ .\end{aligned} \tag{8.37}$$

Ambas leyes de transformación son iguales si tomamos $\xi_\ell = (-1)^\ell = (i)^{2\ell}$.

La regla de transformación (8.37) se puede generalizar a cualquier espín, como es usual, sin más que definir $\xi_j = (i)^{2j}$, dado que,

$$\theta|jm\rangle = (i)^{2j}(-1)^{j-m}|j-m\rangle = (i)^{2j-2j+2m}|j-m\rangle = (i)^{2m}|j-m\rangle \ . \tag{8.38}$$

8.3. Operadores antiunitarios

Como vimos en (2.93) las transformaciones antiunitarias se caracterizan por:

1. Si $|\psi_1'\rangle = \theta|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2'\rangle = \theta|\psi_2\rangle$ entonces

$$\langle\psi_2'|\psi_1'\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^* = \langle\psi_1|\psi_2\rangle \ . \tag{8.39}$$

2. Antilinealidad,

$$\theta(\lambda_1|\alpha\rangle + \lambda_2|\beta\rangle) = \lambda_1^*\theta|\alpha\rangle + \lambda_2^*\theta|\beta\rangle \ . \tag{8.40}$$

Consideremos a continuación la actuación de un operador antiunitario θ en una base dada $\{|a_m'\rangle\}$. Por supuesto, el vector transformado por θ es independiente de base, pero la forma matricial del operador no. Designemos por $|\widetilde{a}_m'\rangle = \theta|a_m'\rangle$, el transformado del vector $|a_m'\rangle$ perteneciente a la base. Entonces, para un vector arbitrario $|\psi_1\rangle = \sum_m C_m|a_m'\rangle$, su transformado viene dado por:

$$\theta|\psi_1\rangle = \sum_m C_m^*|\widetilde{a}_m'\rangle. \tag{8.41}$$

Por lo tanto, podemos escribir:

$$\theta = \left(\sum_m |\widetilde{a}'_m\rangle\langle a'_m|\right) K \ , \tag{8.42}$$

siendo $K : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$, el operador de conjugación de los números complejos,

$$K(a+ib) = a - ib \ , \tag{8.43}$$

con a y b reales. Dado que $\sum_m |\widetilde{a}'_m\rangle\langle a'_m|$ representa a un operador unitario, puesto que transforma una base ortonormal en otra, resulta por tanto que en una base dada,

$$\theta = U\,K \ , \tag{8.44}$$

siendo U un operador unitario. Tanto K como U en (8.44) dependen de la base elegida, sin embargo su actuación conjunta es independiente de base.

Por ejemplo, particularizando (8.38) para $j = 1/2$,

$$\theta|\frac{1}{2}m\rangle = (i)^{2m}|\frac{1}{2} - m\rangle \ . \tag{8.45}$$

Tomando los vectores $\{|\frac{1}{2}m\rangle\}$ como base, la ley de transformación anterior corresponde a la matriz de Pauli σ_y que es unitaria. Por lo tanto, tenemos que $\theta = \sigma_y K$, en la base de estados $\{|\frac{1}{2}m\rangle\}$.

Si $\theta|\psi_1\rangle = |\psi'_1\rangle$, se define la actuación de θ sobre el espacio dual como,

$$\langle\psi_1|\theta = \langle\psi'_1| \ , \tag{8.46}$$

es decir, θ actuando sobre un bra es el dual del ket transformado por θ.

De este modo, $(\langle\psi_1|\lambda_1 + \langle\psi_2|\lambda_2)\theta$ es el dual de $\theta(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1^*|\psi'_1\rangle + \lambda_2^*|\psi'_2\rangle$, por lo tanto,

$$(\langle\psi_1|\lambda_1 + \langle\psi_2|\lambda_2)\theta = \lambda_1^*\langle\psi'_1| + \lambda_2^*\langle\psi'_2| \ , \tag{8.47}$$

dando lugar a un operador antilineal en el espacio dual.

Por otra parte,

$$\langle\psi|(\theta|\psi\rangle) = \langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi'|\psi\rangle^* = ((\langle\psi|\theta)|\psi\rangle^* \ . \tag{8.48}$$

Vemos aquí una clara limitación de la notación de Dirac cuando se trata de manipulaciones con operadores antiunitarios puesto que, dependiendo de si dicho operador actúa sobre el bra o el ket, se obtiene un resultado u otro. En lo que sigue, a no ser que se especifique mediante un paréntesis, dado un operador antiunitario se supondrá siempre que actúa sobre el ket.

8.4. Degeneración de Kramers y otras consecuencias de inversión temporal

1) Sea H un Hamiltoniano invariante bajo inversión temporal, $\theta H \theta^{-1} = H$. Si $|n\rangle$ es un autoestado de H entonces los estados $\theta|n\rangle$ y $|n\rangle$ tienen la misma energía y son distintos para espín semientero.

Dado que $\theta H \theta^{-1} = H$, es evidente que $\theta|n\rangle$ tiene la misma energía que $|n\rangle$,

$$H\theta|n\rangle = \theta H|n\rangle = E_n \theta|n\rangle \ . \tag{8.49}$$

El punto está en demostrar si en efecto se tiene que $\theta|n\rangle$ y $|n\rangle$ son dos estados distintos. Supongamos lo contrario, es decir, que $\theta|n\rangle = e^{i\gamma}|n\rangle$, entonces:

$$\theta^2|n\rangle = \theta e^{i\gamma}|n\rangle = |n\rangle \ . \tag{8.50}$$

Sin embargo de (8.35) sabemos que $\theta^2 = (-1)^{2j}$ y por lo tanto para j semientero llegamos a una contradicción porque $(-1)^{2j} = -1$. Por lo tanto, para j semientero $\theta|n\rangle \neq e^{i\gamma}|n\rangle$ y el nivel de energía $|E_n\rangle$ presenta al menos una degeneración doble.

Si el Hamiltoniano se modifica de forma que deja de ser invariante bajo inversión temporal, entonces la degeneración de Kramers desaparece y, salvo accidente, $|n\rangle$ y $\theta|n\rangle$ dejan de tener la misma energía. Esto ocurre por ejemplo en presencia de un campo magnético externo, tal y como indicamos en la sección 8.1 a nivel clásico. Si H_0 es invariante bajo inversión temporal, entonces,

$$H' = H_0 - \mu_0 \vec{S}\vec{B} \ . \tag{8.51}$$

deja de serlo ya que,

$$\theta H' \theta^{-1} = \theta H_0 \theta^{-1} - \theta \vec{S}\vec{B}\mu_0 \theta^{-1} = H_0 - \theta \vec{S}\theta^{-1}\theta\vec{B}\theta^{-1}\mu_0 = H_0 + \mu_0 \vec{S}\vec{B} \neq H' \ , \tag{8.52}$$

y los estados $|jm\rangle$ y $|j-m\rangle$ no tienen la misma energía. En este ejemplo, la proyección del momento angular de los estados $|jm\rangle$ se ha tomado según el vector axial $\vec{B}$.

2) Como consecuencia de la ley de transformación de la función de onda (8.25), se sigue que la función de onda de un estado no degenerado de energía sin espín, siempre se puede elegir real para Hamiltonianos invariantes bajo inversión temporal.

   Designemos por $|n\rangle$ el autovector de energía E_n. Entonces, $\theta|n\rangle$ tiene la misma energía dado que $\theta H \theta^{-1} = H$. Pero, como el autovalor E_n es no degnerado, entonces $\theta|n\rangle = e^{i\gamma}|n\rangle$, $\gamma \in \mathbb{R}$. A nivel de función de onda resulta por lo tanto que, $\psi^*(\vec{x}) = e^{i\gamma}\psi(\vec{x})$. Redefiniendo la fase global arbitraria en $\psi(\vec{x})$, siempre se puede reabsorber el número complejo $e^{i\gamma}$ y, por tanto, $\psi^*(\vec{x}) = \psi(\vec{x})$.

3) Sea $\mathcal{O}$ un operador arbitrario, entonces sus elementos de matriz satisfacen

$$\langle\beta|\mathcal{O}|\alpha\rangle = \langle\widetilde{\alpha}|\theta\mathcal{O}^\dagger\theta^{-1}|\widetilde{\beta}\rangle \ , \tag{8.53}$$

   donde $|\widetilde{\alpha}\rangle = \theta|\alpha\rangle$ y $|\widetilde{\beta}\rangle = \theta|\beta\rangle$.

   La demostración sigue así,

$$\langle\beta|\mathcal{O}|\alpha\rangle = \langle\mathcal{O}^\dagger\beta|\alpha\rangle = \langle\widetilde{\alpha}|\theta\mathcal{O}^\dagger|\beta\rangle = \langle\widetilde{\alpha}|\theta\mathcal{O}^\dagger\theta^{-1}|\widetilde{\beta}\rangle \ . \tag{8.54}$$

   Un observable, $\mathcal{O}^\dagger = \mathcal{O}$, se dice que es par o impar bajo inversión temporal si satisface,

$$\theta\mathcal{O}\theta^{-1} = \pm\mathcal{O} \ , \tag{8.55}$$

respectivamente. Por ejemplo, $\vec{p}$ es impar, mientras que $\vec{x}$ es par.

Como aplicación de (8.53) y (8.55), supongamos que el observable par/impar $\mathcal{O}$ es un tensor irreducible de rango k, $T_q^{(k)}$, y consideremos los elementos de matriz,

$$\langle jm', \alpha | T_q^{(k)} | jm, \alpha\rangle \ , \tag{8.56}$$

donde los estados en la expresión anterior tienen el mismo momento angular j y números cuánticos adicionales invariantes bajo rotaciones α e inversión temporal. Por el teorema de Wigner-Eckart, sólo hace falta conocer un elemento de matriz, que tomaremos $\langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha\rangle$. Teniendo en cuenta que $T_0^{(k)\,\dagger} = T_0^{(k)}$ y que $\theta T_0^{(k)} \theta^{-1} = \pm T_0^{(k)}$, se sigue de (8.53),

$$\langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha\rangle = \pm \langle \widetilde{jm, \alpha} | T_0^{(k)} | \widetilde{jm, \alpha}\rangle \ . \tag{8.57}$$

Aplicando (8.38) a la expresión anterior tenemos,

$$\langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha\rangle = \pm \langle j-m, \alpha | T_0^{(k)} | j-m, \alpha\rangle \ . \tag{8.58}$$

Por otra parte,

$$|j-m, \alpha\rangle \propto \mathcal{D}(0,\pi,0)^{(j)} | jm, \alpha\rangle \ , \tag{8.59}$$

salvo una fase, que ya fijamos en (6.157), que aquí no es relevante puesto que al calcular el valor esperado anterior desaparece. Por lo tanto,

$$\langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha\rangle = \pm \langle jm, \alpha | \mathcal{D}^\dagger(0,\pi,0) T_0^{(k)} \mathcal{D}(0,\pi,0) | jm, \alpha\rangle = \pm (-1)^k \langle jm, \alpha | T_0^{(k)} | jm, \alpha\rangle \ . \tag{8.60}$$

Para deducir la expresión anterior hemos hecho uso de la propiedad de transformación de un tensor irreducible de rango k, (6.166). En nuestro caso tenemos,

$$\mathcal{D}^\dagger(0,\pi,0) T_0^{(k)} \mathcal{D}(0,\pi,0) = \sum_{m'} d_{m'0}^{(k)}(-\pi) T_{m'}^{(k)} = d_{00}^{(k)}(-\pi) T_0^{(k)} = (-1)^k T_0^{(k)} \ , \tag{8.61}$$

empleando (6.114) para obtener las matrices de rotación $d_{m0}^{(j)}(\beta)$. No obstante, es trivial reconocer que bajo una rotación de 180^o alrededor del eje y actuando sobre $T_0^{(k)}$ se volverá a tener $T_0^{(k)}$, excepto quizás por un número complejo de módulo unidad, en este caso $(-1)^k$.

Por lo tanto, si $T^{(k)}$ es impar sólo tendrá elementos de matriz no nulos en el espacio de momento angular total j si k es impar. Por el contrario, si $T^{(k)}$ es par sólo tendrá elementos de matriz no nulos para k par, entre estados con el mismo momento angular total.

Por ejemplo, tomemos $T_0^{(1)} = \cos\theta$, tenemos que $k=1$ y $\cos\theta$ es par, con lo que $\langle \cos\theta\rangle_j = 0$ de (8.61) y con ello todos los elementos de matriz,

$$\langle jm', \alpha | T_q^{(1)} | jm, \alpha\rangle = 0 \ . \tag{8.62}$$

Este resultado es muy potente, dado que ni siquiera se requiere que $|jm, \alpha\rangle$ tenga paridad bien definida. Si éste fuera el caso, es obvio que los elementos de matriz anteriores serían nulos puesto que $\cos\theta$ es impar. Pero ésto no es requerido. Pensemos por ejemplo en un estado del átomo de hidrógeno $|jm,\ell s\rangle$ que tiene momento angular total bien definido obtenido a partir de la combinación del momento angular orbital y del espín del electrón. Para fijar ideas, consideremos en concreto el estado $|\frac{1}{2}m\rangle$. Este estado se puede obtener bien de combinar $\ell=0$ (onda S) con $s=1/2$ (éste último es fijo) o bien de combinar $\ell=1$ (onda P) con $s=1/2$. Por lo tanto,

$$|\frac{1}{2}m\rangle = C_S|\frac{1}{2}m,S\frac{1}{2}\rangle + C_P|\frac{1}{2}m,P\frac{1}{2}\rangle~, \tag{8.63}$$

con $|C_S|^2+|C_P|^2=1$. El estado anterior no tiene paridad bien definida puesto que la onda S al tener $\ell=0$ tiene paridad $+1$, mientras que la onda P, al tener $\ell=1$ tiene paridad -1. Recuérdese la expresión (7.22) que establece el comportamiento de los armónicos esféricos bajo paridad.

Capítulo 9

Partículas Idénticas

Mientras que en física clásica el estudio de un sistema de partículas no supone ningún aspecto cualitativamente nuevo y no implica más que consideraciones técnicas, la situación es drásticamente diferente en física cuántica, donde aparecen nuevos fenómenos del máximo interés, tanto a nivel cualitativo como cuantitativo, y que no tienen parangón clásicamente. De hecho, veremos en este tema que para abordar el estudio de sistemas con partículas idénticas debemos aumentar el conjunto de principios básicos de la teoría con un nuevo postulado sobre el comportamiento de los estados físicos bajo el intercambio de partículas idénticas.

9.1. Permutación como un operador de simetría

Consideremos un sistema de N partículas idénticas. El Hamiltoniano que da lugar a la evolución temporal de dicho sistema, $H(1,2,...,N)$, es invariante bajo el intercambio de cualesquiera de las partículas idénticas entre sí. Esto es así tanto a nivel cuántico como clásico, ya que es completamente arbitraria la enumeración que hagamos de dichas partículas, es decir, a cuál de esas partículas indiquemos con el índice 1, 2, ..., N. De este modo:

$$\mathcal{P}H(1,2,3,...,N)\mathcal{P}^{-1} = H(1,2,...,N) \ , \tag{9.1}$$

siendo $\mathcal{P}$ un elemento del grupo de permutaciones de N elementos, que como sabemos contiene $N!$ permutaciones. Por lo tanto, $\mathcal{P}$ es una simetría conservada para un sistema arbitrario de partículas idénticas.

Por ejemplo, $\mathcal{P} = \mathcal{P}_{12}$ es la transposición de las partículas 1 y 2,

$$\mathcal{P}H(1,2,3,...,N)\mathcal{P}^{-1} = H(2,1,3,...,N) = H(1,2,3,...,N) \ . \tag{9.2}$$

Como toda permutación se puede escribir como el producto de transposiciones, es por tanto suficiente que

$$\mathcal{P}_{ij}H\mathcal{P}_{ij}^{-1} = H \ , \tag{9.3}$$

para que $\mathcal{P}H\mathcal{P}^{-1} = H$ tal y como se requiere en (9.1).

Como $\mathcal{P}$ conmuta con H,

$$\mathcal{P}U(t)\mathcal{P}^{-1} = \mathcal{P}e^{-iHt/\hbar}\mathcal{P}^{-1} = \begin{cases} e^{-iHt/\hbar} = U(t) & \mathcal{P} \text{ unitario,} \\ e^{iHt/\hbar} = U(-t) & \mathcal{P} \text{ antiunitario,} \end{cases} \tag{9.4}$$

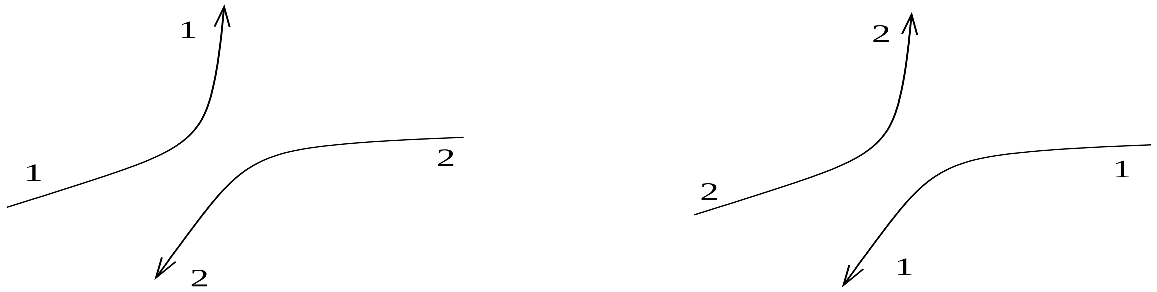

Figura 9.1: Intercambio de los estados en los que se encuentran las partículas 1 y 2.

y por tanto, para que la evolución temporal sea invariante bajo una permutación de las N partículas idénticas, $\mathcal{P}$ ha de ser unitario.

El operador $\mathcal{P}$ también conmuta con el momento angular y lineal total del sistema, dado que éstos son una suma sobre los momentos angulares y lineales de cada una de las partículas por separado. Y al ser unitario,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\vec{L}\mathcal{P}^{-1} = \vec{L} \quad &\rightarrow \quad \mathcal{P}e^{-i\vec{L}\vec{\theta}/\hbar}\mathcal{P}^{-1} = e^{-i\vec{L}\vec{\theta}/\hbar} \ , \\ \mathcal{P}\vec{P}\mathcal{P}^{-1} = \vec{P} \quad &\rightarrow \quad \mathcal{P}e^{-i\vec{P}\vec{a}/\hbar}\mathcal{P}^{-1} = e^{-i\vec{P}\vec{a}/\hbar} \ , \end{aligned} \tag{9.5}$$

conmuta con las traslaciones y rotaciones.

Como $\mathcal{P}_{ij}$ es unitario y $\mathcal{P}_{ij}^2 = \varepsilon_{ij}$, con ε_{ij} una fase, siempre podemos redefinir dicho operador tal que $\mathcal{P}_{ij}^2 = 1$ y así sus autovalores son ± 1. De aquí se deduce que dado el carácter unitario de $\mathcal{P}_{ij}$, se tiene la igualdad $\mathcal{P}_{ij} = \mathcal{P}_{ij}^\dagger = \mathcal{P}_{ij}^{-1}$.

Para el espacio de Hilbert de N partículas idénticas tomemos como base o conjunto completo de estados de N-partículas la base producto directo,

$$|\xi_1'\xi_2'...\xi_N'\rangle = |\xi_1'\rangle_1|\xi_2'\rangle_2...|\xi_N'\rangle_N \ , \tag{9.6}$$

donde $\{|\xi'\rangle\}$ es un conjunto completo de los estados de una partícula. Cada uno de estos estados monoparticulares también se denomina orbital por razones históricas del estudio de las configuraciones electrónicas en física atómica. El subíndice en $|\rangle_i$ se refiere a que estamos considerando la i-ésima partícula. En esta base tenemos,

$$\mathcal{P}_{12}|\xi_1'\xi_2'\xi_3'...\xi_N'\rangle = |\xi_2'\xi_1'\xi_3'...\xi_N'\rangle = |\xi_2'\rangle_1|\xi_1'\rangle_2|\xi_3'\rangle_3...|\xi_N'\rangle_N \ , \tag{9.7}$$

El estado en que se encontraba la partícula segunda pasa a ser ahora el estado de la primera partícula y viceversa, tal y como se representa en la figura 9.1.

Ejemplo. Caso $N = 2$,

$$|\xi_1'\xi_2'\rangle_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\xi_1'\xi_2'\rangle \pm |\xi_2'\xi_1'\rangle\right] \ , \ \mathcal{P}_{12}|\xi_1'\xi_2'\rangle_\pm = \pm|\xi_1'\xi_2'\rangle_\pm \ , \tag{9.8}$$

con lo que los estados $|\xi_1'\xi_2'\rangle_\pm$ son autoestados de $\mathcal{P}_{12}$. Esto implica propiedades simples bajo la actuación de una permutación. Además, estas propiedades no se alteran en la evolución temporal del sistema,

$$\mathcal{P}_{12}U(t,t_0)|\xi_1'\xi_2'\rangle_\pm = U(t,t_0)\mathcal{P}_{12}|\xi_1'\xi_2'\rangle_\pm = \pm U(t,t_0)|\xi_1'\xi_2'\rangle_\pm \ . \tag{9.9}$$

Notemos que $|\xi_1'\xi_2'\rangle_+$ es completamente simétrico bajo los intercambios de las dos partículas mientras que $|\xi_1'\xi_2'\rangle_-$ es completamente antisimétrico. Dado N arbitrario podemos construir fácilmente los estados completamente simétricos y antisimétricos,

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_{ij}|\xi_1'...\xi_i'...\xi_j'...\xi_N'\rangle_+ &= +|\xi_1'...\xi_j'...\xi_i'...\xi_N\rangle_+ \ ,\\ \mathcal{P}_{ij}|\xi_1'...\xi_i'...\xi_j'...\xi_N'\rangle_- &= -|\xi_1'...\xi_j'...\xi_i'...\xi_N\rangle_- \ ,\end{aligned} \tag{9.10}$$

$|\rangle_+$ es totalmente simétrico bajo el intercambio de dos partículas cualesquiera mientras que $|\rangle_-$ es totalmente antisimétrico bajo dicho intercambio. Fijémonos que tales estados físicos son invariantes bajo una permutación arbitraria, ya que los vectores transformados son proporcionales a los iniciales. La construcción de dichos estados es directa,

$$\begin{aligned}|\xi_1'...\xi_i'...\xi_j'...\xi_N'\rangle_+ &= \mathcal{C}\sum_\sigma |\xi'_{\sigma(1)}\xi'_{\sigma(2)}...\xi'_{\sigma(N)}\rangle \ ,\\ |\xi_1'...\xi_i'...\xi_j'...\xi_N'\rangle_- &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_\sigma \epsilon(\sigma)|\xi'_{\sigma(1)}\xi'_{\sigma(2)}...\xi'_{\sigma(N)}\rangle \ ,\end{aligned} \tag{9.11}$$

donde σ es una permutación arbitraria de N elementos y la suma se extiende sobre las $N!$ distintas permutaciones. En la expresión anterior, cuando todos los estados monoparticulares $|\xi_1'\rangle...|\xi_N'\rangle$ son distintos, se tiene que $\mathcal{C}=1/\sqrt{N!}$, de lo contrario $\mathcal{C}$ debe ser calculada explícitamente. Por otra parte, en la última suma, $\epsilon(\sigma)$ es la signatura de la permutación σ. Como ya se ha indicado anteriormente en (9.9), para el caso específico de dos partículas, dichas propiedades simples de transformación bajo el intercambio de partículas se conserva en la evolución temporal puesto que $[\mathcal{P},H]=0$.

Construyamos los estados $|\rangle_+$ y $|\rangle_-$ de (9.11) para $N=3$, empleando tres orbitales mutuamente distintos,

$$|\xi_1'\xi_2'\xi_3'\rangle_\pm = \frac{1}{\sqrt{3!}}\left(|\xi_1'\xi_2'\xi_3'\rangle \pm |\xi_2'\xi_1'\xi_3'\rangle \pm |\xi_1'\xi_3'\xi_2'\rangle \pm |\xi_3'\xi_2'\xi_1'\rangle + |\xi_2'\xi_3'\xi_1'\rangle + |\xi_3'\xi_1'\xi_2'\rangle\right) \ , \tag{9.12}$$

y por supuesto,

$$\mathcal{P}_{ij}U(t,t_0)|\xi_1'\xi_2'\xi_3'\rangle_\pm = \pm U(t,t_0)|\xi_1'\xi_2'\xi_3'\rangle_\pm \ . \tag{9.13}$$

Junto con los estados $|\xi_1'...\xi_N'\rangle_\pm$, podemos también construir $N!-2$ estados extra a partir de $|\xi_1'...\xi_N'\rangle$, permutando las partículas entre ellas. Estos $N!-2$ estados no tienen propiedades simples bajo la actuación del grupo de permutaciones y se descomponen en varias representaciones irreducibles, es decir, en subgrupos cerrados bajo la actuación de dicho grupo. Sólo para $N=2$, estos estados con propiedades de transformación más complicadas no aparecen. Los estados antisimétricos $|\xi_1'...\xi_N'\rangle_-$, expresados en la base producto directo de orbitales monoparticulares, se pueden construir en forma de determinante,

$$|\xi_1'\xi_2'....\xi_N'\rangle_- = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} |\xi_1'\rangle_1 & |\xi_1'\rangle_2 & ... & |\xi_1'\rangle_N \\ |\xi_2'\rangle_1 & |\xi_2'\rangle_2 & ... & |\xi_2'\rangle_N \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ . & . & & . \\ |\xi_N'\rangle_1 & |\xi_N'\rangle_2 & ... & |\xi_N'\rangle_N \end{vmatrix} \ . \tag{9.14}$$

Son los denominados determinantes de Slater.

Degeneración de intercambio. Dado que H y $\mathcal{P}$ conmutan, $[H,\mathcal{P}]=0$, entonces si $|\Psi\rangle$ es un autoestado de H con energía definida E_Ψ, $\mathcal{P}|\Psi\rangle$ es también un autovector de H con la misma energía,

$$H\mathcal{P}|\Psi\rangle = \mathcal{P}H|\Psi\rangle = E_\Psi \mathcal{P}|\Psi\rangle \ . \tag{9.15}$$

De este modo, si $\mathcal{P}|\Psi\rangle \neq e^{i\nu}|\Psi\rangle$, entonces el autovalor E_Ψ está degenerado. Dicha degeneración se denomina de intercambio.

Ejemplo. Sean tres partículas y sólo dos orbitales distintos, ϕ_a y ϕ_b. Mediante el intercambio de las tres partículas podemos construir los siguientes estados distintos:

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= \phi_b(1)\phi_a(2)\phi_a(3) \ , \\
\Psi_2 &= \phi_a(1)\phi_b(2)\phi_a(3) \ , \\
\Psi_3 &= \phi_a(1)\phi_a(2)\phi_b(3) \ .
\end{aligned} \tag{9.16}$$

De estos estados base podemos formar combinaciones lineales con propiedades más simples de transformación bajo una permutación. Éstos son:

$$\begin{aligned}
\Psi_S &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\Psi_1+\Psi_2+\Psi_3\right) \ , \\
\Psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\Psi_1-\Psi_2-\Psi_3\right) \ , \\
\Psi_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_2-\Psi_3\right) \ ,
\end{aligned} \tag{9.17}$$

Notemos que Ψ_S es el estado completamente simétrico y, en nuestro ejemplo presente, el estado completamente antisimétrico es cero dado que que tenemos dos orbitales iguales.

Es directo comprobar que Ψ_S no se transforma bajo una permutación arbitraria y que $\{\Psi_4,\Psi_5\}$ se transforman entre ellos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{23}\Psi_4 &= \Psi_4 \ , \\
\mathcal{P}_{23}\Psi_5 &= -\Psi_5 \ , \\
\mathcal{P}_{12}\Psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\Psi_2-\Psi_1-\Psi_3\right) = -\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(2\Psi_1-\Psi_2-\Psi_3\right) - \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\Psi_2+\Psi_3\right) \\
&+ \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\Psi_1-\Psi_3\right) = -\frac{1}{2}\Psi_4 + \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{3}{2}\Psi_2-\frac{3}{2}\Psi_3\right) = -\frac{1}{2}\Psi_4+\frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_5 \ , \\
\mathcal{P}_{13}\Psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\Psi_3-\Psi_2-\Psi_1\right) = -\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(2\Psi_1-\Psi_2-\Psi_3\right) - \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\Psi_2+\Psi_3\right) \\
&+ \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2\Psi_3-\Psi_2\right) = -\frac{1}{2}\Psi_4 + \frac{1}{\sqrt{6}}\left(-\frac{3}{2}\Psi_2+\frac{3}{2}\Psi_3\right) = -\frac{1}{2}\Psi_4-\frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_5 \ .
\end{aligned} \tag{9.18}$$

Para llegar a estas expresiones téngase en cuenta que $\mathcal{P}_{23}\Psi_2=\phi_a(1)\phi_a(2)\phi_b(3)=\Psi_3$, $\mathcal{P}_{23}\Psi_1=\Psi_1$, $\mathcal{P}_{23}\Psi_3=\Psi_2$. Análogamente $\mathcal{P}_{12}\Psi_1=\Psi_2$, $\mathcal{P}_{12}\Psi_2=\Psi_1$, $\mathcal{P}_{12}\Psi_3=\Psi_3$, $\mathcal{P}_{13}\Psi_1=\Psi_3$, $\mathcal{P}_{13}\Psi_2=\Psi_2$ y $\mathcal{P}_{13}\Psi_3=\Psi_1$.

Como consecuencia de estas propiedades de transformación bajo $\mathcal{P}$ y aprovechando que $[H,P]=0$, se demuestra que

$$\langle\Psi_S|H|\Psi_{4,5}\rangle=0~. \tag{9.19}$$

Por una parte,

$$\langle\Psi_S|H|\Psi_5\rangle=\langle\Psi_S|\mathcal{P}_{23}H\mathcal{P}_{23}^{-1}|\Psi_5\rangle=-\langle\Psi_S|H|\Psi_5\rangle~, \tag{9.20}$$

y por tanto

$$\langle\Psi_S|H\Psi_5\rangle=0~. \tag{9.21}$$

Por otra parte,

$$\langle\Psi_S|H|\Psi_4\rangle=\langle\Psi_S|\mathcal{P}_{12}H\mathcal{P}_{12}^{-1}|\Psi_4\rangle=-\frac{1}{2}\langle\Psi_S|H|\Psi_4\rangle~, \tag{9.22}$$

donde también hemos tenido en cuenta (9.21). De (9.22) se deduce igualmente que,

$$\langle\Psi_S|H|\Psi_4\rangle=0~. \tag{9.23}$$

De este modo el Hamiltoniano queda expresado como una matriz diagonal a bloques en los subespacios Ψ_S y $\{\Psi_4,\Psi_5\}$. Pero de hecho el Hamiltoniano queda diagonalizado en esta base dado que,

$$\begin{aligned}\langle\Psi_5|H|\Psi_4\rangle &= \langle\Psi_5|\mathcal{P}_{23}H\mathcal{P}_{23}^{-1}|\Psi_4\rangle=-\langle\Psi_5|H|\Psi_4\rangle=0~,\\ \langle\Psi_4|H|\Psi_4\rangle &= \langle\Psi_4|\mathcal{P}_{12}H\mathcal{P}_{12}^{-1}|\Psi_4\rangle=\frac{1}{4}\langle\Psi_4|H|\Psi_4\rangle+\frac{3}{4}\langle\Psi_5|H|\Psi_5\rangle~,\end{aligned} \tag{9.24}$$

y por tanto,

$$\langle\Psi_5|H|\Psi_5\rangle=\langle\Psi_4|H|\Psi_4\rangle~. \tag{9.25}$$

Con todo ello, el Hamiltoniano se puede escribir como:

$$H=\left[\begin{array}{ccc} E_S & 0 & \\ 0 & E_2 & 0\\ 0 & 0 & E_2\end{array}\right] \tag{9.26}$$

siendo $E_s=\langle\Psi_S|H|\Psi_S\rangle$ y $E_2=\langle\Psi_4|H|\Psi_4\rangle$. Este resultado no es más que una muestra del teorema general que afirma que dados dos observables que conmutan siempre es posible diagonalizarlos simultáneamente [1]. En general, como consecuencia de la degeneración de intercambio (9.15), todos los estados conectados por $\mathcal{P}$ tienen la misma energía, y esto se aplica en nuestro ejemplo al conjunto $\{\Psi_4,\Psi_5\}$. Los conjuntos de estados que no resultan conectados entre sí por $\mathcal{P}$ son en general no degenerados, salvo presencia de degeneración accidentalmente, al menos respecto a la simetría de intercambio de partículas idénticas.

9.2. Conexión espín-estadística

Experimentalmente se ha determinado que dado un sistema de N partículas idénticas su estado ha de ser completamente simétrico o antisimétrico bajo el intercambio de dos cualesquiera de sus partículas. Además esta propiedad es independiente del número N de partículas y sólo depende del tipo de partícula.

Aquellas partículas cuyo estado ha de ser completamente simétrico se dice que obedecen la estadística de Bose-Einstein y se llaman <u>bosones</u>. Aquellas otras partículas cuyo estado es completamente antisimétrico se dice que obedecen la estadística de Fermi y se llaman <u>fermiones</u>.

Existe una conexión biunívoca entre el espín de una partícula y la estadística que obedece, así partículas con espín semientero son fermiones y partículas con espín entero son bosones. Las primeras obedecen la estadística de Fermi y las segundas la de Bose. Pauli probó que las teorías cuánticas relativistas sólo son consistentes si las partículas de espín semientero son fermiones y las de espín entero son bosones.

El <u>principio de exclusión de Pauli</u> es una consecuencia de la estadística de Fermi. Recordemos que tal principio afirma que dos electrones en un sistema dado no pueden ocupar el mismo orbital. Si dos orbitales son iguales y, dado que el estado debe ser totalmente antisimétrico puesto que los electrones son fermiones, la única solución es que sea cero.

<u>Sistemas compuestos</u>. Consideremos sistemas ligados con dimensiones típicas espaciales mucho menores que aquellas que estamos explorando con nuestros experimentos. Por ejemplo, el núcleo atómico, $\sim 10^{-15}\ m$, desde el punto de vista de la física atómica, $10^{-10}\ m$, o los átomos desde el punto de vista de la termodinámica o mecánica estadística. Estos sistemas se comportan como "partículas" y según su momento angular total sea entero o semientero, número par o impar de fermiones constituyentes, respectivamente, seguirán la estadística de Bose (bosones) o de Fermi (fermiones). Por ejemplo, el ^4He tiene espín nulo, es por lo tanto un bosón, y a bajas temperaturas exhibe superfluidez. Por el contrario, el ^3He tiene espín $1/2$, es un fermión, y su comportamiento a bajas energías es completamente distinto. El átomo de ^4He se compone de 2 neutrones(n), 2 protones(p) y 2 electrones(e^-), mientras que el átomo de ^3He consta de 1 n, 2 p y 2 e^-. Así pues, si intercambiamos la posición de dos ^4He, estamos intercambiando uno a uno los 6 fermiones de un ^4He al otro. Para el ^3He sólo hay 1 n por núcleo y queda un único par que da lugar a un signo menos.

A la regla enunciada en el párrafo anterior sobre la clasificación de sistemas compuestos como fermiones y bosones a partir de su espín, existe la siguiente excepción: Si las interacciones son tales que permiten que las componentes de estos sistemas compuestos se rearreglen entre ellos, debido por ejemplo a que aumentamos la energía de dichos sistemas tal que éstos se pueden aproximar más, entonces, estos estados compactos dejan de ser "partículas" y hay que estudiar los sistemas desde sus constituyentes elementales y, a ese nivel, aplicar la simetría de partículas idénticas.

Como ejemplo consideremos la figura 9.2 donde se representa una partícula α que es un núcleo atómico de ^4He compuesto de dos protones (diagramáticamente indicados por los círculos rellenos) y por dos neutrones (círculos vacíos). Debido a que los protones tienen carga $+e$ y los neutrones son neutros, las partículas α tienen cargas $+2e$ con lo que para aproximar dichas partículas lo suficiente, de modo que se solapen sus funciones de onda, hay que vencer la repulsión Coulombiana de origen electrostático. Eso, obviamente, requiere una energía mínima, de modo que para energías mucho menores, podemos considerar ambas partículas como bosones elementales, dado que su espín es nulo. En la sección 9.5 se estudia con más detalle el intercambio de los fermiones constituyentes de una partícula α, tomando éstos como grados de libertad.

<u>Mecánica estadística.</u> Cuando es útil emplear la base de orbitales monoparticulares, esto es,

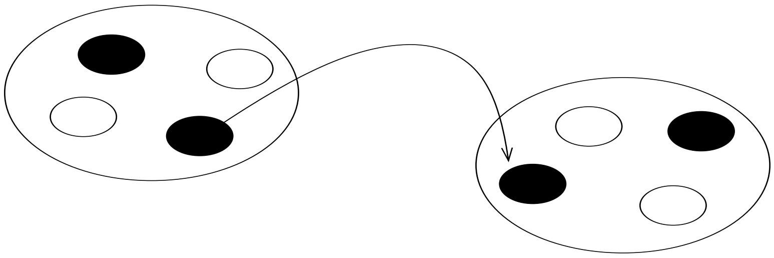

Figura 9.2: Rearreglo de los constituyentes en los núcleos de ^{4}He, o partículas α, debido a que para energías suficientemente altas se pueden poner lo suficientemente próximas tal que se solapen sus funciones de onda, venciendo la energía de repulsión Coulombiana. En la figura se representa el intercambio aislado de dos protones.

cuando las partículas son débilmente interactuantes y se pueden emplear en buena aproximación los orbitales monoparticulares para caracterizar el estado, entonces no se necesita escribir la función de onda sino que basta con especificar el número de partículas en cada orbital. Éste es el método de la mecánica estadística. Se especifican los números de ocupación n_a, n_b, ... de los orbitales a, b, ... Si el estado o función de onda es antisimétrico los números de ocupación sólo pueden ser 0 o 1. Es la estadística de Fermi. Para un estado totalmente simétrico cualquier número de ocupación es posible, es la estadística de Bose. En ambos casos hay una correspondencia unívoca entre los números de ocupación y la función de onda.

Determinación experimental de la simetría de intercambio.

Espectroscopía rotacional. Consideremos los estados de movimiento espacial de dos núcleos en una molécula homonuclear (mismo tipo de núcleos). Por ejemplo, la molécula $^{12}C_2$ se compone de dos átomos de ^{12}C, que son bosones.

Sea un sistema de dos partículas idénticas de espín nulo, con función de onda,

$$\phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\Phi(\vec{R})\psi(\vec{r}_1-\vec{r}_2)~, \tag{9.27}$$

siendo $\Phi(\vec{R})$ la función de onda del CM y $\psi(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$ la función de ondas asociada al movimiento relativo de ambas partículas que desarrollamos en base de momento angular orbital definido,

$$\psi(\vec{r}_1-\vec{r}_2)=\sum_{n,\ell,m} C_{n\ell m}\, R_{n\ell}(r) Y_\ell^m(\hat{r})~. \tag{9.28}$$

Bajo el intercambio de las dos partículas,

$$\begin{aligned}
\Phi(\vec{R}) &\rightarrow \Phi(\vec{R})~,\\
R_{n\ell}(r) &\rightarrow R_{n\ell}(r)~,\\
Y_\ell^m(\hat{r}) &\rightarrow Y_\ell^m(-\hat{r})=(-1)^\ell Y_\ell^m(\hat{r})~.
\end{aligned} \tag{9.29}$$

Se sigue, por lo tanto, que si las dos partículas idénticas son bosones, ℓ ha de ser par en (9.28) para que la función de onda sea simétrica bajo el intercambio de las dos partículas. Si son fermiones, ℓ ha de ser impar en (9.28) para que sea antisimétrica. Para el caso de la molécula $^{12}C_2$, se determina experimentalmente, mediante el análisis del espectro de los estados rotacionales del movimiento de los dos núcleos, que ℓ es siempre par de acuerdo a que el núcleo de ^{12}C es un bosón.

Otro caso relevante es el de la molécula de $^{3}H_2$, aquí el espectro sólo contiene ℓ impar mostrando que los núcleos de ^{3}H son partículas idénticas de espín semientero o fermiones. De hecho, su espín es 1/2.

Si los núcleos no fuesen idénticos, no tendríamos esta clara caracterización en los espectros rotacionales. Esto es un argumento muy fuerte contra la existencia de variables ocultas ya que si estas variables existiesen, aun cuando no tuviesen influencia en la energía y dinámica estadística del sistema, todavía modificarían la simetría de la función de onda respecto al intercambio de sistemas idénticos. Pero dado que la mecánica cuántica nos dice cuándo éstos son idénticos, tal y como se verifica experimentalmente, se sigue que dichas variables ocultas son totalmente superfluas, al menos para el régimen de energías para el que dichos sistemas se comportan como elementales. Ya veremos más adelante las desigualdades de Bell que han proporcionado un método para descartar experimentalmente la existencia de variables ocultas.

Otra importante aplicación de la simetría de intercambio de partículas idénticas, fue descartar el modelo electrónico del núcleo atómico, anterior al descubrimiento del neutrón, estudiando el espectro de la molécula homonuclear $^{14}N_2$. El modelo electrónico del núcleo atómico establece que el núcleo de ^{14}N se compone de 14 p y 7 e^-, hoy en día sabemos que el núcleo de ^{14}N se compone de $7p$ y $7n$. Experimentalmente se establece que su espectro rotacional sólo contiene ℓ pares y por lo tanto es un bosón, tal y como establece la teoría actual y no un fermión, tal y como se deduce de la teoría electrónica del núcleo atómico.

9.3. *Límite clásico

El único modo de distinguir las partículas idénticas clásicamente es seguir sus trayectorias, que están bien definidas. Es la falta de tales trayectorias bien definidas en mecánica cuántica la que da lugar a efectos de intercambio. En particular, si las dos funciones de onda se solapan en el espacio y en el tiempo no se puede, por tanto, distinguir entre las dos órbitas y puede suceder el intercambio de una partícula idéntica por la otra. En el límite clásico los estados son trenes de onda localizados que no se solapan.

Si las dos partículas están descritas por el estado,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi(1,2)\pm\Psi(2,1)\right) ~, \tag{9.30}$$

La densidad de probabilidad es:

$$\frac{1}{2}\left(|\Psi(1,2)|^2+|\Psi(2,1)|^2\pm 2\mathrm{Re}[\Psi(1,2)\Psi(2,1)^*]\right) ~. \tag{9.31}$$

Sólo si hay solapamiento de las dos funciones de onda el término de interferencia persiste en general y hay efectos de intercambio en el espacio de posiciones.

Por ejemplo, tomemos

$$\begin{aligned}\Psi(1,2) &= \phi_1(1)\phi_2(2) ~,\\ \Psi(2,1) &= \phi_2(1)\phi_1(2) ~.\end{aligned} \tag{9.32}$$

Si los orbitales ϕ_1 y ϕ_2 no se solapan, entonces la distribución de probabilidad de encontrar una partícula viene dada por,

$$P(1) = \int d\xi_2 \left(|\Psi(1,2)|^2 + |\Psi(2,1)|^2 \pm 2Re[\Psi(1,2)\Psi^*(2,1)]\right) = \frac{1}{2}\left(|\phi_1(1)|^2 + |\phi_2(1)|^2\right) \; . \quad (9.33)$$

Este resultado coincide con el cálculo clásico para determinar la probabilidad de detectar una partícula entre dos partículas idénticas, de las que no se ha seguido su trayectoria, y se sabe que sólo pueden aparecer en dos regiones disconexas donde las distribuciones de probabilidad, $|\phi_1(1)|^2$ y $|\phi_2(1)|^2$, no se anulan. En (9.33) se integra sobre los grados de libertad continuos y se suma sobre los discretos.

Por el contrario, si hay solapamiento habrá términos de interferencia,

$$\begin{aligned} P(1) &= \int d\xi_2 \left(|\Psi(1,2)|^2 + |\Psi(2,1)|^2 \pm 2Re[\Psi(1,2)\Psi^*(2,1)]\right) \\ &= \frac{1}{2}\left[|\phi_1(1)|^2 + |\phi_2(1)|^2 \pm 2\phi_1(1)\phi_2(1)^* \int d\xi_2 \phi_2(2)\phi_1(2)^*\right] \; , \end{aligned} \quad (9.34)$$

y a no ser que ϕ_1 y ϕ_2 sean dos funciones de onda ortogonales los efectos de interferencia persistirán.

9.4. Propiedades de simetría de la combinación de dos espines de partículas idénticas

Consideremos el estado de momento angular total definido J compuesto de dos estados de momento angular j_1 idénticos.

$$|JM, j_1 j_1\rangle = \sum_{m_1} \langle j_1 m_1 j_1 m_2 | JM\rangle |j_1 m_1 j_1 m_2\rangle \; , \quad (9.35)$$

con $m_2 = M - m_1$. Actuando sobre el estado anterior con $\mathcal{P}_{12}$ resulta:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{12}|JM, j_1 j_1\rangle &= \sum_{m_1} \langle j_1 m_1 j_1 m_2 | JM\rangle |j_1 m_2 j_1 m_1\rangle = \sum_{m_1} (-1)^{2j_1 - J} \langle j_1 m_2 j_1 m_1 | JM\rangle |j_1 m_2 j_1 m_1\rangle \\ &= \sum_{m_1} (-1)^{2j_1 - J} \langle j_1 m_1 j_1 m_2 | JM\rangle |j_1 m_1 j_1 m_2\rangle \; . \end{aligned} \quad (9.36)$$

Por lo tanto,

$$\mathcal{P}_{12}|JM, j_1 j_1\rangle = (-1)^{2j_1 - J} |JM, j_1 j_1\rangle \; . \quad (9.37)$$

Si aplicamos este resultado a la combinación de dos espines idénticos, $\vec{s}_1$, para dar lugar al espín total $\vec{S}$, y además teniendo en cuenta (9.29) referente al movimiento orbital, $(-1)^\ell Y_\ell^m$, tenemos,

$$\mathcal{P}_{12}\left(Y_\ell^m |SM, s_1 s_1\rangle\right) = (-1)^{2s_1 - S} (-1)^\ell Y_m^\ell |SM, s_1 s_1\rangle \; , \quad (9.38)$$

donde s_1 es el espín de las partículas, S es el espín total y M es la tercera componente del espín total. Dado que el estado $\mathcal{P}_{12}\left(Y_\ell^m |SM, s_1 s_1\rangle\right) = \mp Y_\ell^m |SM, s_1 s_1\rangle$, según sea fermiónico o bosónico, respectivamente, ello fijará la suma $\ell + S$ en función de s_1 de acuerdo con (9.38). Así, por ejemplo, para dos protones con $s_1 = 1/2$ se tiene que para $S = 0$, $\ell =$ par, mientras que para $S = 1$, $\ell =$ impar. En el primer caso, tenemos una función de espín antisimétrica con lo que la función de onda orbital tiene que ser simétrica y por tanto ℓ ha de ser par, mientras que en el segundo caso, la función de espín es simétrica y por ende ℓ ha de ser impar.

Retomando de nuevo la discusión para el caso de moléculas homonucleares, consideremos el caso de $^3He_2$ donde cada núcleo tiene $s_1 = 1/2$. Así, si $S = 0$, entonces ℓ es par y si $S = 1$, entonces ℓ es impar. Como para $S = 0$ sólo hay un estado mientras que para $S = 1$ tenemos un triplete de estados, se debe observar el triple de intensidad en las lineas espectrales con ℓ impar respecto a las de ℓ par, como así ocurre.

9.5. *Intercambio de los constituyentes al intercambiar dos partículas α

Sea $\Phi_I(\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2, t)$ la función de onda de una de las partículas α representadas en la figura 9.2, donde las ξ_i se refieren a los grados de libertad (posición y espín) relativos a los protones, mientras que las η_i son los grados de libertad correspondientes a los neutrones. Análogamente $\Phi'_{II}(\xi_3, \xi_4, \eta_3, \eta_4, t)$ es la función de onda de la segunda partícula α.

Dado que tenemos dos partículas α consideramos la base producto directo:

$$\Phi_I(\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2, t)\Phi'_{II}(\xi_3, \xi_4, \eta_3, \eta_4, t)~. \tag{9.39}$$

Al hacer la función de onda totalmente antisimétrica bajo el intercambio de un par de protones o de un par de neutrones entre sí, tenemos:

$$\Psi = const \times \sum_{\sigma_p, \sigma_n} \epsilon(\sigma_p)\epsilon(\sigma_n)\Phi_I(\xi_{\sigma_p(1)}, \xi_{\sigma_p(2)}, \eta_{\sigma_n(1)}, \eta_{\sigma_n(2)}, t)\Phi'_{II}(\xi_{\sigma_p(3)}, \xi_{\sigma_p(4)}, \eta_{\sigma_n(3)}, \eta_{\sigma_n(4)}, t)~. \tag{9.40}$$

Si las partículas α están mucho más separadas que las distancias típicas de sus tamaños, alrededor de $\sim 10^{-13}$ cm, aquellas permutaciones que hagan que uno de los protones, por ejemplo, pase de la partícula α II a la I, no darán contribución ya que la función de onda resultante será prácticamente nula pues los protones dentro de una misma partícula α estarían mucho más separados que las distancias típicas de su tamaño. Sólo aquellas permutaciones que intercambien los p y n dentro de una misma partícula α, o aquellas otras que intercambien en bloque todos los p y n de una partícula α a la otra, son las que finalmente darán contribución. Dado que las funciones de onda Φ_I y Φ'_{II} ya son funciones de onda antisimetrizadas bajo el intercambio interno de los p y n, sólo hay que considerar la segunda posibilidad,

$$\Psi = const\,(\Phi_I(\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2, t)\Phi'_{II}(\xi_3, \xi_4, \eta_3, \eta_4, t) + \Phi'_{II}(\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2, t)\Phi_I(\xi_3, \xi_4, \eta_3, \eta_4, t)) \tag{9.41}$$

Esta es la prescripción que dimos anteriormente en el subapartado de sistemas compuestos de la sección 9.2 para determinar cuándo un sistema compuesto se comportaría como un bosón o fermión de acuerdo con su espín. En este caso, el signo más en la suma se obtiene debido a que hemos cambiado en bloque los dos protones y neutrones con lo que el producto de signaturas es más. La función de onda resultante en (9.41) es simétrica, como ya esperábamos, dado que las partículas α contienen un número par de fermiones constituyentes y son, por tanto, bosones.

Esto implica que un sistema formado por dos partículas α, que tienen $s_1 = 0$, sólo podrá tener momento angular orbital par y, por tanto, el sistema X resultante de la colisión $\alpha + \alpha \to X$, sólo podrá tener momento angular total par dada la conservación del momento angular total.

9.6. Emisión inducida de fotones

Consideremos una red de átomos, cada uno de ellos está localizado en un nodo de dicha red, y con ello los átomos son distinguibles. Supongamos que n de estos átomos se encuentran en el mismo estado excitado y emiten un fotón retornando al estado fundamental. Por contra, los fotones resultantes no están localizados y por lo tanto son indistinguibles. A los átomos los designamos por A_i y a los fotones por γ_i. Sea $|i\rangle$ el estado inicial de los n átomos excitados,

$$|i\rangle = |A_1^* A_2^* ... A_n^*\rangle \ , \tag{9.42}$$

y $|f\rangle$ el estado final del sistema átomos+fotones,

$$|f\rangle = |A_1 ... A_n \, \gamma_1 ... \gamma_n\rangle \ . \tag{9.43}$$

Calculemos la probabilidad de transición empleando teoría de perturbaciones dependiente del tiempo (serie de Dyson en la imagen de interacción) tal y como vimos en la sección 3.3.

$$P = |\langle A_1 ... A_n \, \gamma_1 ... \gamma_n | U_s(t) | A_1^* ... A_n^* \rangle|^2 \ , \tag{9.44}$$

teniendo en cuenta que en la imagen de interacción $U_I = e^{iH_0 t/\hbar} U_S(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$, tenemos:

$$\begin{aligned}
P &= |\langle A_1 ... A_n \, \gamma_1 ... \gamma_n | e^{iH_0 t/\hbar} U_I(t) e^{-iH_0 t/\hbar} | A_1^* ... A_n^* \rangle|^2 = |\langle A_1 ... A_n \, \gamma_1 ... \gamma_n | U_I(t) | A_1 ... A_n \rangle|^2 \\
&= |\langle A_1 ... A_n \, \gamma_1 ... \gamma_n | 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_I'(t') dt' + ... | A_1^* ... A_n^* \rangle|^2 \\
&= \frac{1}{\hbar^2} |\langle A_1 ... A_n \gamma_1 ... \gamma_n | \int_0^t H_I'(t') dt' | A_1^* ... A_n^* \rangle|^2 \ .
\end{aligned} \tag{9.45}$$

Supongamos que la probabilidad de emitir un fotón por un átomo es independiente del átomo (todos ellos se encuentran en un mismo estado que se desexcita emitiendo un γ). Designamos dicha probabilidad elemental por $|\langle A\gamma | \mathcal{O}_1 | A^* \rangle|^2$, y dado que:

- El fotón 1 se puede emitir desde cualquiera de los n átomos.
- El fotón 2 se podrá emitir desde cualquiera de los otros $n-1$ átomos
  .
  .
  .
- El fotón n sólo se podrá emitir del átomo que quede sin emitir.

De este modo P viene dada por,

$$P = \frac{1}{n!} |n(n-1)...(n-2)\langle A\gamma|\mathcal{O}_1|A^*\rangle|^2 \ , \tag{9.46}$$

donde el factor $1/n!$ procede de la normalización de la función bosónica completamente simétrica de los n fotones. La fórmula (9.46) la podemos reescribir como:

$$P = \frac{(n!)^2}{n!} |\langle A\gamma|\mathcal{O}_1|A^*\rangle|^2 = n! \times \begin{pmatrix} \text{probabilidad} \\ \text{elemental} \end{pmatrix} \ . \tag{9.47}$$

Así, mientras que según consideraciones clásicas se esperaría que dicha probabilidad se incrementase linealmente con el número de átomos emitentes, vemos que debido al modo particular de calcular probabilidades en MC, a partir de amplitudes de probabilidad, el factor de aumento final es $n!$. Ésta es la base física del funcionamiento de un láser.

9.7. *Medidas de correlaciones de espín y desigualdades de Bell

Correlaciones en los estados singlete de espín. Consideremos dos partículas de espín 1/2, por ejemplo dos electrones, con espín total $S = 0$:

$$|S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\hat{z}+, \hat{z}-\rangle - |\hat{z}-, \hat{z}+\rangle \right) \ . \tag{9.48}$$

Si medimos $\vec{S} \cdot \hat{z} = S_z$ de uno de los electrones, hay un 50 % de probabilidad de obtener el espín arriba/abajo. Sin embargo, una vez determinada la proyección del espín de una de la partículas sabemos con certeza que la proyección del espín de la otra partícula es la opuesta, dado que se selecciona uno u otro de los estados $|\hat{z}+, \hat{z}-\rangle$ o $|\hat{z}-, \hat{z}+\rangle$. Es de destacar que estas correlaciones persisten incluso si las partículas están muy separadas, como sucede por ejemplo entre los dos muones (μ) que resultan de la desintegración de una partícula η,

$$\eta \to \mu^+ \mu^- \ , \tag{9.49}$$

donde el espín de la η es $s_\eta = 0$ y el espín de los dos muones μ es $s_1 = s_2 = 1/2$. En este caso, los dos espines de los muones se correlacionan también con $S = 0$, dado que sólo la onda parcial $\ell = 0$ está permitida debido a la conservación simultánea de paridad ($P_\eta = -1$ y el μ^+ es la antipartícula del μ^-) y de momento angular total, para así tener $J = s_\eta = 0$. Otro ejemplo de correlación de espines es la colisión de protones a baja energía, $pp \to pp$, donde $\ell = 0$ y, por lo tanto, dado que son fermiones $S = 0$ para que la función de onda total del sistema sea antisimétrica, empleando la notación espectroscópica, $^{2S+1}L_J$, el par de protones final está en el estado $^1S_0$. De nuevo esta correlación se mantiene después de la interacción y aunque los p se hayan separado enormemente (distancias macroscópicas).

Consideremos dos observadores A y B que miden el espín de las dos partículas, tal y como se representa en la figura 9.3. Los observadores se dibujan diametralmente opuestos puesto que

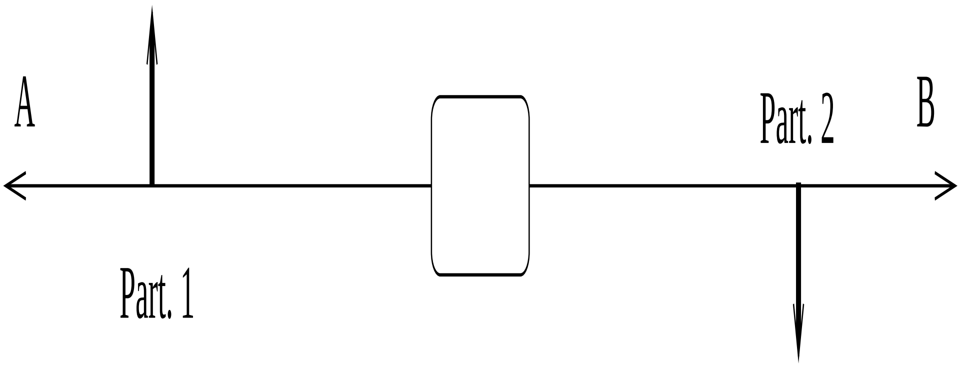

Figura 9.3: Dos observadores A y B observan dos partículas correlacionadas con espín total nulo.

en el sistema del CM las dos partículas viajan con momentos opuestos. Los observadores no sólo miden S_z sino también S_x. En términos de autoestados de S_x el estado (9.48) se expresa de forma análoga :

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\hat{x}^+,\hat{x}^-\rangle - |\hat{x}^-,\hat{x}+\rangle\right) \ . \tag{9.50}$$

A continuación expresamos los resultados de las mediciones de B sobre el estado (9.48) en función de la medición realizada por A:

1. A mide S_z, B mide S_x,

$$\left.\begin{array}{ll} + \rightarrow & \left\{\begin{array}{ll} + & 50\,\% \\ - & 50\,\% \end{array}\right. \\ - \rightarrow & \left\{\begin{array}{ll} + & 50\,\% \\ - & 50\,\% \end{array}\right. \end{array}\right\} \text{, no hay correlación.}$$

2. A mide S_x, B mide S_x

$$\begin{array}{ll} + \rightarrow & \text{-}\ 50\,\% \\ - \rightarrow & +\ 50\,\% \end{array} \text{, total correlación (anticorrelación).}$$

3. A no hace ninguna medida, B mide S_x y observa $50\,\%$ de probabilidad de obtener arriba o abajo. B también mide S_z y de nuevo obtiene que el $50\,\%$ de las medidas corresponden a tener la componente hacia arriba y el otro $50\,\%$ hacia abajo.

Recordemos que A y B pueden encontrarse arbitrariamente lejos uno del otro. El observador A puede decidir cómo orientar su aparato de medida cuando quiera, en particular cuando las partículas estén muy separadas. Sin embargo, todo sucede como si 2 conociese cuál es la componente de espín medida de la partícula 1.

El principio de localidad de Einstein y las desigualdades de Bell.

Principio de localidad de Einstein: La situación del sistema S_2 es independiente de lo que le ocurra al sistema S_1 cuando estén separados espacialmente, tal que $c^2(\Delta t)^2 - (\Delta r)^2 < 0$, siendo Δt y Δr la separación en el tiempo y en el espacio de ambos sistemas.

Componente medida por A	A Resultado	Componente medida por B	B Resultado
z	$+$	z	$-$ 100 %
z	$-$	z	$+$ 100 %
x	$+$	x	$-$ 100 %
x	$-$	x	$+$ 100 %
z	$+$	x	$-$ 50 %
z	$+$	x	$-$ 50 %
etc	etc	etc	etc

Cuadro 9.1: Tabla de correlación entre las medidas de espín de A y B. Esta tabla puede ser reproducida tanto a nivel cuántico como clásico, respetándose el principio de localidad de Einstein.

De hecho, lo dicho hasta ahora sobre las correlaciones de espín para estados singletes no es tan extraordinario. Podemos pensar clásicamente que el sistema ha resultado de un filtro tal que globalmente $S_z = 0$. Así, si en A se mide que la tercera componente de espín es $\hat{z}+$, en B debe de ser $\hat{z}-$. Lo novedoso es que en B podemos decidir medir también S_x. Pero incluso en este caso diríamos que tenemos partículas $|\hat{z}+,\hat{x}+\rangle$ y que, por tanto, la otra tiene que ser $|\hat{z}-,\hat{x}-\rangle$. Pero a cada partícula le estamos asignando valores fijos relacionados con observables no compatibles, tal y como se hace clásicamente. Aunque, tal y como discutimos en el segundo capítulo, no se dice con esto que se pueda medir simultáneamente S_x y S_z, sino que el resultado de la medida está prefijado tanto si se mide S_x como si se mide S_z. De hecho, así obtenemos la misma tabla de correlación 9.1 que a nivel cuántico.

Es por ello, que se podría pensar que las dificultades inherentes con la naturaleza estadística de la mecánica cuántica se podrían superar introduciendo nuevas variables deterministas, las así llamadas variables ocultas, estando en acuerdo manifiesto con el principio de localidad de Einstein. Ya hemos discutido en la sección 9.2 que, a la luz del comportamiento de los estados de partículas idénticas, estas variables ocultas parecen resultar superfluas.

Sin embargo, el modelo clásico determinista conduce a predicciones distintas al caso cuántico para situaciones más complicadas. Tomemos 3 vectores unitarios $\hat{a}$, $\hat{b}$ y $\hat{c}$, que en general no son mutuamente ortogonales. Supongamos que una de las partículas es $(\hat{a}-,\hat{b}+,\hat{c}+)$, es decir tiene componente de espín según la dirección $\hat{a}$ hacia abajo, hacia arriba según $\hat{b}$ y hacia arriba también respecto de $\hat{c}$. Debe haber un ajuste perfecto para que el espín sea cero, así que la otra partícula será $(\hat{a}+,\hat{b}-,\hat{c}-)$, según el modelo clásico que estamos siguiendo. En la tabla 9.2 consideramos todas las posibles combinaciones de direcciones medidas de espín según los tres vectores unitarios para las dos partículas. En la columna de más a la izquierda se indica el número de sucesos medidos para cada caso. Con esta notación, la probabilidad de tener la partícula 1 en $(\hat{a}+,\hat{b}+,\hat{c}+)$ es $N_1/\sum_{i=1}^8 N_i$, y análogamente para el resto de los casos.

Además tenemos el siguiente tipo de desigualdades:

$$N_3 + N_4 \leq (N_2 + N_4) + (N_3 + N_5) \ . \tag{9.51}$$

Si $P(\hat{a}+,\hat{b}+)$ es la probabilidad de que A mida $+$ para $\vec{S}_1 \cdot \hat{a}$ y el observador B mida también $+$

Número	Partícula 1	Partícula 2
N_1	$(\hat{a}+, \hat{b}+, \hat{c}+)$	$(\hat{a}-, \hat{b}-, \hat{c}-)$
N_2	$(\hat{a}+, \hat{b}+, \hat{c}-)$	$(\hat{a}-, \hat{b}-, \hat{c}+)$
N_3	$(\hat{a}+, \hat{b}-, \hat{c}+)$	$(\hat{a}-, \hat{b}+, \hat{c}-)$
N_4	$(\hat{a}+, \hat{b}-, \hat{c}-)$	$(\hat{a}-, \hat{b}+, \hat{c}+)$
N_5	$(\hat{a}-, \hat{b}+, \hat{c}+)$	$(\hat{a}+, \hat{b}-, \hat{c}-)$
N_6	$(\hat{a}-, \hat{b}+, \hat{c}-)$	$(\hat{a}+, \hat{b}-, \hat{c}+)$
N_7	$(\hat{a}-, \hat{b}-, \hat{c}+)$	$(\hat{a}+, \hat{b}+, \hat{c}-)$
N_8	$(\hat{a}-, \hat{b}-, \hat{c}-)$	$(\hat{a}+, \hat{b}+, \hat{c}+)$

Cuadro 9.2: Estados posibles de espín para dos partículas y tres ejes de medición de la componente de espín tal que el espín total sea nulo. Modelo clásico.

para $\vec{S}_2 \cdot \hat{b}$, se sigue,

$$\begin{aligned} P(\hat{a}+;\hat{b}+) &= \frac{N_3+N_4}{\sum_i N_i} ~, \\ P(\hat{a}+;\hat{c}+) &= \frac{N_2+N_4}{\sum_i N_i} ~, \\ P(\hat{c}+;\hat{b}+) &= \frac{N_3+N_7}{\sum_i N_i} ~, \end{aligned} \tag{9.52}$$

teniendo en cuenta (9.51) se sigue que:

$$P(\hat{a}+;\hat{b}+) \leq P(\hat{a}+;\hat{c}+) + P(\hat{c}+;\hat{b}+) ~, \tag{9.53}$$

ésta es una desigualdad de Bell, que se sigue del principio de localidad de Einstein. Este principio se conserva en el modelo clásico, dado que es como si sacáramos bolas de una urna que contiene dos bolas, una negra y otra blanca. Si sabemos una sabemos la otra, pero todo ha sido prefijado de antemano.

Mecánica cuántica y las desigualdades de Bell.

En mecánica cuántica no hablamos de partículas que tienen para S_z y S_x unos valores prefijados, sino que el estado singlete viene caracterizado por un vector (9.48) o (9.50), o análogamente si consideremos autoestados de la componente de espín en cualquier otra dirección. Apliquemos las reglas de la mecánica cuántica para calcular $P(\hat{a}+, \hat{b}+)$. Sea θ_{ab} el ángulo formado por ambos vectores. Tomemos el eje $\hat{x}$ paralelo al vector $\hat{a}$ y el eje $\hat{y}$ paralelo a $\hat{a} \times \hat{b}$. De este modo, podemos escribir, véase la figura 9.4,

$$R_y(\theta_{ab})|\hat{a}+\rangle = |\hat{b}+\rangle = \left[\cos\frac{\theta_{ab}}{2} - i\sin\frac{\theta_{ab}}{2}\sigma_y\right]|\hat{a}+\rangle = \cos\frac{\theta_{ab}}{2}|\hat{a}+\rangle + \mathrm{sen}\frac{\theta_{ab}}{2}|\hat{a}-\rangle ~. \tag{9.54}$$

Si en A detectamos $\hat{a}+$, en B tendremos un estado con $\hat{a}-$ definido, luego la probabilidad de tener un estado $\hat{b}+$ en B es

$$|\langle\hat{a}-|\hat{b}+\rangle|^2 = \mathrm{sen}^2\theta_{ab}/2 ~, \tag{9.55}$$

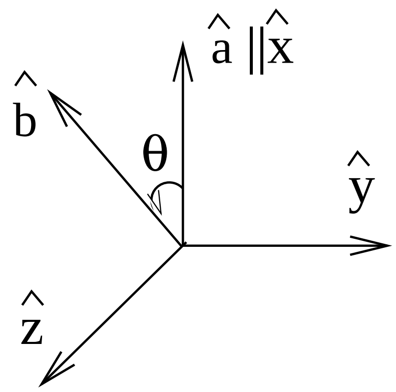

Figura 9.4: El eje $\hat{x}$ es paralelo al vector $\hat{a}$. El eje $\hat{y}$ es paralelo a $\hat{a}\times\hat{b}$.

es decir, $P(\hat{a}+;\hat{b}+)=\text{sen}^2\theta_{ab}/2$. Y la desigualdad de Bell (9.53) implicaría:

$$\text{sen}^2\frac{\theta_{ab}}{2}\leq \text{sen}^2\frac{\theta_{ac}}{2}+\text{sen}^2\frac{\theta_{cb}}{2}~. \tag{9.56}$$

Pero esto **no** ocurre si $\hat{a}$, $\hat{b}$, $\hat{c}$ están en el mismo plano y $\hat{c}$ bisecciona las dos direcciones definidas por $\hat{a}$ y $\hat{b}$,

$$\theta_{ab}=2\theta~,~~\theta_{ac}=\theta_{cb}=\theta~,~~0<\theta<\frac{\pi}{2}~. \tag{9.57}$$

Se tiene,

$$\text{sen}^2\theta\leq \text{sen}^2\frac{\theta}{2}+\text{sen}^2\frac{\theta}{2}\leq 2\text{sen}^2\frac{\theta}{2}~. \tag{9.58}$$

Por ejemplo, para $\theta=\pi/4$, tendríamos que $0{,}5\leq 2\text{sen}^2\pi/8=0{,}292$ y obviamente entramos en una contradicción. Es decir, existen configuramos de los vectores considerados para las que las probabilidades dictadas por la MC no cumplen la desigualdad de Bell (9.53). Esto se ha visto experimentalmente midiendo las correlaciones de espines entre los protones finales en la dispersión de protones a bajas energías, entre otros experimentos. La desigualdad de Bell se ha visto violada por más de 9 desviaciones estándar, mientras que las predicciones cuánticas se han encontrado dentro del margen de los errores experimentales.

De todas formas, el asunto dista mucho de ser una trivialidad. ¿Cómo la partícula 2 sabe de los resultados de 1, si A y B pueden estar separados muchos años luz?. Esto también se ha visto experimentalmente (experimento realizado por A. Aspect). Se cambiaba tan rápidamente el analizador en A que la decisión de A sobre qué medir no podía comunicarse a B con ninguna señal que viajase con una velocidad menor que la de la luz. Sin embargo, esto no se puede utilizar para transmitir ninguna información útil entre dos puntos a velocidades supralumínicas. Supongamos que A y B se ponen de acuerdo para medir S_z. Entonces A midiendo sabe lo que obtiene B, simplemente confirmando la MC. Pero lo sabe porque cuando estaban juntos se comunicaron la información útil. Se podría pensar en una comunicación si A cambiase la orientación de su detector y en lugar de medir S_z midiese S_x. Primero B obtiene un 50 % de $\hat{z}+$ y otro 50 % de $\hat{z}-$. Después de cambiar A su decisión, B seguiría obteniendo lo mismo, no se ha transmitido información.

Parte III

Teoría de Colisiones

Capítulo 10

Consideraciones fundamentales sobre estados de colisión y ligados

Los experimentos de colisiones de un proyectil sobre un blanco han jugado un papel primordial en el descubrimiento de la estructura de la materia tanto a nivel atómico, como nuclear y subnuclear, desde el descubrimiento del núcleo hasta las evidencias más directas sobre la existencia de los quarks que forman los protones y neutrones. En estas dos últimas partes del curso discutimos la teoría cuántica no relativista adecuada para estudiar este tipo de procesos físicos, que también han dado lugar al descubrimiento de los portadores de las interacciones débiles y fuertes, que son parte del modelo actual de las interacciones entre partículas elementales. Acabaremos estudiando las poderosas restricciones que operan sobre las amplitudes de colisión como consecuencia de la invarianza bajo las simetrías espacio-temporales e intercambio de partículas idénticas, estudiadas en los capítulos anteriores.

10.1. *Movimiento libre de un tren de ondas

Comencemos este tema con una revisión del caso más simple de un problema de teoría de colisiones, esto es, cuando el potencial interactuante es nulo. Supongamos un tren de ondas localizado en el espacio, y estudiemos su evolución libre. Sólo al final de este punto supondremos que dicho tren de ondas sea gaussiano.

El Hamiltoniano libre es $H = \vec{p}^{\,2}/2m$ y en la imagen de Heisenberg,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d\vec{x}_t}{dt} &= [\vec{x}_t, H] = e^{iHt/\hbar}[\vec{x}, H]e^{-iHt/\hbar} = e^{iHt/\hbar}\frac{1}{2m}[\vec{x}, \vec{p}^{\,2}]e^{-iHt/\hbar} \\ &= \frac{1}{2m}e^{iHt/\hbar}(i\hbar\vec{p} + \vec{p}i\hbar)e^{-iHt/\hbar} = \frac{i\vec{p}\,\hbar}{m}\ , \end{aligned} \tag{10.1}$$

por tanto:

$$\frac{d\vec{x}_t}{dt} = \frac{\vec{p}}{m}\ . \tag{10.2}$$

La solución de la ecuación diferencial anterior es simplemente:

$$\vec{x}_t = \frac{\vec{p}}{m}t + \vec{x}\ . \tag{10.3}$$

La diferencia de $\vec{x}_t$ respecto a su valor medio, viene dada por:

$$\Delta\vec{x}_t = \vec{x}_t - \langle\vec{x}_t\rangle = \frac{\vec{p}}{m}t + \vec{x} - \frac{\langle\vec{p}\rangle}{m}t - \langle\vec{x}\rangle = \frac{\Delta\vec{p}}{m}t + \Delta\vec{x}~. \tag{10.4}$$

Tomamos el sistema de referencia para el cual $\langle\vec{x}\rangle = \langle\vec{p}\rangle = 0$. Por tanto,

$$\begin{aligned}
\Delta\vec{x}_t &= \frac{\vec{p}}{m}t + \vec{x}~, \\
(\Delta\vec{x}_t)^2 &= \frac{p^2t^2}{m^2} + x^2 + \frac{t}{m}(\vec{p}\vec{x} + \vec{x}\vec{p})~, \\
\langle(\Delta\vec{x}_t)^2\rangle &= \frac{\langle p^2\rangle t^2}{m^2} + \langle x^2\rangle + \frac{t}{m}\langle\vec{p}\vec{x} + \vec{x}\vec{p}\rangle~.
\end{aligned} \tag{10.5}$$

Vemos que la dispersión aumenta cuadráticamente con t. El término lineal lo podemos escribir como:

$$\begin{aligned}
&\int d^3x' \frac{t}{m}\Psi^*(\vec{x}\,',0)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{x}\,'}\vec{x}\,' + \vec{x}\,'(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial\vec{x}\,'}\right)\Psi(\vec{x}\,'0) \\
=\; &\int d^3x'\frac{-i\hbar t}{m}\left(-\frac{\partial\psi^*}{\partial\vec{x}\,'}\vec{x}\,'\Psi + \Psi^*\vec{x}\,'\frac{\partial\Psi}{\partial\vec{x}\,'}\right) = 2t\int d^3x'\vec{x}\,'\vec{j}(\vec{x}\,',0)~.
\end{aligned} \tag{10.6}$$

Por tanto expresamos (10.5) como:

$$\langle(\Delta\vec{x}_t)^2\rangle = \frac{\langle p^2\rangle t^2}{m^2} + \langle x^2\rangle + 2t\int d^3x'\vec{x}\,'\vec{j}(\vec{x}\,',0)~. \tag{10.7}$$

Recordemos que estamos en el sistema de referencia con $\langle\vec{x}\rangle = \langle\vec{p}\rangle = 0$, donde $\Delta\vec{x}_t = \vec{x}_t$ y $\Delta\vec{p} = \vec{p}$. En cualquier sistema de referencia, en virtud de (10.4), tenemos:

$$\langle(\Delta\vec{x})^2\rangle = \frac{\langle(\Delta\vec{p})^2\rangle}{m^2}t^2 + \langle(\Delta\vec{x})^2\rangle + \frac{t}{m}\langle\Delta\vec{p}\Delta\vec{x} + \Delta\vec{x}\Delta\vec{p}\rangle~. \tag{10.8}$$

Para el tren de ondas gaussiano, dado que cumple en $t = 0$ la relación de incertidumbre mínima (ver sección 2.4),

$$\Delta p_i|\mathrm{Gauss}\rangle = \lambda_i\Delta x_i|\mathrm{Gauss}\rangle~, \tag{10.9}$$

con λ imaginario puro, y en el sistema de referencia particular empleado,

$$\langle p_ix_i + x_ip_i\rangle = \langle\lambda^*(\Delta x_i)^2 + \lambda(\Delta x_i)^2\rangle = 0~,\quad \lambda^* = -\lambda~. \tag{10.10}$$

En cualquier otro sistema de referencia,

$$\langle\Delta p_i\Delta x_i + \Delta x_i\Delta p_i\rangle = 0. \tag{10.11}$$

En el tren de ondas gaussiano desaparece, por lo tanto, el término lineal en t y sólo queda,

$$\langle(\Delta\vec{x}_t)^2\rangle = \frac{\langle(\Delta\vec{p})^2\rangle}{m^2}t^2 + \langle(\Delta\vec{x})^2\rangle~. \tag{10.12}$$

Consideremos la contribución del término cuadrático en t, que ciertamente dominará para tiempos suficientemente grandes. En este límite, tomemos el cociente:

$$\frac{\sqrt{\langle(\Delta\vec{x}_t)^2\rangle}}{\sqrt{\langle(\Delta\vec{x})^2\rangle}} = \frac{t\sqrt{\langle(\Delta\vec{p})^2\rangle}}{m\sqrt{\langle(\Delta\vec{x})^2\rangle}} \gtrsim \frac{\hbar t}{m\langle(\Delta\vec{x})^2\rangle} \ . \tag{10.13}$$

Para el caso del tren de ondas gaussiano en lugar de la desigualdad anterior tenemos la igualdad. Si ponemos $m = Nm_p$, con m_p la masa del protón, que es muy aproximadamente igual a la masa del neutrón m_n, siendo protones y neutrones los constituyentes de los núcleos atómicos, tenemos,

$$\frac{t\langle\Delta p\rangle}{m\langle\Delta x\rangle} \sim 6{,}3\times 10^{-4}\frac{t}{N(\langle\Delta x\rangle)^2} \ , \tag{10.14}$$

con t en segundos y $\langle\Delta x\rangle$ en cm. Si $N \sim 10^{23}$, el tiempo necesario para obtener la unidad en la expresión anterior sería tan grande que la dispersión sería insignificante incluso a una escala astronómica. Para una partícula α, $N = 4$ y si la tomamos inicialmente recluida en un núcleo, $\langle\Delta x_{t=0}\rangle \sim 10^{-13}$ cm a 10^{-11} cm, tendríamos la unidad para,

$$t \sim 10^{-22} - 10^{-17} \ seg \ . \tag{10.15}$$

Si la partícula se mueve con $v = c/30$ en una colisión partícula $\alpha-$núcleo, en 10^{-17} segundos habrá recorrido aproximadamente 10^{-8} cm, distancia que alberga muchísimos núcleos ya que éstos poseen un tamaño típico de unos $\sim 10^{-12}$ cm (del orden de $10^{-8}/10^{-12} \sim 10^4$ núcleos) y así a tales velocidades el proceso de ensanchamiento cuántico del tren de ondas es inoperante en el proceso de una colisión individual con un núcleo.

En la ecuación de Schrödinger no aparece ninguna velocidad de propagación, con lo cual no hay frentes de onda abruptos más allá de los cuales la función de onda se anula. No obstante, sí que se pueden construir trenes de onda para los que, durante largos períodos de tiempo, la probabilidad de encontrar la partícula más allá del supuesto frente de ondas es despreciablemente pequeña.

Tomemos el siguiente ejemplo en una dimensión:

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx} A(k) \ , \tag{10.16}$$

siendo

$$A(k) = \frac{A}{(k-k_0+i\kappa)^n} \ , \tag{10.17}$$

con $\kappa > 0$. Mediante el teorema de integración de Cauchy es fácil demostrar que $\Psi(x,0) = 0$ para $x > 0$. Para ello, basta con considerar el contorno de integración para $x > 0$ mostrado en la figura 10.1.

Si $\kappa \ll |k_0|$ tenemos un tren de ondas muy picado alrededor de $k \simeq k_0$, como se comprueba explícitamente tras realizar la integración de (10.16) con $A(k)$ dada en (10.17).

La evolución temporal para $t > 0$ de (10.16) es:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{i(kx-\hbar k^2 t/2m)} A(k) \ , \tag{10.18}$$

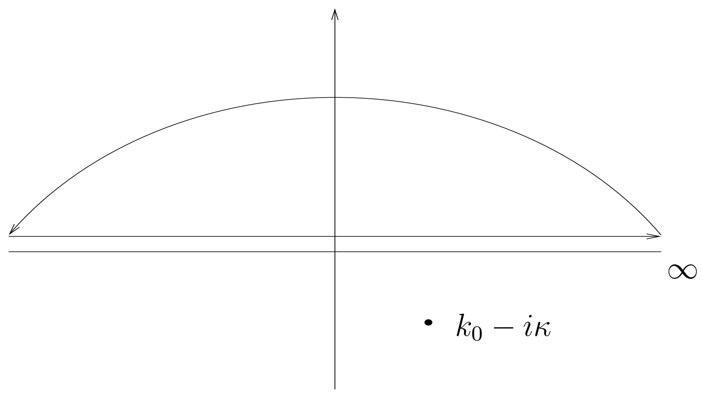

Figura 10.1: Contorno de integración en (10.16) para $x > 0$. También se indica la posición del polo en (10.17).

recordemos que $\hbar k = p$.

En (10.18) no podemos aplicar el teorema de Cauchy siguiendo el contorno de integración de la figura (10.1) dado que aparece el cuadrado de k (en electromagnetismo, donde la energía va como k, tendríamos $ik(x-ct)$ y el frente de ondas seguiría siendo abrupto en $x = ct$). Consideremos los siguientes desarrollos,

$$\begin{aligned} k^2 &= k_0^2 + 2k_0(k-k_0) + \Delta \;, \quad \Delta = (k-k_0)^2 \;, \\ kx - k^2\hbar t/2m &= -k_0^2\hbar t/2m + kx - k_0(k-k_0)\hbar t/m - \Delta\hbar t/2m \\ &= k_0^2\hbar t/2m + k(x - k_0\hbar t/m) - \Delta\hbar t/2m \;. \end{aligned} \tag{10.19}$$

Si despreciamos $\mathcal{O}(\Delta) = \mathcal{O}(\kappa^2)$, dado que $A(k)$ está muy picada alrededor de k_0 esta aproximación es válida para tiempos tales que $t \ll 2m/\hbar\kappa^2 \sim \hbar/\delta E$, tenemos:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\hbar k_0^2 t/2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-v_0 t)} A(k) dk = e^{i\hbar k_0^2 t/2m} \Psi(x - v_0 t, 0) \;, \tag{10.20}$$

y tenemos el frente de onda en $x - v_0 t = 0$, tal que si $x > v_0 t$ la función de onda se anula. El resto de términos descartados en el exponente dan lugar a la deformación del tren de ondas con el tiempo. Haciendo un desarrollo en $\Delta = (k-k_0)^2$ en la expresión (10.18), tendríamos:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\hbar k_0^2 t/2m} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-v_0 t)} \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(k-k_0)^{2n}}{n!} \left(-\frac{i\hbar t}{2m} \right)^n \right) A(k) \;, \qquad (10.21) \\ &= \Psi(x - vt, 0) e^{i\hbar k_0^2 t/2m} + e^{i\hbar k_0^2 t/2m} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i\hbar t}{2m\hbar} \right)^n \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \hbar k_0 \right)^{2n} \Psi(x - vt, 0) \;, \end{aligned}$$

donde hemos empleado que $ke^{ik(x-v_0 t)} = -i\partial e^{ik(x-v_0 t)}/\partial x$. El primer término da lugar a la propagación del tren de ondas con su frente de ondas intacto y localizado en $v_0 t$, tal y como hemos discutido en (10.20), mientras que la serie es la responsable de la distorsión del tren de ondas y de su ensanchamiento (10.7).

10.2. Forma integral de la ecuación de Schrödinger

Junto con la ecuación de Schrödinger se han de incorporar las condiciones de frontera adecuadas en la resolución de un problema concreto. Analicemos dichas condiciones de contorno para los problemas de colisiones y estados ligados. Supongamos que,

$$\lim_{r\to\infty} V(r) = 0 \ . \tag{10.22}$$

Esto excluye sistemas periódicos infinitos, como los potenciales sufridos por los electrones en los sólidos. Debido a la condición anterior, una selección natural del origen de energías es $E = 0$, dado que el potencial se anula en $r \to \infty$.

Distinguimos dos tipos de soluciones, según el signo del valor de la energía para el espectro del Hamiltoniano:

a) El continuo. $E \geq 0$, estas soluciones describen procesos de colisión y las soluciones no están localizadas alrededor de $r = 0$. Por ejemplo, órbitas abiertas clásicas.

b) Los valores de E son discretos. $E \leq 0$, estas soluciones son estados ligados cuyas funciones de onda están localizadas alrededor de $r = 0$. Por ejemplo, las órbitas cerradas de mecánica clásica.

Consideremos la ecuación de Schrödinger estacionaria para un sistema de dos cuerpos de masa reducida μ:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}) \ , \tag{10.23}$$

donde hemos designado por

$$U(\vec{r}) = 2\mu\, V(\vec{r})/\hbar^2 \ , \tag{10.24}$$

siendo $V(\vec{r})$ el potencial. Por otra parte como para $r \to \infty$, $U(r) \to 0$, el autovalor de la energía es,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \ , \tag{10.25}$$

si $E < 0$, entonces k es imaginario puro con lo que $k^2 < 0$.

Establezcamos las condiciones de contorno para los casos a) y b), en orden:

a) Una onda plana $\phi_{\vec{k}}$ que incide sobre el centro de dispersión y una onda saliente dispersada de tipo esférico, $\exp(ikr)/r$ para $r \to \infty$. Estas soluciones se normalizan a deltas de Dirac, típicamente a $\delta(\vec{k} - \vec{k}')$ o $\delta(\vec{p} - \vec{p}\,') = \delta(\vec{k} - \vec{k}\,')/\hbar^3$. En nuestro caso, emplearemos la normalización a $\delta(\vec{k} - \vec{k}')$.

b) Soluciones que se cancelan suficientemente rápido para $r \to \infty$, dando lugar a funciones de onda normalizables.

La forma estándar de incorporar las condiciones de frontera en una ecuación diferencial es convertirla en una ecuación integral. Para ello, consideremos la función de Green de la ecuación de Helmholtz o de oscilaciones forzadas,

$$(\nabla^2 + k^2)G_k(\vec{r}, \vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \ . \tag{10.26}$$

Dado que no hay superficies donde se especifiquen las condiciones de frontera, sino que estamos considerando todo $\mathbb{R}^3$, tenemos como solución de (10.23),

$$\psi(\vec{r}) = \int G_k(\vec{r},\vec{r}\,')U(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')d^3r' \ . \tag{10.27}$$

Fijémonos que $\psi(\vec{r})$ aparece en la expresión tanto a la derecha como a la izquierda del signo de la igualdad y corresponde por tanto a una ecuación integral. Sin embargo, dado que estamos considerando un dominio infinito, si ϕ satisface la ecuación homogénea,

$$(\nabla^2 + k^2)\phi = 0 \ , \tag{10.28}$$

entonces

$$\psi(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) + \int G_k(\vec{r},\vec{r}\,')U(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')d^3r' \ , \tag{10.29}$$

también es solución. Sin embargo, eso sólo es válido para k real y no para k imaginario puro (estado ligado, $E<0$), ya que para este caso la ecuación diferencial (10.28) la podemos escribir de forma explícita como,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - |k_x|^2 - |k_y|^2 - |k_z|^2\right)\phi = 0 \ . \tag{10.30}$$

La solución de dicha ecuación diferencial se puede expresar como superposición lineal de las soluciones,

$$\phi = (e^{|k_1|x} + \alpha e^{-|k_1|x})(e^{|k_2|y} + \beta e^{-|k_2|y})(e^{|k_3|z} + \gamma e^{-|k_3|z}) \ , \tag{10.31}$$

que para $r\to\infty$ divergen exponencialmente y no son normalizables ni a 1 ni a deltas de Dirac.

Así pues, cuando consideremos estados ligados hemos de quitar la solución de la ecuación homogénea, ϕ, y restringirnos al término integral (10.27) con $k \to ik$.

Veamos que las condiciones de contorno se cumplen con las adecuadas ϕ y G_k para a). Analicemos primero esta última y expresemos G_k en términos de su transformada de Fourier $g_k(\vec{q})$,

$$G_k(\vec{r},\vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}\,')}g_k(\vec{q})d^3q \ . \tag{10.32}$$

Donde hemos hecho uso de que G_k sólo puede depender de la diferencia entre los vectores $\vec{r}$ y $\vec{r}\,'$, ya que por invarianza bajo traslaciones espaciales, $G_k(\vec{r},\vec{r}\,') \equiv G_k(\vec{r}-\vec{r}\,')$. Introduciendo la expresión anterior en la ecuación diferencial (10.26), satisfecha por G_k, tenemos,

$$(\nabla^2 + k^2)G_k = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}\,')}(-q^2+k^2)g_k(\vec{q})\, d^3q = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}\,')}\, d^3q \ , \tag{10.33}$$

por lo tanto:

$$(k^2 - q^2)g_k(\vec{q}) = 1 \ . \tag{10.34}$$

Hay que discutir el tratamiento de la singularidad para $k^2 = q^2$, puesto que integramos sobre todo q^2 de 0 a ∞ en (10.32). Para ello, extenderemos la integral a k complejos y al final tomaremos el

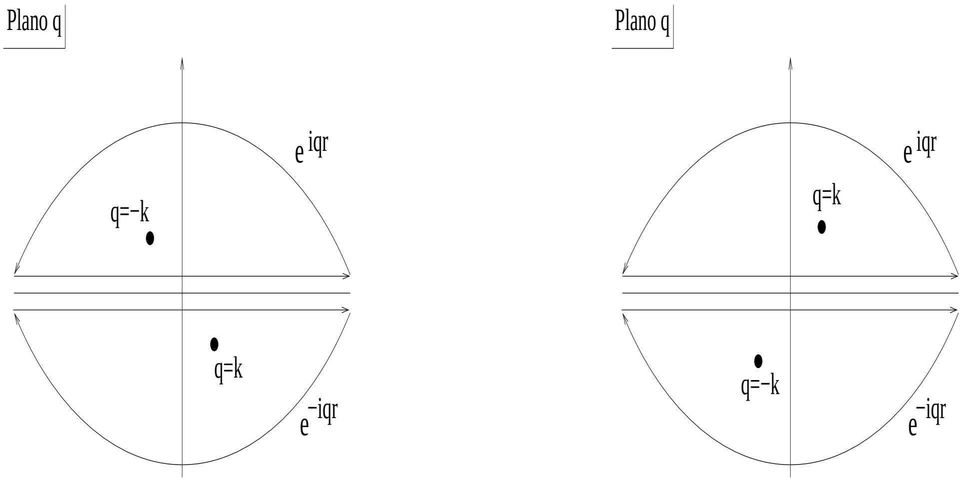

Figura 10.2: Posición de los polos y contornos de integración empleados para integrar (10.36). La figura de la izquierda corresponde a Im$k < 0$ y la de la derecha a Im$k > 0$.

límite de Im$k \to 0^{\pm}$. Las G_k resultantes son distintas según que la parte imaginaria de k tienda a cero por arriba o por abajo ($0^{\pm}$), correspondientes de hecho a distintas condiciones de contorno.

Tomemos pues Im$k \neq 0$ y procedamos a la integración de (10.32) con g_k dada en (10.34):

$$\begin{aligned}
G_k(\vec{r}) &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{(k-q)(k+q)} = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty q^2 dq \int_{-1}^{1} d\cos\theta \frac{e^{iqr\cos\theta}}{(k-q)(k+q)} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty q^2 dq \frac{1}{(k-q)(k+q)}\left[\frac{e^{iqr\cos\theta}}{iqr}\right]_{-1}^{1} = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{-i}{r}\int_0^\infty qdq \frac{e^{iqr}-e^{-iqr}}{(k-q)(k+q)} \\
&= \frac{-i}{(2\pi)^2 r}\int_{-\infty}^{0} qdq \frac{e^{iqr}-e^{-iqr}}{(k-q)(k+q)} \ . \qquad (10.35)
\end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$G_k(r) = \frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{ir}\int_{-\infty}^{\infty} dq\, q \frac{e^{iqr}-e^{-iqr}}{(k-q)(k+q)} \ . \qquad (10.36)$$

Para realizar la integral anterior empleamos el método de integración por residuos.

a) Im$k > 0$. En este caso la posición de los polos simples de (10.36) se indica en la figura de la derecha de 10.2 junto con los contornos de integración empleados para cada una de las exponenciales presentes en el numerador de (10.36). Resulta,

$$\begin{aligned}
G_k(r) &= \frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{ir}2\pi i\left\{\frac{-k}{2k}e^{ikr} + \frac{-k}{2k}e^{ikr}\right\} \\
&= -\frac{1}{4\pi r}e^{ikr} \ , \qquad (10.37)
\end{aligned}$$

donde, en el argumento de G_k, se ha expresado explícitamente que ésta sólo depende del módulo de $\vec{r}$, como debe ser debido a invarianza bajo rotaciones.

b) Im$k<0$. Se procede análogamente al caso anterior empleando la figura de la izquierda de 10.2. En este caso el resultado es,

$$
\begin{aligned}
G_k(r) &= \frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{ir}2\pi i\left\{\frac{-k}{2k}e^{-ikr}+\frac{k}{-2k}e^{-ikr}\right\} \\
&= -\frac{1}{4\pi r}e^{-ikr} ~. \qquad (10.38)
\end{aligned}
$$

Así pues,

$$
G_k(r) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ikr}}{r} ~, \qquad (10.39)
$$

para Imk positiva o negativa, respectivamente. Por lo tanto, G_k presenta una discontinuidad para $k>0$ e Im$k=0$, dado que es distinta según Im$k\to 0$ por arriba o por abajo. Por una parte, mientras que e^{ikr}/r (Im$k\to 0^+$) corresponde a ondas dispersadas salientes cuando la introducimos en la ecuación integral (10.29), como veremos a continuación, e^{-ikr}/r (Im$k\to 0^-$) da lugar a ondas entrantes.

De hecho cualquier combinación:

$$
\lim_{\epsilon\to 0^+}\left(c_1 G_{k+i\epsilon}+c_2 G_{k-i\epsilon}\right) ~,~~ c_1+c_2=1 ~, \qquad (10.40)
$$

satisface la ecuación diferencial (10.26). En particular:

$$
\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{1}{2}\left(G_{k+i\epsilon}+G_{k-i\epsilon}\right) = -\frac{1}{4\pi}\frac{\cos kr}{r} ~, \qquad (10.41)
$$

que corresponde a una onda estacionaria. Vamos a demostrar que la función de Green que está de acuerdo con las condiciones de contorno a) para el espectro continuo es $\lim_{\epsilon\to 0^+} G_{k+i\epsilon}$,

$$
G_k(\vec{r},\vec{r}\,') = G_k(|\vec{r}-\vec{r}\,'|) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} ~. \qquad (10.42)
$$

Para ello, analicemos la resultante $\psi(\vec{r})$ de (10.29),

$$
\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi}\int d^3r'\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}U(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,') ~, \qquad (10.43)
$$

cuando $r\to\infty$. En este límite,

$$
\begin{aligned}
k|\vec{r}-\vec{r}\,'| &= k\sqrt{r^2+r'^{\,2}-2\vec{r}\vec{r}\,'} = kr\sqrt{1+\frac{r'^{\,2}}{r^2}-2\frac{\vec{r}\vec{r}\,'}{r^2}} = kr\left(1-\frac{\vec{r}\vec{r}\,'}{r^2}+\mathcal{O}(r^{-2})\right) \\
&= kr - k\frac{\vec{r}\vec{r}\,'}{r}+\mathcal{O}(\frac{kr'^{\,2}}{r}) = kr-\vec{k}'\vec{r}\,'+\mathcal{O}(r^{-1}) ~, \qquad (10.44)
\end{aligned}
$$

donde $\vec{k}\,'=k\hat{r}$. Así mismo para $r\to\infty$,

$$
\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} = \frac{1}{r}\frac{1}{1-\vec{r}\vec{r}\,'/r^2+\mathcal{O}((r'/r)^2)} = \frac{1}{r}+\mathcal{O}(r'/r^2) ~. \qquad (10.45)
$$

Introduciendo los desarrollos (10.44) y (10.45) en (10.43), tenemos,

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) - \frac{e^{ikr}}{4\pi r}\int d^3r'\, e^{-i\vec{k}\,'\vec{r}\,'}U(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,')\ ,\quad r\to\infty\ . \tag{10.46}$$

Por lo tanto, además de la onda plana incidente, se produce una onda esférica saliente modulada por una función dependiente de ángulo. La notación habitual es escribir la expresión anterior como:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2}\left\{e^{i\vec{k}\vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r}\, f(\vec{k}\,',\vec{k})\right\}\ ,\quad r\to\infty\ . \tag{10.47}$$

La función $f(\vec{k}\,',\vec{k})$ se le llama amplitud de colisión y comparando con (10.46) se deduce que:

$$\begin{aligned} f(\vec{k}\,',\vec{k}) &= -2\pi^2\int d^3r'\,\frac{e^{-i\vec{k}\,'\vec{r}\,'}}{(2\pi)^{3/2}}U(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,') \\ &= -2\pi^2(\phi_{\vec{k}\,'},U\,\psi_{\vec{k}}) = -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}(\phi_{\vec{k}\,'},V\,\psi_{\vec{k}}) \\ &\equiv -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}\langle\phi_{\vec{k}\,'}|V|\psi_{\vec{k}}\rangle\ . \end{aligned} \tag{10.48}$$

Donde $|\phi_{\vec{k}\,'}\rangle$ corresponde a una partícula libre incidente de vector de propagación $\vec{k}\,'$, y $|\psi_{\vec{k}}\rangle$ a la solución (10.43).

Por la propia definición de $\vec{k}\,'$, se sigue que $|\vec{k}\,'| = |\vec{k}|$. Físicamente esta igualdad corresponde a la conservación de energía. La energía inicial de la onda $\phi_{\vec{k}}$ es la misma que la de la onda dispersada en la dirección $\vec{k}\,'$, ver figura 10.3. Se trata de una colisión elástica. Más adelante, en la sección 12.6, consideraremos también el caso en que $|\vec{k}\,'| < |\vec{k}|$, por ejemplo imaginemos un centro dispersor o blanco con estructura interna, de forma que éste pueda quedar excitado a un estado de energía superior como consecuencia de la colisión. Se habla entonces de colisión inelástica.

Estados ligados.

Aplicamos (10.43), como discutimos anteriormente. Para ello, hemos de eliminar de dicha expresión la onda plana incidente, $\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$, y hacer el cambio $k = i\alpha$, $\alpha > 0$. Con este convenio la función de Green (10.42) decrece exponencialmente para $r\to 0$ como $e^{-\alpha r}/r$. Por el contrario, si se hubiese tomado $\alpha < 0$, se habría de utilizar la función de Green retardada en (10.39), calculada para $\mathrm{Im}k < 0$. El resultado que se obtiene es:

$$\begin{aligned} \psi_E(\vec{r}) &= -\frac{1}{4\pi}\int d^3r'\,\frac{e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}U(\vec{r}\,')\psi_E(\vec{r}\,')\ , \\ E &= -\frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\ , \end{aligned} \tag{10.49}$$

es la energía de ligadura. Los mismos desarrollos empleados para llegar a (10.46) en el caso de espectros continuos, implican ahora que,

$$\psi_E(\vec{r}) = C\,\frac{e^{-\alpha r}}{r}\ ,\quad r\to\infty\ , \tag{10.50}$$

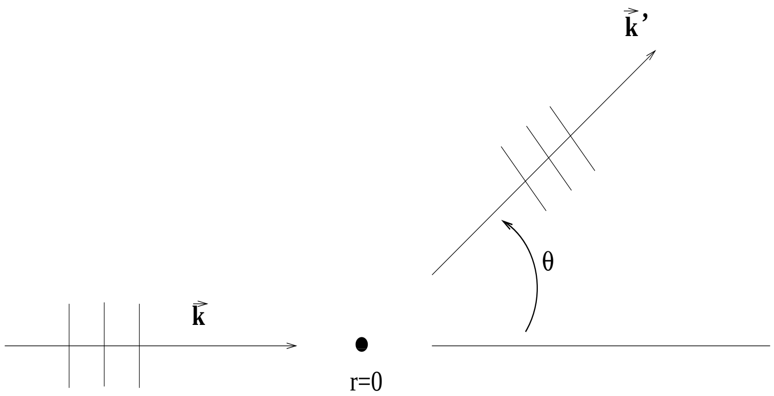

Figura 10.3: Una onda plana incidente en la dirección $\vec{k}$ es dispersada por un blanco localizado alrededor de $r \simeq 0$. Las partículas dispersadas según la dirección $\vec{k}\,'$ son observadas en $r \to \infty$, esto es, a distancias mucho mayores que el rango de la interacción entre los sistemas y que el tamaño de los mismos.

como se requiere para un estado ligado, dando lugar a una función de onda de cuadrado integrable que se normaliza a la unidad.

La ecuación integral (10.49) es homogénea y se podría sustituir por un sistema de ecuaciones lineales (discretizando la integración de $\vec{r}\,'$ como suma sobre una red) y, como el sistema es homogéneo, se requiere una condición de cuantificación, es decir, que el determinante de la matriz correspondiente sea cero. En el caso de dispersión $E > 0$, el sistema (10.43) es no homogéneo y no hay condición de cuantificación.

10.3. Sección eficaz

La sección eficaz diferencial de un proceso de colisión es un concepto de directa aplicación experimental y constituye el punto de contacto entre teoría de colisiones y experimento. Dado un proceso de colisión la sección eficaz diferencial se define como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN_{disp}/d\Omega}{dN_{inc}/dA} \;, \tag{10.51}$$

donde dN_{disp} es el número de partículas dispersadas en el cono de ángulo sólido $d\Omega = \mathrm{sen}\theta d\theta d\phi$, ver figura 10.4, y dN_{inc} es el número de partículas incidentes que atraviesan el elemento de área dA perpendicular a $\vec{k}$. La sección eficaz total se define como:

$$\sigma = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d\cos\theta \, \frac{d\sigma}{d\Omega} \;, \tag{10.52}$$

se llama total puesto que se integra sobre todas direcciones.

De la definición (10.51), se sigue que el número de partículas dispersadas en el elemento de ángulo solido $d\Omega$ viene dado por,

$$dN_{disp} = \left(\frac{dN_{inc}}{dA}\right)\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) d\Omega \;. \tag{10.53}$$

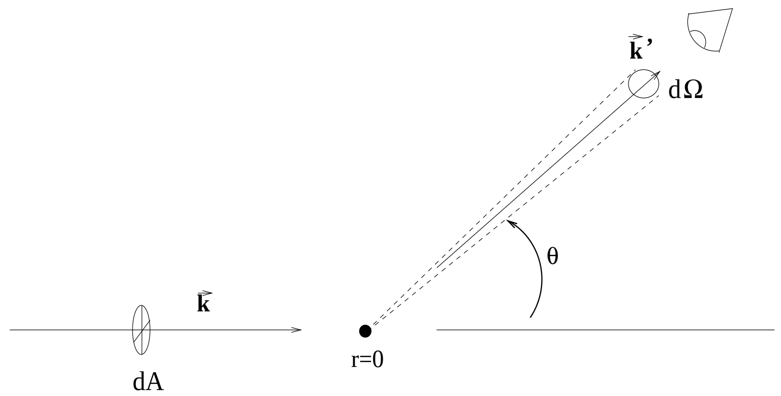

Figura 10.4: Elementos en la definición de la sección eficaz diferencial (10.51). El ojo colocado a la derecha indica un detector genérico que cuenta el número de partículas dispersadas contenidas en el elemento de ángulo sólido $d\Omega$.

De este resultado podemos obtener también el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo,

$$\frac{dN_{disp}}{dt} = \left(\frac{d^2N_{inc}}{dt\,dA}\right)\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)d\Omega \ . \tag{10.54}$$

El significado de esta relación se clarifica si recordamos que el flujo de partículas incidentes, Φ_{inc}, es justamente

$$\Phi_{inc} = \frac{d^2N_{inc}}{dt\,dA} \ , \tag{10.55}$$

con lo que nos queda que el número de partículas dispersadas por unidad de ángulo sólido y tiempo en la dirección (θ,ϕ) es:

$$\left.\frac{d^2N_{disp}}{d\Omega dt}\right|_{(\theta,\phi)} = \Phi_{inc}\cdot\frac{d\sigma}{d\Omega} \ . \tag{10.56}$$

Si integramos sobre todas las direcciones,

$$\frac{dN_{disp}}{dt} = \Phi_{inc}\cdot\int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \Phi_{inc}\cdot\sigma \ , \tag{10.57}$$

que es igual al número total de partículas dispersadas por unidad de tiempo. Fijémonos que, por tanto, la sección eficaz constituye el área activa de interacción. Así, al multiplicar el flujo de partículas por la sección eficaz diferencial, obtenemos el número de partículas que se dispersan en una cierta dirección, y si lo multiplicamos por la sección eficaz total, obtenemos el número total de partículas dispersadas en todas las direcciones.

Experimentalmente se cuenta el número de partículas dispersadas, ΔN_{disp}, en un cierto elemento de ángulo sólido $\Delta\Omega$[#1]durante un intervalo de tiempo T mucho mayor que cualquier ritmo característico de los sistemas y sus interacciones, por ejemplo T puede ser incluso meses o años.

[#1]Se habla de $\Delta\Omega$ y no de $d\Omega$ dado que experimentalmente se toman elementos finitos, aunque suficientemente pequeños, de ángulo sólido.

También se conoce el flujo incidente Φ_{inc}, que queda establecido dadas las características del experimento. Se hace entonces uso de (10.56) para obtener la sección eficaz diferencial,

$$\frac{\Delta\sigma}{\Delta\Omega} = \frac{1}{\Phi_{inc}} \frac{\Delta N_{disp}}{\Delta\Omega\, T} \ . \tag{10.58}$$

A continuación, vamos a expresar la sección eficaz diferencial en términos de nuestra descripción del proceso de colisión. Para ello, la interpretación de Born de la función de onda, tal que su cuadrado corresponde con la distribución de probabilidad de presencia de la partícula, juega un papel fundamental. Asociada a la conservación de probabilidad existe una corriente de probabilidad,

$$\vec{j}(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left\{\varphi^*\vec{\nabla}\varphi - \varphi\vec{\nabla}\varphi^*\right\} \ . \tag{10.59}$$

cumpliéndose la ecuación de continuidad,

$$\vec{\nabla}\vec{j} + \frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t} = 0 \ , \tag{10.60}$$

con $\rho(\vec{r},t) = \varphi^*(\vec{r},t)\varphi(\vec{r},t)$.

Para la onda plana incidente $\vec{j}_{inc} = \vec{v}_k/(2\pi)^3$ con $\vec{v}_k = \hbar\vec{k}/\mu$. Por tanto,

$$dN_{inc} = \frac{|\vec{v}_k|}{(2\pi)^3} dA \int_0^T dt = \frac{|\vec{v}_k|}{(2\pi)^3} dA\, T \ . \tag{10.61}$$

Para $r \to \infty$ la corriente de probabilidad de la solución dispersada (10.47) corresponde a:

$$\vec{j}_{disp}(\vec{r},t) = \frac{|f(\vec{k}\,',\vec{k})|^2}{(2\pi)^3 r^2} v_k \hat{r} + \mathcal{O}(\frac{1}{r^3}) \ . \tag{10.62}$$

Fijémonos que $\vec{j}_{disp}(\vec{r},t)$ tiene dirección paralela al área del elemento de esfera contenido en el elemento de ángulo sólido $d\Omega$, por lo tanto,

$$dN_{disp} = \left(d\Omega r^2 \hat{r}\right) \int_0^T dt \left(\frac{|f(\vec{k}\,',\vec{k})|^2}{(2\pi)^3 r^2} v_k \hat{r} \right) = d\Omega\, v_k \frac{|f(\vec{k}\,',\vec{k})|^2}{(2\pi)^3} T \ . \tag{10.63}$$

Sustituyendo (10.61) y (10.63) en la definición (10.51) tenemos que:

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{CM} = \left|f(\vec{k}\,',\vec{k})\right|^2 \ . \tag{10.64}$$

En la expresión anterior se ha incluido el subíndice CM puesto que recordemos que el proceso de colisión lo estamos describiendo en el sistema de referencia del CM. Fijémonos que la definición de sección eficaz diferencial (10.51) se aplica a cualquier sistema de referencia y simplemente se basa en un proceso de contaje de partículas, aunque su valor depende del sistema de referencia utilizado. Por el contrario, la sección eficaz total, dado que cuenta el número total de partículas dispersadas, tiene un valor independiente del sistema de referencia.

Otro sistema de referencia que se suele emplear, tanto a nivel teórico como experimental, es el sistema de referencia de laboratorio. En este sistema de referencia el blanco se encuentra en reposo mientras que el proyectil, constituido por las partículas incidentes, tiene velocidad no nula. En el sistema de laboratorio tomamos el eje z en la misma dirección y sentido que la velocidad inicial del proyectil. Sean $\vec{q}_1$, $\vec{q}_2=0$, los momentos lineales iniciales de las partículas en el sistema de laboratorio y sean $\vec{p}_1$, $\vec{p}_2$, aquellos en el sistema de referencia del CM. Entre ambos conjuntos de momentos lineales existe la relación,

$$\begin{aligned}\vec{p}_1 &= \vec{q}_1 - m_1\vec{V} ~,\\ \vec{p}_2 &= -m_2\vec{V} ~,\end{aligned} \tag{10.65}$$

con $\vec{V}$ la velocidad del centro de masas. Puesto que $\vec{p}_1+\vec{p}_2=0$ se concluye que,

$$\vec{V}=\vec{q}_1/M ~, \tag{10.66}$$

con $M=m_1+m_2$ la masa total del sistema. Vemos que $\vec{V}$ es paralela a $\vec{q}_1$ y por tanto al eje z.

Como es bien sabido, en un sistema cerrado el CM se mueve de acuerdo a un movimiento libre tanto clásica como cuánticamente. Así pues, si denominamos por $\vec{p}\,'_1$ y $\vec{p}\,'_2$ los momentos finales en CM y por $\vec{q}\,'_1$ y $\vec{q}\,'_2$ los momentos finales en laboratorio, éstos están relacionados con aquellos por:

$$\begin{aligned}\vec{p}\,'_1 &= \vec{q}\,'_1 - m_1\vec{V} ~,\\ \vec{p}\,'_2 &= \vec{q}\,'_2 - m_2\vec{V} ~.\end{aligned} \tag{10.67}$$

Por lo tanto, de (10.65) y (10.67) obtenemos las nuevas relaciones:

$$\begin{aligned}\vec{p}\,'_1\vec{p}_1 &= p_1^2\cos\theta = \frac{m_2}{M}\left(q'_1\,q_1\,\cos\Theta - \frac{m_1}{M}q_1^2\right) ~,\\ |\vec{p}\,'_1\times\vec{p}_1| &= p_1^2\,\mathrm{sen}\theta = \frac{m_2}{M}q'_1 q_1 \mathrm{sen}\Theta ~,\end{aligned} \tag{10.68}$$

siendo Θ el ángulo entre las direcciones inicial y dispersada en el sistema de laboratorio. De estas expresiones deducimos,

$$\tan\Theta = \frac{\mathrm{sen}\theta}{\cos\theta + m_1/m_2} ~, \tag{10.69}$$

de donde se deduce que,

$$\frac{d\Omega_{lab}}{d\Omega_{CM}} = \frac{d\cos\Theta}{d\cos\theta} ~, \tag{10.70}$$

puesto que al ser $\vec{V}$ dada en (10.66) paralela al eje z, el ángulo acimutal ϕ no cambia en la transformación de un sistema de referencia al otro. La relación (10.70) es suficiente para establecer la relación a su vez entre las secciones eficaces diferenciales de CM y laboratorio, puesto que de la definición (10.51), lo único que cambia es el elemento diferencial de ángulo sólido en ambos sistemas de referencia, de acuerdo a (10.70), dado que el número de partículas dispersadas en un cierto lugar geométrico es independiente del sistema de referencia. Por lo tanto,

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{lab} = \left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{CM}\cdot\frac{d\Omega_{CM}}{d\Omega_{lab}} = |f(\vec{k}\,',\vec{k})|^2\,\frac{d\Omega_{CM}}{d\Omega_{lab}} ~. \tag{10.71}$$

De este modo, podemos calcular la sección eficaz diferencial en el sistema de referencia de laboratorio una vez determinada la amplitud de colisión f en el CM. La relación es simplemente geométrica.

10.4. Teorema óptico

Se debe a Bohr, Peierl y Placzek. Su origen radica en los efectos de interferencia en la dirección hacia adelante, $\theta = 0$, de las corrientes de probabilidad asociadas a la parte dispersada e incidente de $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ (10.43) para que se satisfaga el teorema de conservación de la probabilidad de presencia.

Calculemos la corriente de probabilidad $\vec{j}(\vec{r},t)$ de la solución $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ y consideremos sólo su componente radial, dado que es la que contribuye para calcular el flujo de partículas que atraviesan un elemento de superficie esférico, $\hat{r}r^2 d\Omega$. Además, en el límite $r \to \infty$ podemos utilizar (10.47) para determinar $\vec{j}\cdot\hat{r} = j_r$,

$$
\begin{aligned}
j_r &= \frac{\hbar}{\mu}(2\pi)^{-3}\mathrm{Im}\left\{\left[e^{-ikr\cos\theta} + \frac{e^{-ikr}}{r}f^*(\vec{k}\,',\vec{k})\right]\frac{\partial}{\partial r}\left[e^{ikr\cos\theta} + \frac{e^{ikr}}{r}f(\vec{k}\,',\vec{k})\right]\right\} \qquad (10.72)\\
&= \frac{\hbar}{\mu}(2\pi)^{-3}\mathrm{Im}\left\{ik\cos\theta + ik\frac{|f|^2}{r^2} + ik\frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r}f + ik\cos\theta\frac{e^{ikr(\cos\theta-1)}}{r}f^* - \frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r^2}f\right\} \; .
\end{aligned}
$$

Podemos distinguir de la expresión anterior varias contribuciones $r \to \infty$,

$$
\begin{aligned}
j_{r,inc} &= (2\pi)^{-3}v_k\cos\theta \; ,\\
j_{r,disp} &= (2\pi)^{-3}\frac{v_k}{r^2}|f|^2 + \mathcal{O}(\frac{1}{r^3}) \; ,\\
j_{r,int} &= (2\pi)^{-3}\frac{v_k}{r}\mathrm{Im}\left[ie^{ikr(1-\cos\theta)}f + i\cos\theta e^{ikr(\cos\theta-1)}f^*\right] + \mathcal{O}(\frac{1}{r^2}) \; . \qquad (10.73)
\end{aligned}
$$

Por una parte, $j_{r,inc}$ y $j_{r,disp}$ son funciones suaves del ángulo de dispersión θ. Para $j_{r,inc}$ es evidente, mientras que para $j_{r,disp}$, dado que involucra la amplitud de colisión, $f(\vec{k}\,',\vec{k})$, esta afirmación depende del tipo de interacción. Para potenciales de corto alcance, esto es siempre cierto. Posteriormente, en la sección 12.3, se dará una definición precisa de potencial de corto alcance en (12.80). Hasta entonces, potenciales de corto alcance serán aquellos que por encima de una cierta distancia radial se anulan suficientemente rápido tal que su contribución a (10.43) sea despreciable en dicha región. Ejemplo típico es un potencial que se anula para $r > R$, con R finito. Por el contrario, el potencial de Coulomb es un ejemplo típico de potenciales que no son de corto alcance.

Sin embargo, la corriente de interferencia $j_{r,int}$ depende dramáticamente de $\cos\theta$ puesto que $r \to \infty$. Es por ello que, al integrar $j_{r,int}$ sobre ángulo sólido, sólo la región alrededor de $\theta = 0$ dará contribución. Estudiemos entonces la región $\theta \simeq 0$, incluida en el elemento de ángulo sólido $\delta\Omega = 2\pi\delta\theta$, y supongamos que $f(\vec{k}\,',\vec{k})$ es una función angular suave, entonces,

$$
\int_{\delta\Omega} r^2 d\Omega j_{r,int} \simeq (2\pi)^{-2}v_k r\,\mathrm{Im}\left\{i\,f^*(\theta=0)\int_{1-(\delta\theta)^2/2}^{1} dx\, e^{ikr(x-1)} - cc\right\} \; , \qquad (10.74)
$$

donde cc se refiere al complejo conjugado. Puesto que:

$$
\left.\frac{e^{ikr(x-1)}}{ikr}\right|_{1-\frac{1}{2}(\delta\theta)^2}^{1} = \frac{1-e^{ikr(\delta\theta)^2/2}}{ikr} \; . \qquad (10.75)
$$

Hemos de tener en cuenta que estamos ante un doble límite, por un lado $r \to \infty$ y por otro $\delta\theta \to 0$. Experimentalmente, la situación que se tiene es que primero se toma el límite $r \to \infty$ y finalmente se hace $\delta\theta \to 0$, con lo que suponemos que $kr(\delta\theta)^2 \gg 1$. En este caso, el exponente de la exponencial oscila enormemente con lo que se promedia a cero dentro de cualquier integral sobre $\vec{k}$ (pensemos en un tren de ondas). De este modo tenemos finalmente,

$$\int_{\delta\Omega} r^2 d\Omega j_{r,int} \simeq (2\pi)^{-2} v_k r \text{Im} \left\{ \frac{f^*(\theta=0)}{kr} - cc \right\} = -(2\pi)^{-3} v_k \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\theta=0) \; . \tag{10.76}$$

Sea S la esfera de radio r, con $r \to \infty$, entonces por conservación de probabilidad de presencia,

$$\int_S d^3r' \vec{\nabla}\vec{j} = r^2 \int d\Omega j_r = 0 \; . \tag{10.77}$$

Teniendo en cuenta (10.73) y (10.76), tenemos:

$$\begin{aligned}
\int_S \vec{j}_{inc}\, d\vec{s} &= r^2 \int d\Omega j_{r,inc} = 0 \; , \\
\int_S \vec{j}_{disp}\, d\vec{s} &= (2\pi)^{-3} v_k \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^{-3} v_k \sigma \; , \\
\int_S \vec{j}_{int}\, d\vec{s} &= -(2\pi)^{-3} v_k \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\theta=0) \; , \quad r \to \infty \; .
\end{aligned} \tag{10.78}$$

Al sumar las tres contribuciones e igualar a cero el resultado total, resulta el teorema óptico,

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\theta=0) \; . \tag{10.79}$$

Es ésta una relación muy importante que liga la sección eficaz total con la dispersión hacia adelante en un proceso de colisión. El flujo debido a la interferencia, dado en (10.76), es negativo puesto que en virtud de (10.79), $\text{Im} f(\theta=0) \geq 0$, y representa un flujo hacia atrás, debido a la sombra del blanco.

Capítulo 11

Métodos aproximados

En este tema vamos a desarrollar métodos aproximados de solución de (10.43) que, bajo ciertas condiciones, son aplicables. Así mismo, estableceremos el proceso de mejorar orden a orden la aproximación en los correspondientes desarrollos. Concretamente veremos la aproximación de Born y la aproximación eikonal o semiclásica.

11.1. La aproximación de Born

De (10.48) la amplitud de colisión f viene dada por,

$$\begin{aligned} f(\vec{k}\,',\vec{k}) &= -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}\int d^3r\,\phi^*_{\vec{k}\,'}(\vec{r})V(\vec{r})\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\ , \\ \phi_{\vec{k}\,'}(\vec{r}) &= \frac{e^{i\vec{k}\,'\vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}}\ . \end{aligned} \tag{11.1}$$

Si el potencial lo podemos considerar como débil (aspecto éste que especificaremos con detalle más adelante), podemos pensar que una buena aproximación sería sustituir $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx \phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ en la integral. Obtenemos así la llamada amplitud de Born, $f_B(\vec{k}\,',\vec{k})$,

$$f_B(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3r\,e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\vec{r}}V(\vec{r}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\widetilde{V}(\vec{q})\ , \tag{11.2}$$

con $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}-\vec{k}\,')$, la transferencia de momento, y $\widetilde{V}(\vec{q})$ la transformada de Fourier del potencial V.

Supongamos que $V(\vec{r}) \equiv V(r)$, potencial central, y calculemos para este importante caso f_B,

$$\begin{aligned} f_B(\vec{k}\,',\vec{k}) &= -\frac{\mu}{\hbar^2}\int_{-1}^{1} d\cos\theta\int_0^\infty r^2drV(r)e^{iqr\cos\theta} = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rdrV(r)\mathrm{sen}qr = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\widetilde{V}(q)\ , \\ \widetilde{V}(q) &= \frac{4\pi}{q}\int_0^\infty rdrV(r)\mathrm{sen}qr\ . \end{aligned} \tag{11.3}$$

Dos aspectos hay que destacar de la expresión anterior para f_B. Primero, $f_B(\vec{k}\,',\vec{k})$ sólo depende de q para un potencial central. Por invarianza bajo rotaciones sólo se podría esperar que f_B fuese una función de k y de $\cos\theta$, sin embargo, ambos se relacionan de modo que f_B sólo depende de q. Esto es, por lo tanto, una propiedad característica de f_B, y no genérica de los potenciales centrales. Segundo, f_B es real. Esta importante propiedad la entenderemos en toda su generalidad cuando en la sección 12.2.3 introduzcamos la relación de unitariedad satisfecha por las amplitudes de colisión.

Ejemplo. Calculemos f_B para el potencial de Yukawa,

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r} . \tag{11.4}$$

Entonces,

$$\begin{aligned} \widetilde{V}(q) &= \frac{4\pi V_0}{q\alpha}\int_0^\infty dr\, e^{-\alpha r}\frac{e^{iqr}-e^{-iqr}}{2i} = \frac{4\pi V_0}{\alpha q}\mathrm{Im}\int_0^\infty dr e^{iqr}e^{-\alpha r} = \\ &= \frac{4\pi V_0}{\alpha^3}\frac{\alpha^2}{q^2+\alpha^2} . \end{aligned} \tag{11.5}$$

De (11.3) se sigue por tanto que para el potencial de Yukawa,

$$f_B(q) = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2\alpha^3}\frac{\alpha^2}{q^2+\alpha^2} . \tag{11.6}$$

Por lo tanto, la sección eficaz correspondiente a esta aproximación, también llamada sección eficaz de Born, es

$$\frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \left(\frac{2\mu V_0}{\hbar^2\alpha^3}\right)^2\left(\frac{\alpha^2}{4k^2\mathrm{sen}^2\frac{\theta}{2}+\alpha^2}\right)^2 . \tag{11.7}$$

En esta última expresión hemos expresado explícitamente $q^2 = |\vec{k}-\vec{k}\,'|^2 = 4k^2\mathrm{sen}^2\theta/2$. Esta sección eficaz es isotrópica cuando $\alpha^2 \gg k^2$, si pensamos en términos de la longitud de onda de de Broglie $1/k$, resulta claro que la desigualdad anterior se refiere a que dicha longitud de onda debe ser mucho mayor que el rango del potencial, $1/\alpha$. Notemos que para $r \gg 1/\alpha$ la exponencial decae muy rápidamente y estamos ante un potencial de corto alcance dado por $1/\alpha$. Por el contrario, cuando $k^2 \gg \alpha^2$, la sección eficaz está muy picada hacia $\theta = 0$, esto es, hacia adelante. Esto se muestra en la figura 11.1 para un valor arbitrario de α.

Cuando en (11.4) tomamos el límite $\alpha \to 0$, tal que $V_0/\alpha = Z_1Z_2e^2/4\pi\epsilon_0$, el potencial de Yukawa se convierte en el de Coulomb correspondiente a la interacción entre dos cargas Z_1e y Z_2e. Haciendo este cambio en (11.7), obtenemos la sección eficaz de Born para el potencial de Coulomb,

$$\frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \frac{(2\mu Z_1Z_2e^2)^2}{(4\pi\epsilon_0\hbar^2)^2}\frac{1}{16k^4\mathrm{sen}^4\frac{\theta}{2}} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\frac{(Z_1Z_2e^2\mu)^2}{4p^4\mathrm{sen}^4\frac{\theta}{2}} , \tag{11.8}$$

con $p = \hbar k$, el momento relativo. La expresión anterior corresponde a una sección eficaz diferencial muy picada hacia adelante donde tiene un polo, $\backsim \frac{1}{\theta^4}$. Se ha de recalcar que secciones eficaces infinitas son absolutamente posibles a partir de su definición (10.51) y la interpretación que hemos dado a renglón seguido (10.56). Simplemente hace referencia a que para un flujo incidente dado Φ_{inc} que llena todo el espacio, la sección de colisión activa es infinita y por tanto el número de

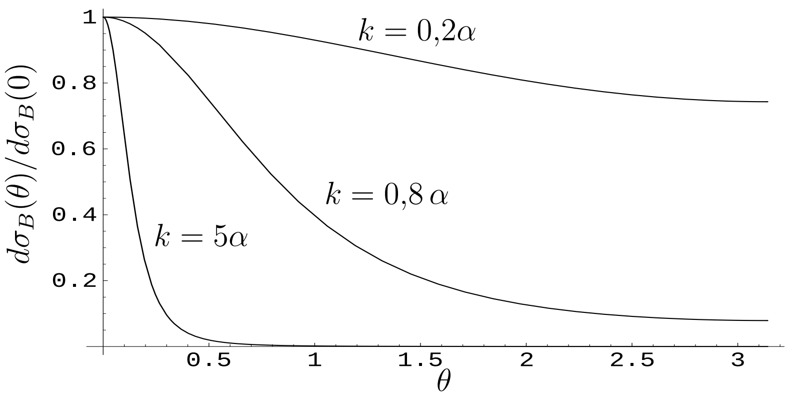

Figura 11.1: Sección eficaz diferencial de Born para un potencial de Yukawa en función del ángulo de dispersión, normalizada a 1 para $\theta = 0$. Se aprecia el distinto comportamiento según el valor de k.

partículas dispersadas es infinito. La expresión anterior es la fórmula de Rutherford que proporciona correctamente la sección eficaz diferencial, tanto en el caso clásico como en el cuántico, cuando el potencial de Coulomb se resuelve exactamente. Cuando a continuación determinemos condiciones necesarias de aplicabilidad de la serie de Born, estableceremos por qué no es obvio que (11.8) constituya de hecho un buen resultado.

Condición necesaria para la validez de la aproximación de Born. La aproximación de Born sólo puede ser buena si en la región de interacción la diferencia $|\psi_{\vec{k}} - \phi_{\vec{k}}|$ es pequeña. Sigamos considerando potenciales centrales y evaluemos esta cantidad en $\vec{r} = 0$, puesto que para potenciales de corto alcance éste es un punto seguro dentro de su rango.

$$\begin{aligned} C(k) &= \frac{\phi_{\vec{k}}(0) - \psi_{\vec{k}}(0)}{\phi_{\vec{k}}(0)} \simeq \frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int d^3r\, \frac{e^{ikr}}{r} U(r) \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int d^3r\, \frac{e^{ikr}}{r} U(r) e^{i\vec{k}\vec{r}} \\ &= \frac{1}{k} \int_0^\infty dr\, e^{ikr} \mathrm{sen} kr\, U(r)\ . \end{aligned} \qquad (11.9)$$

Intuitivamente, cuanto mayor sea la energía del proyectil, su movimiento se debe distorsionar menos, por lo tanto, la restricción más fuerte de imponer que $|C(k)| \ll 1$, debe ocurrir, en general, para $k = 0$,

$$|C(0)| = \left| \int_0^\infty dr\, r U(r) \right| \ll 1\ . \qquad (11.10)$$

Esta condición sólo hace hincapié en un punto, $\vec{r} = 0$. No obstante, puede ocurrir que el rango del potencial sea grande comparado con la longitud de onda incidente y que se vayan acumulando pequeños cambios a lo largo del camino seguido por la partícula, de forma que finalmente se tenga un cambio apreciable en la fase de la amplitud. En este caso, $|C(k)|$ puede ser pequeño, pero al final no se puede aplicar la aproximación de Born. De ahí que hablemos de condiciones necesarias.

Para un pozo cuadrado caracterizado por una profundidad V_0 y rango a, tal que $V(r) = 0$ para

$r > a$ y $V(r) = V_0$ para $r < a$, la condición (11.10) es

$$\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^a rV_0 dr\right| = \left|\frac{\mu V_0 a^2}{\hbar^2}\right| \ll 1 \ . \tag{11.11}$$

Esta desigualdad tiene una clara interpretación física. Imaginemos un estado ligado y lo suponemos localizado dentro del pozo cuadrado con radio a, tal y como dicta la mecánica clásica. El principio de incertidumbre Heisenberg implica que su momento es al menos $\hbar/a$ y, con ello, tendrá una energía cinética mínima,

$$T \backsim \frac{p^2}{2\mu} \backsim \frac{\hbar^2}{2a^2\mu} \ . \tag{11.12}$$

La condición (11.11) implica que, $|V_0| \ll \hbar^2/\mu a^2$, o sea, que $|V_0| \ll T$ y no puede existir un estado ligado localizado en el tamaño del pozo. Si el potencial fuese repulsivo, entonces se tomaría $-V_0$, que sería atractivo, y por tanto demasiado débil para producir estados ligados.

La función de energía $|C(k)|$ se puede calcular para el potencial de Yukawa de forma exacta. Fijémonos que $|C(0)|$ puede violar la condición de ser mucho menor que uno y todavía $|C(k)| \ll 1$, para momentos suficientemente grandes. Teniendo en cuenta la expresión para el potencial de Yukawa (11.4),

$$C(k) = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2\alpha k}\int_0^\infty dr\, e^{ikr}\mathrm{sen}kr\frac{e^{-\alpha r}}{r} = \frac{\mu V_0}{2\hbar^2\alpha k}\left[2\arctan\frac{2k}{\alpha} + i\ln(1+\frac{4k^2}{\alpha^2})\right] \ . \tag{11.13}$$

Para altas energías, tal que $k \gg \alpha$, la expresión anterior viene dominada por:

$$C(k) \simeq \frac{\mu V_0}{2\hbar^2\alpha k}\left[\pi + 2i\ln\frac{2k}{\alpha}\right] \ . \tag{11.14}$$

Así pues para $k \to \infty$, $C(k) \to 0$ y la aproximación de Born es muy precisa en este límite.[#1] Para bajas energías, haciendo la aproximación $k \ll \alpha$ en (11.13), tenemos:

$$C(k) \simeq \frac{2\mu V_0}{\hbar^2\alpha^2}\left[1 + i\frac{k}{\alpha} + \mathcal{O}(k^2)\right] \ . \tag{11.15}$$

La aproximación de Born no siempre se puede calcular. Hay potenciales demasiado singulares para tener transformadas de Fourier y no se puede aplicar la aproximación de Born. Por ejemplo, todo potencial que para $r \to 0$ se comporte como $V_0(\frac{r_0}{r})^s$, con $s > 2$.

Tomando el límite $\alpha \to 0$ en (11.13), con la sustitución $V_0/\alpha = Z_1Z_2e^2/4\pi\epsilon_0$, tenemos $C(k)$ para el potencial de Coulomb,

$$C(k) = \frac{\mu}{\hbar^2}\frac{Z_1Z_2e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{k}\left(\frac{\pi}{2} + i\lim_{\alpha\to 0}\ln\frac{2k}{\alpha^2}\right) \ . \tag{11.16}$$

[#1] Se podría pensar que cuando $k \to \infty$ el número de longitudes de de Broglie contenidas en la zona de interacción tiende a infinito y, por tanto, podría ser que al sumar las pequeñas perturbaciones producidas en una longitud de de Broglie a lo largo de todo el camino de la partícula finalmente no se pudiese aplicar la aproximación de Born. Esto no es así dado que la integral (11.1) viene cancelada entonces por una supresión oscilatoria para $k \gg 1/\alpha$, excepto en la zona del origen donde sabemos que $\psi_{\vec{k}} - \phi_{\vec{k}} \to 0$.

Con lo que la parte imaginaria es divergente para $\alpha \to 0$ y $|C(k)| \to \infty$. Llegamos por tanto a la conclusión de que la aproximación de Born no es en ningún caso válida para el potencial de Coulomb. Sin embargo, como se dijo en relación a (11.7), la sección eficaz de Born no es sólo una buena aproximación sino que es exacta. De hecho, al resolver exactamente la dispersión de Coulomb [2, 3] se obtiene que el módulo de la amplitud de colisión es exactamente el mismo que el dado por la primera aproximación de Born, mientras que la fase es una función bastante patológica y da lugar a esa divergencia. El potencial de Coulomb es el caso por antonomasia donde opera la restricción expuesta anteriormente acerca de la validez de la condición (11.10), al ser un potencial de rango infinito.

En ocasiones ocurre que existe un cut-off natural que apantalla el potencial de Coulomb para $r > R$. Por ejemplo, si pensamos en el potencial de interacción electrostático sufrido por un electrón en su colisión con un átomo para r mayor que el tamaño típico del mismo, los electrones apantallan el potencial de Coulomb del núcleo. De este modo, en lugar de $\alpha \to 0$ en (11.16) hacemos la sustitución $\alpha \to 1/R$ y tenemos,

$$
\begin{aligned}
C(k) &\simeq \frac{\mu Z_1 Z_2 e^2}{\hbar^2 4\pi\epsilon_0 k}\left(\frac{\pi}{2} + i\ln 2kR\right) ~, \\
|C(k)| \ll 1 &\to \left|\frac{\mu Z_1 Z_2 e^2}{\hbar^2 4\pi\epsilon_0 k}\right| \sqrt{\frac{\pi^2}{4} + (\ln 2kR)^2} \ll 1 ~.
\end{aligned}
\tag{11.17}
$$

11.1.1. La serie de Born

Como ya hemos discutido, la amplitud de Born sólo es aplicable para potenciales suficientemente débiles. Se puede por tanto pensar en una serie de potencias en el potencial. Es por ello conveniente extraer explícitamente del potencial un parámetro adimensional que caracterice la pequeñez del mismo y es por ello que reescribimos $V(\vec{r}) \to gV(\vec{r})$, con la suposición de que $|g| \ll 1$. Para $g = 0$ recuperamos el caso libre. Por ejemplo, para el caso del potencial de Yukawa (11.4) podemos tomar $g = 2\mu V_0/\hbar^2\alpha^2$. Notemos que la aparición de $2\mu/\hbar^2$ en g es natural puesto que es $U = 2\mu/\hbar^2 V$ la función que aparece en la ecuación integral (10.43). Para finalizar con un parámetro adimensional, se necesita multiplicar por una longitud al cuadrado y el parámetro natural para ello es el propio rango del potencial α^{-1}, así obtenemos la expresión anterior dada para g. Resolvamos iterativamente la ecuación (10.43), similarmente a como planteamos la serie de Dyson (3.50). De este modo obtenemos la solución como un desarrollo en serie de potencias de g,

$$
\begin{aligned}
\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) + g\int d^3r'\, G_k(\vec{r}-\vec{r}\,')U(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,') \\
&= \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) + g\int d^3r'\, G_k(\vec{r}-\vec{r}\,')U(\vec{r}\,')\phi_{\vec{k}}(\vec{r}\,') \\
&+ g^2\int d^3r'\int d^3r''\, G_k(\vec{r}-\vec{r}\,')U(\vec{r}\,')\, G_k(\vec{r}\,'-\vec{r}\,'')U(\vec{r}\,'')\phi_{\vec{k}}(\vec{r}\,'') \\
&+ g^3\int d^3r'\int d^3r''\int d^3r'''\, G_k(\vec{r}-\vec{r}\,')U(\vec{r}\,')\, G_k(\vec{r}\,'-\vec{r}\,'')U(\vec{r}\,'') \\
&\times G_k(\vec{r}\,''-\vec{r}\,''')U(\vec{r}\,''')\phi_{\vec{k}}(\vec{r}\,''') + \mathcal{O}(g^4) ~.
\end{aligned}
\tag{11.18}
$$

Insertando esta serie en (10.48) obtenemos la serie de Born para la amplitud de colisión,

$$\begin{aligned}
f(\vec{k}\,',\vec{k}) &= -2\pi^2(\phi_{\vec{k}\,'},gU\psi_{\vec{k}}) \\
&= -2\pi^2(\phi_{\vec{k}\,'},gU\phi_{\vec{k}})-2\pi^2g^2(\phi_{\vec{k}\,'},UG_kU\phi_{\vec{k}})-2\pi^2g^3(\phi_{\vec{k}\,'},UG_kUG_k\phi_{\vec{k}})+\mathcal{O}(g^4) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}g^n f_n(\vec{k}\,',\vec{k})~. \qquad (11.19)
\end{aligned}$$

La serie de Born es un desarrollo de Taylor en serie de potencias de g alrededor de $g=0$ y por tanto ello implica que $f(\vec{k}\,',\vec{k};g)$, como función de g, sea analítica en el plano complejo de g alrededor de $g=0$. Veremos posteriormente en la sección 12.4 que los estados ligados corresponden a polos de f y sólo ocurren para valores de g que impliquen un potencial suficientemente atractivo. Por tanto, la presencia de dichos estados para potenciales suficientemente atractivos hace que el desarrollo en potencias de g tendrá un rango de convergencia finito correspondiente a $|g|<|g_c|$, con $|g_c|$ el valor mínimo necesario que dé lugar a la presencia de estados ligados.

La aproximación calculada a un orden finito en potencias de g no cumple el teorema óptico (10.79) exactamente sino de forma perturbativa. Ello es debido a que el teorema óptico implica una relación no lineal entre las amplitudes de colisión, puesto que la sección eficaz es cuadrática en f, mientras que el lado de la derecha del teorema óptico es lineal en f. Escribiendo explícitamente (10.79), empleando la serie de Born,

$$\int d\Omega\left|\sum_{n=1}^{\infty}g^n f_n(\vec{k}\,',\vec{k})\right|^2=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\sum_{n=1}^{\infty}g^n f_n(\vec{k},\vec{k})~. \qquad (11.20)$$

El término de la izquierda sólo empieza a orden g^2. Por lo tanto, a orden g, tenemos:

$$0=g\,\mathrm{Im}f_1(\vec{k},\vec{k})\equiv \mathrm{Im}f_B(k,\theta=0)~, \qquad (11.21)$$

y por lo tanto la amplitud de Born hacia adelante es real independientemente del potencial.

Por otra parte, f_2 es en general compleja puesto que debe cumplir, manteniendo términos a orden g^2 en (11.20),

$$\int d\Omega\,|f_1|^2=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f_2(k,\theta=0)~, \qquad (11.22)$$

y así sucesivamente para órdenes superiores en g. Si calculamos f hasta orden f_n satisfaremos el teorema óptico hasta orden g^n, involucrando en el lado izquierdo de (11.20) las amplitudes f_m, $1\le m\le n-1$.

11.2. La aproximación eikonal

11.2.1. La aproximación semiclásica

Tomemos la siguiente expresión para la función de onda de una partícula,

$$\psi(\vec{x},t)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}S(\vec{x},t)\right)~, \qquad (11.23)$$

y la sustituimos en la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi \ . \tag{11.24}$$

Realizando las pertinentes manipulaciones llegamos a la siguiente ecuación para S,

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left[(\vec{\nabla}S)^2 + \frac{\hbar}{i}\nabla^2 S\right] + V \ . \tag{11.25}$$

Esta ecuación es muy similar a la ecuación de Hamilton-Jacobi en mecánica clásica [13],

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2 + V \ , \tag{11.26}$$

la diferencia reside en la presencia del término proporcional a $\hbar$ que en la ecuación de Hamilton-Jacobi está ausente.

Así pues, en el límite semiclásico de la mecánica cuántica es de esperar que un desarrollo en potencias de $\hbar$ tenga sentido,

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + (\frac{\hbar}{i})^2 S_2 + \ldots \ . \tag{11.27}$$

Sustituimos el desarrollo anterior en (11.25) y resolviendo orden a orden, obtenemos hasta $\mathcal{O}(\hbar)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\hbar^0): &\quad -\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S_0)^2 + V \ , \\ \mathcal{O}(\hbar): &\quad -\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{1}{m}\left[\vec{\nabla}S_0\vec{\nabla}S_1 + \frac{1}{2}\nabla^2 S_1\right] \ . \end{aligned} \tag{11.28}$$

A orden $\hbar^0$, como ya hemos comentado, obtenemos la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi cuya solución es S_0 y es real al igual que S_1. Hasta orden $\hbar$ en S se sigue que

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x},t) &= e^{iS_0/\hbar}\,e^{S_1} \ , \\ |\psi(\vec{x},t)| &= e^{S_1} \ , \\ \text{Fase}(\psi) &= S_0/\hbar \ , \end{aligned} \tag{11.29}$$

por lo tanto,

$$S_0(\vec{x},t) = \lim_{\hbar\to 0}\frac{\hbar}{i}\ln\psi(\vec{x},t) \ . \tag{11.30}$$

De (11.29) también podemos calcular la densidad de probabilidad,

$$\rho(\vec{x},t) = e^{2S_1(\vec{x},t)} + \mathcal{O}(\hbar) \ , \tag{11.31}$$

y la corriente de probabilidad,

$$\vec{j} = \frac{\vec{\nabla}S_0}{m}e^{2S_1} + \mathcal{O}(\hbar) \ . \tag{11.32}$$

Dado que clásicamente $\vec{p} = \vec{\nabla}S_0$, la corriente semiclásica adopta la forma,

$$\vec{j} = \rho(\vec{x},t)\vec{v}_{cla} \ , \tag{11.33}$$

como es de esperar según argumentos clásicos. Por lo tanto, el límite semiclásico de la ecuación de Schrödinger se puede visualizar como el movimiento clásico de una distribución continua de masa total m,

$$\rho_m(\vec{x},t) = \lim_{\hbar\to 0} m|\psi(\vec{x},t)|^2 \ . \tag{11.34}$$

Los efectos no clásicos en el movimiento de la distribución de masas, como por ejemplo el ensanchamiento del tren de onda (10.5), corresponden a órdenes superiores en potencias de $\hbar$. De hecho vemos en (10.5) que, como poco, el ensanchamiento con el tiempo del tren de ondas implica términos de orden $\hbar$ mientras que en el límite semiclásico,

$$\langle(\Delta\vec{x}_t)^2\rangle = \int d^3x'\, \vec{x}\,'^2\, e^{2S_1(\vec{x}\,',t)} - \left(\int d^3x'\, \vec{x}\,' e^{2S_1(\vec{x}\,',t)}\right)^2 \ , \tag{11.35}$$

y es $\mathcal{O}(\hbar^0)$. Las correcciones a la aproximación semiclásica, correspondientes a $\mathcal{O}(\hbar^2)$ en (11.27), son pequeñas supuesto que en la ecuación (11.25) se tenga,

$$\hbar \left|\nabla^2 S_0\right| \ll (\vec{\nabla} S_0)^2 \ . \tag{11.36}$$

Para estimación de órdenes de magnitud, como $\vec{\nabla} S_0 = \vec{p}$, tenemos

$$|\nabla^2 S_0| = |\vec{\nabla}\vec{p}| \simeq \frac{\Delta p}{\Delta x} \ , \tag{11.37}$$

donde Δx es una distancia característica de variación de V, es decir, tal que V varía apreciablemente en un Δx. Por lo tanto, la condición (11.37) la podemos reescribir como,

$$\hbar\frac{\Delta p}{\Delta x} \ll p^2 \ , \tag{11.38}$$

o equivalentemente

$$p\Delta x \gg \hbar\frac{\Delta p}{p} \ . \tag{11.39}$$

- Sistemas macroscópicos. Para este caso típicamente $p\Delta x \gg \hbar$, puesto que $p\Delta x$ es un momento angular macroscópico, y así, aun cuando $\Delta p/p$ fuese incluso de orden uno, se seguiría cumpliendo la desigualdad (11.39).

- Sistemas microscópicos. En este caso, $p\Delta x \sim \hbar$, entonces se requiere que $\Delta p/p \ll 1$, y tenemos que cuanto mayor sea p es más fácil cumplir la condición (11.39).

Para potenciales que no dependan de t, escribimos

$$S = -Et + W(\vec{x}) \ , \tag{11.40}$$

y sustituyendo en (11.25) llegamos a la ecuación,

$$E = \frac{1}{2m}\left[(\vec{\nabla} W)^2 + \frac{\hbar}{i}\nabla^2 W\right] + V \ , \tag{11.41}$$

que correspondería a la ecuación (11.25) pero para el problema de estados estacionarios. En el límite $\hbar = 0$, la ecuación anterior se reduce a,

$$\frac{1}{2m}(\vec{\nabla}W)^2 = E - V \ , \tag{11.42}$$

donde la solución W de esta ecuación se conoce en mecánica clásica como función de Hamilton característica. Para que las correcciones cuánticas sean pequeñas se requiere,

$$\hbar|\nabla^2 W| \ll (\vec{\nabla}W)^2 \ . \tag{11.43}$$

Esta desigualdad implica las mismas condiciones para la validez del desarrollo en potencias de $\hbar$ que las ya discutidas en relación con (11.39).

Consideremos el caso más sencillo de una sola dimensión, entonces la solución de (11.42), es:

$$W(x) = \pm \int^x dx' \sqrt{2m[E - V(x')]} \ , \tag{11.44}$$

donde la constante de integración se fijará dependiendo de las condiciones de contorno. Para un ejemplo concreto véase la siguiente sección. Por lo tanto,

$$\psi(x,t) = \exp\left(\pm i \int^x \frac{dx'}{\lambda(x')}\right) e^{-iEt/\hbar} \ , \tag{11.45}$$

con $\lambda(x) = \hbar/\sqrt{2m[E - V(x)]}$.

La expresión (11.45) es la que se esperaría para un proyectil muy energético, dado que su función de onda debe ser muy próxima a una onda plana. La mejora se sitúa en considerar el momento lineal $\vec{p}$ dependiente de punto, a través de su dependencia con el potencial, dentro de la integral. Este aspecto es muy similar a la relación entre óptica geométrica y óptica ondulatoria.

La forma semiclásica para la función de onda (11.45) también es aplicable en zonas prohibidas clásicamente, donde decae exponencialmente puesto que p es imaginario puro pero no es cero. Esto da lugar a los conocidos fenómenos de efecto túnel. Por el contrario, en los puntos de retroceso clásicos, $x(E)$, donde $p = 0$, es de esperar que la aproximación semiclásica a la ecuación de Schrödinger no sea aplicable en virtud de (11.39). En estos casos, dada su relevancia práctica, por ejemplo en procesos de desintegraciones α de núcleos, se han desarrollado técnicas especiales para casar las soluciones semiclásicas en las zonas clásicamente permitidas y prohibidas. Para ello, en las proximidades del punto de retroceso, donde la energía cinética es nula, se reemplaza V por $E + (x - x(E))dV(x_E)/dx$. La ecuación de Schrödinger se resuelve entonces analíticamente y de forma exacta para un potencial lineal, y estas soluciones se pueden entonces casar suavemente con las formas semiclásicas a ambos lados de $x(E)$ [8].

11.2.2. La aproximación eikonal

Según hemos visto en la sección anterior, la aproximación semiclásica para la función de onda como solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria viene dada por,

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \simeq e^{iW(\vec{r})/\hbar} \ , \tag{11.46}$$

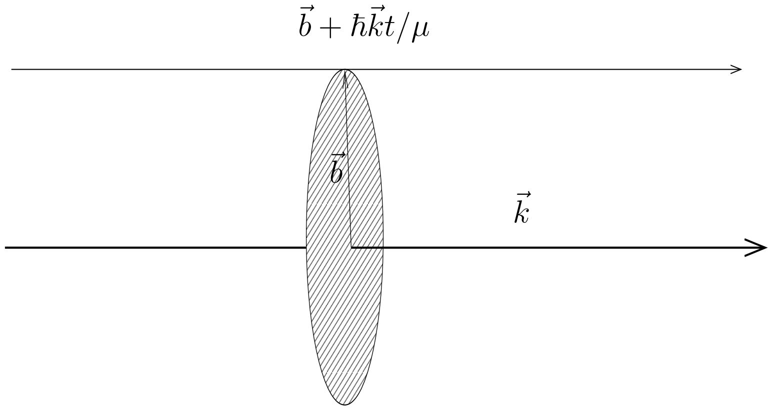

Figura 11.2: El proyectil incide con momento $\hbar\vec{k}$ y parámetro de impacto $\vec{b}$.

donde W satisface la ecuación de Hamilton-Jacobi (11.42),

$$|\vec{\nabla}W(\vec{r})| = \sqrt{2\mu[E - V(\vec{r})]} \;, \tag{11.47}$$

y hemos sustituido m por la masa reducida μ. Resolver esta ecuación diferencial es en sí mismo un problema que puede resultar muy complejo para potenciales realistas donde se quiera aplicar la aproximación eikonal justamente como un método de aproximación que conduzca a soluciones tratables de forma sencilla.

Procedamos a resolver (11.47) de forma aproximada, pero consistente con las condiciones de validez de la aproximación semiclásica (11.39). Supongamos que se trata de proyectiles muy energéticos y, por lo tanto, tomemos una trayectoria recta,

$$\vec{r}(t) = \vec{b} + \frac{\vec{k}\hbar}{\mu}(t - t_0) \;, \tag{11.48}$$

tal que para $t \simeq t_0$ tiene lugar el proceso de interacción. El módulo de $\vec{b}$, b, se denomina parámetro de impacto, ver figura 11.2. En lo que sigue denominamos por $\vec{z} = \vec{k}\hbar(t - t_0)/\mu$. Supongamos además que V es un potencial central. La ecuación (11.47) se reduce a,

$$\left|\frac{\partial W}{\partial z}\right| = \sqrt{2\mu[E - V(\sqrt{b^2 + z^2})]} \;. \tag{11.49}$$

Sólo existe gradiente en la dirección z puesto que $\vec{\nabla}W = \vec{p}$ y $\vec{p} \parallel \vec{k}$ y $\vec{k} \parallel \hat{z}$. Imponiendo que $\psi_{\vec{k}} \to \phi_{\vec{k}}$ para $z \to -\infty$, podemos escribir,

$$\frac{W_k}{\hbar} = kz + \int_{-\infty}^{z} \left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu[E - V(\sqrt{b^2 + z'^{\,2}})]} - k\right) dz' \;. \tag{11.50}$$

Siguiendo con la hipótesis de proyectiles muy energéticos, supondremos adicionalmente que $k^2 \gg |U(r)|$. Desarrollando la raíz cuadrada en (11.50) obtenemos,

$$\frac{W_k}{\hbar} = kz - \frac{1}{2k}\int_{-\infty}^{z} U(\sqrt{b^2 + z'^{\,2}})\, dz' \;. \tag{11.51}$$

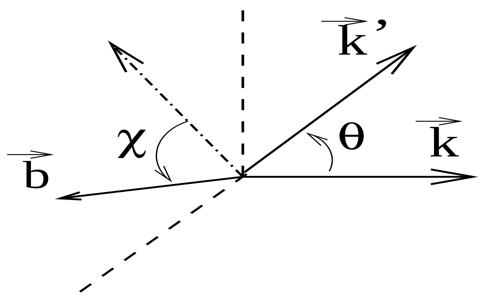

Figura 11.3: El ángulo θ es el ángulo de dispersión y el ángulo acimutal χ, en el plano perpendicular a $\vec{k}$, se mide desde la proyección de $\vec{k}\,'$ en dicho plano hasta la orientación de $\vec{b}$.

Insertando esta expresión en (11.46),

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{b}+\hat{k}z) = \phi_{\vec{k}}(\vec{b}+\hat{k}z)\exp\left\{-\frac{i}{2k}\int_{-\infty}^{z} U(\sqrt{b^2+z'^{\,2}})\,dz'\right\} \ . \tag{11.52}$$

Notemos que $\phi_{\vec{k}}(\vec{b}+\hat{k}z) = \phi_{\vec{k}}(\hat{k}z)$.

La función de onda (11.52) no se comporta como una onda esférica para $z \to \infty$. Sin embargo, dado que dicho comportamiento está tenido en cuenta automáticamente en (10.47), de hecho sólo se necesita una buena aproximación para $\psi_{\vec{k}}$ a la hora de obtener $f(k,\theta)$ según (10.48). Por ello, sólo es suficiente suponer que en efecto (11.52) es una buena aproximación para $z \simeq 0$ (zona de interacción). Lo que sí que debemos esperar es que, consistentemente con nuestras hipótesis, al final se obtenga una amplitud de colisión muy picada hacia adelante, $\theta \simeq 0$. Empleando (11.52) en (10.48) tenemos,

$$f(k,\theta) \simeq -\frac{1}{4\pi}\int d^2b\,dz\,e^{i\vec{q}(\vec{b}+\hat{k}z)}U(\sqrt{b^2+z^2})\exp\left(-\frac{i}{2k}\int_{-\infty}^{z} dz'\,U(\sqrt{b^2+z'^{\,2}})\right) \ , \tag{11.53}$$

puesto que $\vec{q}=\vec{k}-\vec{k}\,'$, resulta,

$$\begin{aligned}\vec{q}(\vec{b}+\hat{k}z) &= kz - \vec{k}\,'\vec{b} - \vec{k}\,'\hat{k}z \\ \vec{k}\,'\vec{b} &= bk\,\mathrm{sen}\theta\cos\chi \simeq bk\,\theta\cos\chi \ ,\end{aligned} \tag{11.54}$$

donde θ es el ángulo de dispersión, y χ es el ángulo acimutal que fija la dirección de $\vec{b}$ en el plano perpendicular a $\vec{k}$. Se toma la proyección de $\vec{k}\,'$ sobre dicho plano para medir χ, véase la figura 11.3. En la última línea se ha hecho uso de que $\mathrm{sen}\theta \simeq \theta$ para θ pequeño, que es la situación que nos ocupa. De este modo, $kz - \vec{k}\,'\hat{k}z = k\theta^2 z/2 + \mathcal{O}(\theta^4) = \mathcal{O}(\theta^2)$ y puede ser eliminado de (11.54) siempre que se cumpla,

$$\theta^2 \ll \frac{1}{ka} \ . \tag{11.55}$$

Tengamos en cuenta que la variable z está restringida en la integral (11.53) al rango propio de la interacción $\sim a$. Finalmente, tenemos por tanto a orden θ que,

$$\vec{q}(\vec{b}+\hat{k}z) = -bk\theta\cos\chi \ . \tag{11.56}$$

Sustituyendo este resultado en (11.53), tenemos:

$$f(k,\cos\theta) \simeq \frac{k}{2\pi i}\int_0^\infty bdb \int_0^{2\pi} d\chi \int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-ikb\theta\cos\chi}\frac{\partial}{\partial z}\exp\left\{\frac{-i}{2k}\int_{-\infty}^{z} U(\sqrt{b^2+z'^{\,2}})dz'\right\} \ . \quad (11.57)$$

Teniendo en cuenta que la función de Bessel de orden cero se puede representar por,

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-ix\cos\chi}d\chi \ , \quad (11.58)$$

llegamos al resultado final de la aproximación eikonal para la amplitud de colisión,

$$\begin{aligned} f(k,\cos\theta) &\simeq -ik\int_0^\infty bdb\, J_0(kb\theta)\left[e^{2i\Delta(b)}-1\right] \\ &= 2k\int_0^\infty bdb\, J_0(kb\theta)e^{i\Delta(b)}\mathrm{sen}\Delta(b) \ , \end{aligned} \quad (11.59)$$

con

$$\Delta(b) = -\frac{1}{4k}\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{b^2+z'^{\,2}})dz' \ . \quad (11.60)$$

Esta función de b de hecho fija el rango de valores que dan contribución en la integral de (11.59), puesto que para $b \gg a$, $U(\sqrt{b^2+z'^{\,2}}) \simeq 0$ en (11.60). Por lo tanto, para esos valores de b se tiene que $\Delta(b) \simeq 0$, que al sustituir en (11.59), no dan contribución porque $\exp(2i\Delta(b)) - 1 \to 0$. Por otra parte, la dependencia en θ en la expresión (11.59) entra a través de $J_0(kb\theta)$, que de hecho es una función muy picada para argumento nulo.

<u>Conexión con la aproximación de Born.</u>

Si $|\Delta(b)| \ll 1$, (11.59) se reduce en primer orden a,

$$f(k,\theta) = -\frac{1}{2}\int_0^\infty bdb \int_{-\infty}^{\infty} dz' J_0(kb\theta)U(\sqrt{b^2+z'^{\,2}}) \ , \quad (11.61)$$

que de hecho coincide con la amplitud de Born (11.2) con la hipótesis de que $\theta^2 \ll 1/ka$. Veámoslo. Teniendo en cuenta (11.56),

$$\vec{r}(\vec{k}-\vec{k}\,') = (\vec{k}-\vec{k}\,')(\vec{b}+\hat{k}z) = -bk\theta\cos\chi \ , \quad (11.62)$$

despreciando $\mathcal{O}(\theta^2)$. Sustituyendo este resultado en (11.2) tenemos:

$$\begin{aligned} f_B(k,\theta) &= -\frac{1}{4\pi}\int_0^\infty bdb\int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{2\pi} d\phi\, e^{-bk\theta\cos\phi}U(\sqrt{b^2+z^2}) \\ &= -\frac{1}{2}\int_0^\infty bdb \int_{-\infty}^{\infty} dz J_0(kb\theta)U(\sqrt{b^2+z^2}) \ , \end{aligned} \quad (11.63)$$

que en efecto coincide con (11.61).

Como ejemplo consideremos el potencial gaussiano,

$$U(r) = U_0\exp\left(-r^2/a^2\right) \ . \quad (11.64)$$

Calculemos $\Delta(b)$ de (11.60),

$$\Delta(b) = -\frac{1}{4k}\int_{-\infty}^{\infty} U_0 e^{-\frac{b^2+z^2}{a^2}} dz = -\frac{\sqrt{\pi}}{4}\frac{U_0 a}{k} e^{-\frac{b^2}{a^2}} \ . \tag{11.65}$$

Por un lado la aproximación de Born implica que $2|\Delta| \ll 1$, que en virtud del resultado anterior se traduce en,

$$|U_0| \ll k/a \ . \tag{11.66}$$

Mientras que la aproximación eikonal requiere,

$$|U_0| \ll k^2 \ , \tag{11.67}$$

que para proyectiles muy energéticos es siempre un requisito más accesible de cumplir que (11.66).

La aproximación eikonal y el teorema óptico.

Veamos a continuación una propiedad muy interesante de la aproximación eikonal y es que ésta satisface el teorema óptico. Para ello calculemos la sección eficaz total resultante de (11.59),

$$\sigma = 2\pi k^2 \int_{-1}^{1} d\cos\theta \int_0^{\infty} bdb \int_0^{\infty} b'db' \, J_0(k\theta b) J_0(k\theta b')[e^{2i\Delta(b)} - 1][e^{-2i\Delta(b')} - 1] \ . \tag{11.68}$$

Cuando la aproximación eikonal está justificada, la distribución angular está fuertemente picada hacia adelante. Por lo tanto, reemplazamos senθ por θ y extendemos la integral en θ de 0 a ∞, puesto que el dominio adicional de integración está suprimido por la dependencia angular de las funciones J_0. Teniendo en cuenta además la relación,

$$\int_0^{\infty} J_0(x\theta) J_0(x'\theta)\theta d\theta = \frac{\delta(x-x')}{x} \ , \tag{11.69}$$

obtenemos la siguiente expresión para σ,

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\infty} bdb \left| e^{2i\Delta(b)} - 1 \right|^2 = 8\pi \int_0^{\infty} bdb \, \mathrm{sen}^2\Delta(b) \ . \tag{11.70}$$

Por otra parte, la amplitud de colisión (11.59) hacia adelante, $\theta = 0$, teniendo en cuenta que $J_0(0) = 1$, resulta,

$$\begin{aligned} f(k,0) &= 2k \int_0^{\infty} b\, db\, e^{i\Delta(b)}\, \mathrm{sen}\Delta(b) \ , \\ \mathrm{Im} f(k,0) &= 2k \int_0^{\infty} b\, db\, \mathrm{sen}^2\Delta(b) \ . \end{aligned} \tag{11.71}$$

Comparando (11.70) y (11.71) obtenemos que en efecto el teorema óptico (10.79) se satisface en la aproximación eikonal.

Capítulo 12

Desarrollo en ondas parciales

El desarrollo en ondas parciales consiste en el estudio del proceso de colisión (10.43) en la base de funciones de onda con momento angular orbital bien definido, especialmente indicado para el caso de potenciales centrales. Sin embargo, para obtener la amplitud de colisión (10.48) hay que pasar de la base de momento angular orbital definido a las soluciones (10.43) y, típicamente, la serie que da lugar al cambio de base se trunca tras un número finito de ondas parciales. Es en este sentido que el desarrollo en ondas parciales, aunque exacto en principio, se puede calificar también de método aproximado para resolver el problema de colisiones.

12.1. Ondas esféricas de partícula libre

Consideremos la ecuación de Schrödinger estacionaria sin potencial. Como el Hamiltoniano de partícula libre es invariante bajo rotaciones espaciales buscamos soluciones con $\vec{\ell}^2$ y ℓ_z bien definidos, de la forma $\psi^0_{E\ell m}(\vec{r}) = R_{E\ell}(r)Y_\ell^m(\theta,\phi)$. Obtenemos entonces la siguiente ecuación para la parte radial,

$$\left(\frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - E\right) R_{E\ell} = 0 \ ,$$
$$p_r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r}\right) \ , \tag{12.1}$$

con E la energía de la autofunción,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \ , \tag{12.2}$$

y k el número de onda. Introduciendo la variable adimensional $\rho = kr$, la ecuación (12.1) se reescribe como

$$\left(\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\rho^2\frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + 1\right) R_\ell(\rho) = 0 \ , \tag{12.3}$$

de modo que la dependencia en E sólo entra en la variable adimensional ρ. Es por ello por lo que hemos eliminado el subíndice E en la función de onda radial. Ésta es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden cuya solución se puede expresar como la combinación lineal de dos soluciones linealmente independientes que se caracterizan según su comportamiento para $\rho \to 0$.

- Solución regular en el origen, $\rho = 0$. Se trata de las funciones de Bessel esféricas, $j_\ell(\rho)$, que cumplen,

$$\begin{aligned} j_\ell(\rho) &\rightarrow \frac{1}{\rho}\mathrm{sen}(\rho - \frac{\ell\pi}{2}) \ , \ \ \rho \rightarrow \infty \ , \\ j_\ell(\rho) &\rightarrow \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!} \ , \ \ \rho \rightarrow 0 \ . \end{aligned} \tag{12.4}$$

- Soluciones divergentes en el origen. Se trata de las funciones de Neumann, $n_\ell(\rho)$, que cumplen,

$$\begin{aligned} n_\ell(\rho) &\rightarrow -\frac{1}{\rho}\cos(\rho - \frac{\ell\pi}{2}) \ , \ \ \rho \rightarrow \infty \ , \\ n_\ell(\rho) &\rightarrow -(2\ell-1)!!\left(\frac{1}{\rho}\right)^{\ell+1} \ , \ \ \rho \rightarrow 0 \ . \end{aligned} \tag{12.5}$$

A partir de las funciones de Bessel y Neumann podemos formar otras dos soluciones irregulares en el origen pero con un comportamiento asintótico para $\rho \rightarrow \infty$ muy interesante para los procesos de colisión. Estas son las funciones de Hankel,

$$\begin{aligned} h_\ell(\rho) &= j_\ell(\rho) + i n_\ell(\rho) \ , \\ h_\ell^*(\rho) &= j_\ell(\rho) - i n_\ell \rho) \ . \end{aligned} \tag{12.6}$$

Para $\rho \rightarrow \infty$ de (12.4) y (12.5) se sigue,

$$h_\ell(\rho) \rightarrow \frac{1}{i^{\ell+1}\rho} e^{i\rho} \ . \tag{12.7}$$

Aquí presentamos la funciones de Bessel y Neumann de menor ℓ,

$$\begin{aligned} j_0 &= \frac{\mathrm{sen}\rho}{\rho} \ , \ j_1 = \frac{\mathrm{sen}\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho} \ , \ j_2 = (\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho})\mathrm{sen}\rho - \frac{3\cos\rho}{\rho^2} \ , \\ n_0 &= -\frac{\cos\rho}{\rho} \ , \ n_1 = -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\mathrm{sen}\rho}{\rho} \ , \ n_2 = -(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho})\cos\rho - \frac{3\mathrm{sen}\rho}{\rho^2} \ . \end{aligned} \tag{12.8}$$

Las funciones de Neumann no son funciones de onda radiales, puesto que p_r^2 no es un operador hermítico actuando sobre $n_\ell(\rho)$, debido a que las derivadas de $1/\rho^{\ell+1}$ dan lugar a singularidades inaceptables para $\rho \rightarrow 0$.

Las funciones j_ℓ forman un conjunto completo de funciones en el dominio $[0, \infty[$,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty j_\ell(kr) j_\ell(kr') k^2 dk &= \frac{\pi}{2r^2}\delta(r - r') \ , \\ \int_0^\infty j_\ell(kr) j_\ell(k'r) r^2 dr &= \frac{\pi}{2k^2}\delta(k - k') \ . \end{aligned} \tag{12.9}$$

Por lo tanto, la función de onda esférica libre, $\psi^0_{E\ell m}(\vec{r})$, viene dada por,

$$\psi^0_{E\ell m}(\vec{r}) = \left(\frac{2k^2}{\pi}\frac{dk}{dE}\right)^{\frac{1}{2}} j_\ell(kr)Y_\ell^m(\theta,\phi) = \left(\frac{2}{\pi}\frac{\mu k}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} j_\ell(kr)Y_\ell^m(\theta,\phi) \ . \tag{12.10}$$

La constante se ha fijado de forma que dichas funciones satisfagan la condición de ortonormalidad,

$$(\psi^0_{E\ell m},\psi^0_{E'\ell' m'}) = \delta(E-E')\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \ . \tag{12.11}$$

En efecto, teniendo en cuenta la ortogonalidad de los armónicos esféricos, (12.9) y la definición (12.10) se sigue que,

$$\begin{aligned}\int d^3r\,(\psi^0_{E\ell m})^*\psi^0_{E'\ell' m} &= \left(\frac{2k^2}{\pi}\frac{dk}{dE}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{2k'^{\,2}}{\pi}\frac{dk'}{dE'}\right)^{\frac{1}{2}}\int d\Omega Y_\ell^m(\hat{r})^* Y_{\ell'}^{m'}(\hat{r})\int_0^\infty r^2 dr j_\ell(kr)j_{\ell'}(k'r)\\ &= \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\frac{dk}{dE}\delta(k-k') = \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\delta(E-E') \ .\end{aligned} \tag{12.12}$$

También en virtud de (12.9), (12.10), y de la relación de completitud de los armónicos esféricos,

$$\sum_{\ell=0}^\infty\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\hat{r}')Y_\ell^m(\hat{r})^* = \sum_{\ell=0}^\infty\sum_{m=-\ell}^{\ell}\langle\hat{r}'|\ell m\rangle\langle\ell m|\hat{r}\rangle = \delta(\hat{r}-\hat{r}') \ , \tag{12.13}$$

se sigue la resolución de la identidad de las funciones $\psi^0_{E\ell m}(\vec{r})$,

$$\sum_{\ell=0}^\infty\sum_{m=-\ell}^{\ell}\int_0^\infty dE\,\psi^0_{E\ell m}(\vec{r})\psi^0_{E\ell m}(\vec{r}\,')^* = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \ . \tag{12.14}$$

Como vimos en la sección 4.2, una partícula libre con momento lineal bien definido viene descrita por una onda plana,

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}e^{i\vec{k}\vec{r}} \ , \tag{12.15}$$

que también constituyen un conjunto completo de funciones,

$$\begin{aligned}\int d^3k\,\phi^*_{\vec{k}}(\vec{r})\phi_{\vec{k}}(\vec{r}\,') &= \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \ ,\\ \int d^3r\,\phi^*_{\vec{k}}(\vec{r})\phi_{\vec{k}\,'}(\vec{r}) &= \delta(\vec{k}-\vec{k}\,') \ .\end{aligned} \tag{12.16}$$

A continuación establecemos el cambio de base entre los sistemas de funciones completas $\{\phi_{\vec{k}}\}$ y $\{\psi^0_{E\ell m}\}$. Puesto que una onda plana $\phi_{\vec{k}}$ posee energía definida, $E=\hbar^2k^2/2\mu$, sólo será combinación lineal de ondas esféricas libres con la misma energía. Además, si hacemos coincidir el eje z, sobre el que se determina ℓ_z, con la dirección de $\vec{k}\equiv k\hat{z}$, resulta,

$$\ell_z\phi_{k\hat{z}}(\vec{r}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\phi_{k\hat{z}}(\vec{r}) = 0 \ , \tag{12.17}$$

y, por tanto, $\phi_{k\hat{z}}(\vec{r})$ es una autoestado de ℓ_z con autovalor cero. De este modo, podemos escribir,

$$\phi_{k\hat{z}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell \psi_{E\ell 0}(\vec{r}) \ . \tag{12.18}$$

Calculando el producto escalar $(\psi_{E'\ell 0}, \phi_{k\hat{z}})$,

$$\begin{aligned} C_\ell \delta(E-E') &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{2k'^{\,2}}{\pi} \frac{dk'}{dE'} \right)^{1/2} \int_0^\infty r^2 dr j_\ell(k'r) \int d\Omega \, e^{ikr\cos\theta} Y_\ell^0(\theta,\phi) \\ &= \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} k'^{\,2} \frac{dk'}{dE'}} \int_0^\infty r^2 dr j_\ell(k'r) \int_{-1}^{1} dx \, e^{ikrx} P_\ell(x) \ . \end{aligned} \tag{12.19}$$

El cálculo de la integral sobre x en la expresión anterior es directo si tenemos en cuenta que

$$j_\ell(\rho) = \frac{1}{2i^\ell} \int_{-1}^{1} e^{i\rho x} P_\ell(x) dx \ . \tag{12.20}$$

Sustituyendo este resultado en (12.19), teniendo en cuenta (12.9), obtenemos finalmente,

$$C_\ell = \frac{i^\ell}{k} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{dE}{dk}} \ . \tag{12.21}$$

Por lo tanto, la serie (12.18) se puede escribir como,

$$\phi_{k\hat{z}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{1}{k^2} \frac{dE}{dk} \right)^{\frac{1}{2}} i^\ell \psi^0_{E\ell 0}(\vec{r}) \ . \tag{12.22}$$

Procedamos a generalizar el resultado anterior para cualquier otra dirección de $\vec{k}$, no necesariamente paralela a $\hat{z}$. Para ello, hagamos uso del teorema de adición de los armónicos esféricos,

$$P_\ell(\hat{r}_1 \hat{r}_2) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_\ell^m(\hat{r}_1) Y_\ell^m(\hat{r}_2)^* \ . \tag{12.23}$$

En nuestro caso, (12.22), aparece $Y_\ell^0(\cos\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\hat{k}\hat{r})$, dado que en (12.22) se ha tomado $\hat{z}||\hat{k}$. Aplicando entonces (12.23), con $\hat{r}_1 \equiv \hat{r}$ y $\hat{r}_2 \equiv \hat{k}$, a $P_\ell(\hat{k}\hat{r})$ obtenemos,

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^\ell \sqrt{\frac{1}{k^2} \frac{dE}{dk}} \psi^0_{E\ell m}(\vec{r}) Y_\ell^m(\hat{k})^* \ , \\ \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^\ell \sqrt{\frac{2}{\pi}} Y_\ell^m(\hat{k})^* j_\ell(kr) Y_\ell^m(\hat{r}) \ . \end{aligned} \tag{12.24}$$

Cada una de las ondas esféricas que contribuyen en la serie anterior son denominadas ondas parciales. De la primera de las dos series se lee directamente,

$$(\psi^0_{E'\ell m}, \phi_{\vec{k}}) = i^\ell \sqrt{\frac{1}{k^2} \frac{dE}{dk}} \delta(E-E') Y_\ell^m(\hat{k})^* \ . \tag{12.25}$$

Las series en (12.24) son fácilmente invertibles, basta para ello realizar la integral $\int d\hat{k}Y_\ell^m(\hat{k})\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ y hacer uso de la relación de ortonormalidad de los armónicos esféricos. Se obtiene de forma directa,#1

$$\psi^0_{E\ell m}(\vec{r}) = i^{-\ell}\sqrt{k^2\frac{dk}{dE}}\int d\hat{k}\, Y_\ell^m(\hat{k})\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \ . \tag{12.26}$$

Esta serie es muy relevante pues nos dice que dado un sistema con momento angular orbital ℓ y energía $E=\hbar^2k^2/2\mu$, su distribución angular en el espacio de momentos viene dada por $Y_\ell^m(\hat{k})$. Como ejemplo tomemos un tren de ondas esféricas con distinta energía,

$$\Upsilon_{\ell m} = \int \chi(E)\psi^0_{E\ell m}dE \ , \tag{12.27}$$

normalizado a la unidad. De (12.25), la probabilidad de obtener el momento lineal $\hbar\vec{k}$ en dicho estado viene dada por:

$$|(\phi_{\vec{k}},\Upsilon_{\ell m})|^2 = \frac{1}{\mu\hbar k}|\chi(E)|^2|Y_\ell^m(\hat{k})|^2 \ . \tag{12.28}$$

Si pensamos que el tren de ondas (12.27) corresponde a un sistema de dos partículas de masa reducida μ y sin espín, que se encuentran en un estado con momento angular orbital definido ℓ y tercera componente $\hbar m$#2, el resultado (12.28) da la probabilidad de que el momento relativo entre ambas partículas sea $\hbar\vec{k}$.

12.2. La ecuación radial integral

En la sección 10.2 planteamos el proceso de colisión en términos de una onda plana incidente que es dispersada y como consecuencia se originan ondas esféricas salientes. En esta sección vamos a hacer uso del cambio de base (12.24) y consideraremos que la onda entrante es una onda parcial libre. De entrada, podemos emplear un argumento semiclásico que nos indica cuántas ondas parciales quedan distorsionadas significativamente en un proceso de colisión. Supongamos que el potencial tiene rango a, con lo que sólo aquellas partículas que incidan con un parámetro de impacto menor o del orden de a se verán afectadas por la colisión. Por lo tanto, si las partículas tienen un número de ondas k, sólo aquellas ondas parciales cuyo momento angular verifique,

$$\hbar\ell \lesssim \hbar k a \ , \tag{12.29}$$

se verán afectadas por la presencia del potencial. Así, podemos hablar de un momento angular máximo, ℓ_{max}, tal que para ℓ mayores las correspondientes ondas parciales no sufren perturbación, tanto menor cuanto mayor sea ℓ. Dicho ℓ_{max} vendrá dado aproximadamente por,

$$\ell_{max} \simeq ka \ . \tag{12.30}$$

#1Resultado que también se obtiene trivialmente de (12.25).

#2Resultante por ejemplo de la desintegración de una partícula de espín ℓ con $j_z=\hbar m$ y, por conservación de momento angular total, estos números cuánticos deben coincidir con ℓ y ℓ_z para el estado final de dos partículas sin espín

Al estudiar el problema de colisión para potenciales centrales, $V(r)$, en la base de autofunciones de momento angular (12.24), se obtiene la ventaja de que hay que resolver varias ecuaciones diferenciales ordinarias para $\ell \lesssim \ell_{max}$, asociadas a la variable radial. Éste es típicamente un problema mucho más sencillo que resolver una ecuación diferencial en derivadas parciales con tres variables independientes.

Siempre podemos considerar que las ondas planas incidentes lo hacen paralelamente al eje z. Entonces, en lugar de utilizar la serie general (12.24), empleamos (12.22) y, para simplificar la escritura, en lugar de escribir $\phi_{\hat{z}k}(\vec{r})$ escribimos simplemente $\phi_k(\vec{r})$. Tenemos,

$$\phi_k(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2\pi^2}} i^\ell j_\ell(kr) Y_\ell^0(\theta) \ , \tag{12.31}$$

con $\cos\theta = \hat{k}\hat{r}$.

Dado que estamos considerando potenciales centrales, $[L_i, V(r)] = 0$, entonces dada una onda esférica incidente con ℓ y ℓ_z bien definido, la onda que resulte también es una autofunción de ℓ^2 y ℓ_z con los mismos autovalores. Por lo tanto, al tener en cuenta la colisión en lugar de la función de onda radial $j_\ell(\rho)$, válida para $V = 0$, se tendrá otra función de onda radial a determinar, $A_\ell(k,r)$, correspondiente al mismo momento angular en la serie (12.31). Por lo tanto, llegamos a la siguiente serie en ondas parciales para la solución (10.43),

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2\ell+1}{2\pi^2}} i^\ell A_\ell(k,r) Y_\ell^0(\theta) \ . \tag{12.32}$$

Tal y como se ha indicado, debido a la conservación de momento angular, tampoco cambia la tercera componente del momento angular orbital y por eso sólo aparecen armónicos esféricos con $m = 0$.

En virtud del argumento clásico esbozado al principio de esta sección, se debe cumplir (aspecto que comprobaremos posteriormente de forma explícita) que,

$$A_\ell \simeq j_\ell \ , \ \ \ell \gg \ell_{max} \ . \tag{12.33}$$

Por lo tanto, si ℓ_{max} no es demasiado grande, el problema completo de colisión queda resuelto una vez determinemos unas pocas ondas parciales.

Nuestro objetivo debe ser: (i) determinar $A_\ell(k,r)$, (ii) obtener $f(k,\theta)$ (10.48) y (iii) verificar que en efecto se satisface (12.33).

En (10.43) hemos llegado a la siguiente ecuación integral para resolver el problema de colisiones,

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \int d^3r' \, G_k(|\vec{r}-\vec{r}\,'|) U(r') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,') \ , \\ G_k(|\vec{r}-\vec{r}\,'|) &= -\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \ . \end{aligned} \tag{12.34}$$

La función de Green, G_k, depende angularmente de $\cos\theta = \hat{r}\hat{r}'$ y admite por lo tanto un desarrollo en polinomios de Legendre. Haciendo de nuevo uso del teorema de adición de los armónicos esféricos

(12.23) podemos escribir,

$$G_k(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)=\sum_{\ell,m} Y_\ell^m(\hat{r})Y_\ell^m(\hat{r}')^* G_k^{(\ell)}(r,r')~. \tag{12.35}$$

Introduciendo los desarrollos (12.31), (12.32) y (12.35) en (12.34) llegaremos a una ecuación integral para $A_\ell(k,r)$,

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \sum_{\ell,m} i^\ell\sqrt{\frac{2}{\pi}}Y_\ell^m(\hat{k})^* j_\ell(kr)Y_\ell^m(\hat{r})+\sum_{\ell,m} i^\ell\sqrt{\frac{2}{\pi}}Y_\ell^m(\hat{k})^* Y_\ell^m(\hat{r})\\ &\times \int_0^\infty r'^{\,2}dr' G_k^{(\ell)}(r,r')U(r')A_\ell(k,r')~. \end{aligned}\tag{12.36}$$

Comparando con (12.32), recuérdese de nuevo el teorema de adición de los armónicos esféricos (12.23) en lo relativo a la suma sobre m, llegamos así a la siguiente ecuación integral para $A_\ell(k,r)$,

$$A_\ell(k,r)=j_\ell(kr)+\int_0^\infty r'^{\,2}dr' G_k^{(\ell)}(r,r')U(r')A_\ell(k,r')~. \tag{12.37}$$

Dado que en (10.43) ya se tuvieron en cuenta las condiciones de contorno adecuadas referente al problema de colisiones, la ecuación (12.37) ya contiene las condiciones de contorno adecuadas para $A_\ell(k,r)$. Teniendo esto en mente, es interesante no obstante determinar las ecuaciones diferenciales satisfechas por $G_k^{(\ell)}(r,r')$ y $A_\ell(k,r)$ para un mejor entendimiento de dichas funciones.

Demostremos que

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+k^2\right)G_k^{(\ell)}(r,r')=\frac{\delta(r-r')}{r^2}~, \tag{12.38}$$

es decir, $G_k^{(\ell)}(r,r')$ es la función de Green asociada la ecuación de Schrödinger radial. Este resultado se deduce de (10.26) sin más que expresar el operador laplaciana en coordenadas esféricas,

$$\begin{aligned}(\nabla^2+k^2)G_k(|\vec{r}-\vec{r}\,'|) &= (\nabla^2+k^2)\sum_{\ell,m} Y_\ell^m(\hat{r})Y_\ell^m(\hat{r}')^* G_k^{(\ell)}(r,r')\\ &= \sum_{\ell,m} Y_\ell^m(\hat{r})Y_\ell^m(\hat{r}')^*\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+k^2\right]G_k^{(\ell)}(r,r')~. \end{aligned}\tag{12.39}$$

Ahora bien, de (12.13) podemos escribir,

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')=\frac{\delta(r-r')}{r^2}\sum_{\ell m} Y_\ell^m(\hat{r})Y_\ell^m(\hat{r}')^*~. \tag{12.40}$$

Igualando (12.39) con (12.40) llegamos a (12.38).

Veamos a continuación que,

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+k^2\right)A_\ell(k,r)=U(r)A_\ell(k,r)~, \tag{12.41}$$

es decir, $A_\ell(k,r)$ satisface la ecuación de Schrödinger para la variable radial. Para ello, teniendo en cuenta la ecuación integral (12.37) satisfecha por A_ℓ y (12.38), se deduce,

$$\begin{aligned}&\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+k^2\right)A_\ell(k,r)\\=&\int_0^\infty r'^{\,2}dr'\frac{\delta(r-r')}{r^2}U(r')A_\ell(k,r')=U(r)A_\ell(k,r)~.\end{aligned}\tag{12.42}$$

A la hora de abordar ecuaciones radiales de Schrödinger resulta conveniente hacer el cambio de función $\psi_\ell = rA_\ell$ y de la ecuación anterior se sigue,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+k^2\right)\psi_\ell = U\psi_\ell~.\tag{12.43}$$

Con la condición de contorno de que $A_\ell(r)$ sea regular en $r=0$, y por tanto, $\psi_\ell(0)=0$.

12.2.1. Cálculo de $G_k^{(\ell)}(r,r')$

Para ello, consideremos la expresión integral de $G_k(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)$ dada en (10.35) con $\mathrm{Im}k>0$,

$$G_k(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)=\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{k^2-q^2+i\epsilon}~,~~\epsilon=0^+~.\tag{12.44}$$

En la integral anterior aparece $e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}\,')}/(2\pi)^{3/2}$, que corresponde al producto de una misma onda plana con momento $\vec{q}$ en los puntos $\vec{r}$ y $\vec{r}\,'$. Teniendo en cuenta el desarrollo en ondas parciales de una onda plana (12.24), insertando un desarrollo para cada onda plana en la integral (12.44) y dada la ortonormalidad de los armónicos esféricos, se llega a,

$$G_k(|\vec{r}-\vec{r}\,'|)=\sum_{\ell,m}Y_\ell^m(\hat{r})Y_\ell^m(\hat{r}')^*\frac{2}{\pi}\int_0^\infty q^2dq\frac{j_\ell(qr)j_\ell(qr')}{k^2-q^2+i\epsilon}~.\tag{12.45}$$

Comparando con (12.35) obtenemos la siguiente expresión integral para $G_k^{(\ell)}(r,r')$,

$$\begin{aligned}G_k^{(\ell)}(r,r')&=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty q^2dq\frac{j_\ell(qr)j_\ell(qr')}{k^2-q^2+i\epsilon}\\&=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^\infty q^2dq\frac{j_\ell(qr)j_\ell(qr')}{k^2-q^2+i\epsilon}~,\end{aligned}\tag{12.46}$$

donde en la última igualdad se ha utilizado que el integrando es par por involucrar las mismas j_ℓ. Puesto que las funciones de Bessel son funciones analíticas, las únicas singularidades del integrando se deben a los ceros del denominador, localizados en $q=\pm(k+i\epsilon)$. A la hora de hacer la integral anterior emplearemos un contorno de integración del tipo mostrado en la figura 10.2.

Supongamos que $r'>r$, tengamos en cuenta que $j_\ell(qr')=[h_\ell(qr')+h_\ell^*(qr')]/2$ y consideremos primero la contribución de $h_\ell(qr')$. Cuando $q\to\infty$ de (12.7) se sigue que $h_\ell(qr')j_\ell(qr)$ decae exponencialmente y la integral se puede cerrar por arriba despreciando la contribución del semicírculo de radio infinito. Para la contribución de $h_\ell^*(qr')$ la integral se cierra por abajo siguiendo el mismo tipo de razonamiento.

Para el primer caso, aplicando el teorema de Cauchy, se tiene,

$$-\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dq q^2 \frac{h_\ell(qr')j_\ell(qr)}{(q-k-i\epsilon)(q+k+i\epsilon)} = -i\frac{k}{2}h_\ell(kr')j_\ell(kr) \ . \tag{12.47}$$

Para el segundo,

$$-\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dq q^2 \frac{h_\ell^*(qr')j_\ell(qr)}{(q-k-i\epsilon)(q+k+i\epsilon)} = -i\frac{k}{2}h_\ell(kr')j_\ell(kr) \ , \tag{12.48}$$

sumando ambas contribuciones obtenemos,

$$G_k^{(\ell)}(r,r') = -ikh_\ell(kr)j_\ell(kr') \ , \tag{12.49}$$

para $r' > r$.

En el supuesto en que $r > r'$, se procede de igual modo y se obtiene el mismo resultado anterior dada la simetría bajo el intercambio $r \to r'$ en (12.46). Por lo tanto,

$$G_k^{(\ell)}(r,r') = -ikh_\ell(kr_>)j_\ell(kr_<) \ , \tag{12.50}$$

donde $r_>(r_<)$ se refieren al mayor(menor) entre r y r'.

12.2.2. Desfasajes

En la integral de (12.37) dado que estamos suponiendo que $U(r)$ es un potencial de corto alcance, en el límite $r\to\infty$ podremos suponer que $r > r'$ en el dominio de integración. Aplicando entonces (12.50) y (12.4), se desprende el siguiente comportamiento asintótico para $A_\ell(k,r)$ para $r\to\infty$,

$$\begin{aligned} A_\ell(k,r) &= \frac{1}{kr}\mathrm{sen}(kr-\ell\frac{\pi}{2}) - \frac{e^{ikr}}{ri^\ell}\int_0^\infty j_\ell(kr')U(r')A_\ell(k,r')r'^2dr' \qquad (12.51)\\ &= -\frac{1}{2ikr}\left\{e^{-i(kr-\ell\frac{\pi}{2})} - e^{i(kr-\ell\frac{\pi}{2})}\left[1-2ik\int_0^\infty j_\ell(kr')U(r')A_\ell(k,r')r'^{\,2}dr'\right]\right\} \ . \end{aligned}$$

Debido a conservación de probabilidad de presencia, el flujo de onda saliente y el flujo de onda entrante debe ser igual. Por lo tanto, dado que el coeficiente que acompaña a $\exp(-i(kr-\ell\pi/2))$ es 1, se sigue que el coeficiente que acompaña a $\exp(i(kr-\ell\pi/2))$ también debe tener módulo unidad,

$$1-2ik\int_0^\infty j_\ell(kr')U(r')A_\ell(k,r')r'^{\,2}dr' = e^{2i\delta_\ell(k)} \ . \tag{12.52}$$

Las funciones de energía $\delta_\ell(k)\in\mathbb{R}$ se denominan desfasajes. Sustituyendo este resultado en (12.51) tenemos el siguiente comportamiento asintótico para $r\to\infty$,

$$\begin{aligned} A_\ell(k,r) &= \frac{-1}{2ikr}\left\{e^{-i(kr-\ell\frac{\pi}{2})} - e^{i(kr-\ell\frac{\pi}{2})}e^{2i\delta_\ell(k)}\right\} \\ &= \frac{e^{i\delta_\ell}}{kr}\mathrm{sen}(kr-\ell\frac{\pi}{2}+\delta_\ell) \ . \qquad (12.53) \end{aligned}$$

Por lo tanto, el único efecto de la interacción para $r \to \infty$ es introducir un cambio de fase, de ahí el nombre de desfasaje. Notemos que cuando no hay interacción, $\delta_\ell = 0 + \text{mod}\pi$, como se sigue de (12.52).

12.2.3. Amplitud de colisión

Comparando entre (10.47) y (12.32),

$$f(k,\theta) = \lim_{r\to\infty} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} Y_\ell^0(\theta) \left[(A_\ell(k,r) - j_\ell(kr)) r e^{-ikr} \right] \;, \tag{12.54}$$

donde θ es el ángulo entre la dirección $\vec{k}$ y $\vec{k}\,'$.

Dado el comportamiento asintótico para $A_\ell(k,r)$ en (12.53),

$$A_\ell(k,r) - j_\ell(kr) = \frac{e^{ikr}}{2i^{\ell+1}kr}(e^{2i\delta_\ell} - 1) \;,\;\; r \to \infty \;. \tag{12.55}$$

Sustituyendo este resultado en (12.54),

$$f(k,\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{i\delta_\ell} \text{sen}\delta_\ell \, Y_\ell^0(\theta) \;. \tag{12.56}$$

La combinación $e^{i\delta_\ell}\text{sen}\delta_\ell/k$ se puede expresar directamente a partir de (12.52) como,

$$\frac{1}{k} e^{i\delta_\ell} \text{sen}\delta_\ell = -\int_0^\infty j_\ell(kr') U(r') A_\ell(k,r') r'^{\,2} dr' \;. \tag{12.57}$$

La sección eficaz total también adquiere una expresión como suma de contribuciones de distintas ondas parciales,

$$\sigma = \int d\Omega |f(k,\theta)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)\text{sen}^2\delta_\ell \equiv \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell \;. \tag{12.58}$$

Dado que $0 \le \text{sen}^2\delta_\ell \le 1$, se sigue,

$$0 \le \sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\text{sen}^2\delta_\ell \le \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1) \;. \tag{12.59}$$

Este resultado se puede emplear en ocasiones a modo de prueba para determinar el número de ondas parciales que puedan contribuir a un determinado proceso. Si se mide σ y ésta resulta que es mayor que $4\pi/k^2$, queda claro que hay más ondas parciales además de $\ell = 0$ u onda S y así sucesivamente para ondas parciales superiores. Otra estrategia es determinar la sección eficaz diferencial (10.64) truncando la serie (12.56). Conforme el número de ondas parciales consideradas aumenta, la distribución angular se hace más compleja. En el límite en que sólo sea relevante la onda S, $\ell = 0$, la sección eficaz diferencial es isótropa. En cuanto ésta deje de serlo, esto implica que otras ondas con $\ell \ge 1$ son relevantes. Recordemos que según el argumento clásico presentado al principio de esta sección ℓ_{max}, dada en (12.30), aumenta con la energía y, por tanto, es de prever que el número de ondas parciales involucradas crezca con ésta. Sólo cuando la longitud de de Broglie $1/k \gg a$, la dispersión vendrá dominada por la onda S únicamente.

También es interesante comprobar explícitamente que el desarrollo (12.56) satisface el teorema óptico (10.79),

$$\begin{aligned} \mathrm{Im} f(k,0) &= \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\mathrm{sen}^2\delta_\ell \\ &= \frac{k}{4\pi}\sigma \ , \end{aligned} \tag{12.60}$$

comparando con (12.58). De hecho este resultado es un caso particular de otro más general que se aplica para $\theta \neq 0$ y que se conoce con el nombre de unitariedad.

En primer lugar es conveniente escribir (12.56) como,

$$\begin{aligned} f(k,\theta) &= \sum_{k=0}^{\infty} f_\ell(k) Y_\ell^0(\theta) \ , \\ f_\ell(k) &= \frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{k} e^{i\delta_\ell(k)}\mathrm{sen}\delta_\ell(k) \ , \end{aligned} \tag{12.61}$$

y las funciones $f_\ell(k)$ se suelen denominar amplitudes de colisión de onda parcial ℓ. Notemos además que $\sigma_\ell(k) = |f_\ell(k)|^2$. También es directo de (12.61) que,

$$\mathrm{Im} f_\ell(k) = \frac{k}{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}\sigma_\ell(k) \ , \tag{12.62}$$

y esta relación se conoce como unitariedad en ondas parciales.

Como sabemos θ es el ángulo entre $\vec{k}\,'$ y $\vec{k}$. Introduzcamos otro número de onda intermedio, $\vec{\kappa}$, y evaluemos

$$\int d\hat{\kappa} f(\vec{k}\,',\vec{\kappa}) f(\vec{k},\vec{\kappa})^* \ . \tag{12.63}$$

Al evaluar la integral anterior tomemos el eje $\hat{z}$ paralelo al momento inicial $\hbar\vec{k}$, y apliquemos el teorema de adición de los armónicos esféricos (12.23) a $Y_{\ell_1}^0(\hat{k}'\hat{\kappa})$, que surge de hacer el desarrollo en ondas parciales (12.56) a $f(\vec{k}\,',\vec{\kappa})$. Resulta,

$$\int d\hat{\kappa} f(\vec{k}\,',\vec{\kappa}) f(\vec{k},\vec{\kappa})^* = \int d\hat{\kappa} \sum_{\ell_1} f_{\ell_1}(k) \sum_{m=-\ell_1}^{\ell_1} \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell_1+1}} Y_{\ell_1}^m(\hat{k}') Y_{\ell_1}^m(\hat{\kappa})^* \sum_{\ell_2} f_{\ell_2}^*(k) Y_{\ell_2}^0(\hat{\kappa}) \ . \tag{12.64}$$

De la ortonormalidad de los armónicos esféricos tenemos,

$$\int d\hat{\kappa} f(\vec{k}\,',\vec{\kappa}) f(\vec{k},\vec{\kappa})^* = \sum_\ell \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} |f_\ell(k)|^2 Y_\ell^0(\hat{k}') \ . \tag{12.65}$$

Comparando este resultado con,

$$\mathrm{Im} f(k,\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{k}{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}} |f_\ell|^2 Y_\ell^0(\theta) \ , \tag{12.66}$$

concluimos,

$$\mathrm{Im} f(k,\theta) = \frac{k}{4\pi}\int d\hat{\kappa} f(\vec{k}\,',\vec{\kappa}) f^*(\vec{k},\vec{\kappa}) \ . \tag{12.67}$$

Para $\vec{k}\,' = \vec{k}$ recuperamos el teorema óptico (10.79) como caso particular, aunque la relación anterior es válida para todo θ y se conoce como unitariedad.

La función de k, $e^{2i\delta_\ell(k)}$, se suele denominar $S_\ell(k)$,

$$S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)} = 1 + \frac{2ik}{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}} f_\ell(k) \ , \tag{12.68}$$

de (12.61) y satisface que $S_\ell(k)S_\ell(k)^* = 1$, resultado que también se suele denominar unitariedad en ondas parciales.

Experimentalmente se determinan los desfasajes mediante los experimentos de colisión conociendo las secciones eficaces diferenciales y totales. Su reproducción en función de la energía constituye un campo de prueba para los potenciales $V(r)$, que en principio pueden ser desconocidos. Dado que en dichos experimentos sólo se determina $d\sigma/d\Omega = |f(k,\theta)|^2$, hay un signo global arbitrario en la determinación de los desfasajes puesto que pasar de f a f^* es equivalente, por (12.56), a pasar de δ_ℓ a $-\delta_\ell$, y esto no altera las secciones eficaces. Este signo global sólo se puede determinar mediante experimentos adicionales que impliquen interferencia con otros potenciales conocidos que sirvan de referencia, por ejemplo el potencial Coulomb que se sabe calcular exactamente. No obstante, el signo de δ_ℓ está directamente vinculado con el signo de V para potenciales suficientemente débiles. De (12.57), para $\delta_\ell \to 0$, se tiene,

$$\delta_\ell(k) \simeq -k\int_0^\infty j_\ell^2(kr)U(r)r^2 dr \ , \tag{12.69}$$

donde como el potencial es débil hemos aplicado la aproximación $A_\ell \simeq j_\ell$ (similarmente a como se hace en la aproximación de Born (11.2)). Por lo tanto, si U nunca cambia de signo queda claro que δ_ℓ será positiva para potenciales atractivos y negativa para potenciales repulsivos. También hay que destacar que la transformación $\delta_\ell \to \delta_\ell + \pi$ deja invariante $f(k,\theta)$. No obstante el convenio habitual es que $\delta_\ell(k) \to 0$ para $k \to 0$, y evitar saltos de módulo π en función de k invocando continuidad.

Veamos a continuación que $\delta_\ell \to 0$ para $\ell \gg \ell_{max}$. Pensemos en lugar de la ecuación integral (12.37), en la ecuación de Schrödinger radial (12.43), que es equivalente a un problema dimensional con el potencial $\hbar^2 W_\ell(x)/2\mu$,

$$\begin{aligned} W_\ell(x) = &\ \ U(x) + \tfrac{\ell(\ell+1)}{x^2} \quad & x > 0 \\ = &\ \ \ \ \ \ \ \ 0 & x < 0 \ , \end{aligned} \tag{12.70}$$

recordemos que a $\hbar^2\ell(\ell+1)/2\mu r^2$ se le denomina potencial centrífugo.

El potencial centrífugo aumenta como $\ell(\ell+1)$ y así, dados dos números cualesquiera $U_0 a^2$ y ka, donde U_0 caracteriza la intensidad del potencial y a su rango, siempre existe un $\ell_{max}(U_0a^2, ka)$ tal que para $\ell > \ell_{max}$, j_ℓ y δ_ℓ se aproximan tanto como se quiera a $A_\ell(k,r)$ y a $e^{i\delta_\ell}\mathrm{sen}\delta_\ell$, respectivamente. Recordemos que en la ecuación diferencial satisfecha por j_ℓ (12.3) el potencial centrífugo está presente pero $U = 0$. Lo que estamos planteando es que para una onda parcial con ℓ suficientemente alto existe insensibilidad a un potencial de corto alcance. Esta condición más elaborada suele ser equivalente a la condición que discutimos anteriormente para establecer ℓ_{max} en (12.30). Para dichas ondas podemos aplicar la aproximación de Born, $A_\ell \simeq j_\ell$, y escribir (12.57), en primer orden en la serie de Born para ondas esféricas, como (12.69).

12.3. Forma asintótica de las funciones de onda radiales

A la hora de obtener $f(k,\theta)$ hemos supuesto que el potencial está confinado a una región finita, $r < a$, y por ello, al estudiar el comportamiento asintótico de A_ℓ en (12.51), supusimos que $r \gg r'$ para $r \to \infty$ en todo el intervalo de integración. Veamos ahora con más detalle la condición suficiente que deben cumplir los potenciales para que esto se pueda realizar. Empleamos para ello la ecuación radial (12.43).

a) Consideremos el conjunto de potenciales que satisfacen

$$\lim_{r\to\infty} r^2 U(r) = 0 \ . \tag{12.71}$$

Entonces para $r \to \infty$ el término proveniente del potencial centrífugo $\ell(\ell+1)/r^2$ domina y tenemos el comportamiento libre asintóticamente. Por lo tanto, la solución para $r \to \infty$ será combinación lineal de las funciones de Bessel y Neumann,

$$A_\ell(k,r) = a_\ell(k) j_\ell(kr) + b_\ell(k) n_\ell(kr) = \frac{\gamma_\ell}{kr} \text{sen}(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell) \ , \ \ r \to \infty \ . \tag{12.72}$$

Aquí se ha hecho uso de las propiedades (12.4) y (12.5).

Para un estado ligado hay que hacer la sustitución $k \to i\alpha$, $\alpha > 0$. En este caso, expresamos la solución como combinación lineal de las funciones de Hankel,

$$A_\ell(k,r) = a_\ell h_\ell(i\alpha r) + b_\ell h_\ell^*(i\alpha r) \ , \ \ r \to \infty \ . \tag{12.73}$$

Teniendo en cuenta las propiedades asintóticas (12.7) y, puesto que las funciones de onda no pueden diverger exponencialmente para $r \to \infty$, se sigue que $b_\ell = 0$ y por lo tanto,

$$A_\ell(k,r) = C\frac{e^{-\alpha r}}{r} \ , \ \ r \to \infty \ , \tag{12.74}$$

tal y como establecimos en (10.50).

En esta discusión el caso en que $\ell = 0$ está excluido aunque el potencial satisfaga (12.71), dado que el potencial centrífugo es idénticamente nulo. Este caso queda englobado en la siguiente discusión.

b) Consideremos ahora la clase de potenciales que cumplen,

$$U(r) = \frac{U_0}{r^s} \;,\;\; 1 \leq s \leq 2 \;,\;\; r \to \infty \;. \tag{12.75}$$

Para $r \to \infty$, $U(r)$ domina sobre el potencial centrífugo (para $s = 2$ el potencial centrífugo simplemente modifica la constante U_0 y este caso también queda incluido en la presente discusión). Tenemos, por tanto, que la ecuación (12.43) para $r \to \infty$ se simplifica a,

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{U_0}{r^s} + k^2\right)\psi_\ell = 0 \;. \tag{12.76}$$

Dado que para $r \to \infty$ el potencial varía muy lentamente podemos pensar en la validez de la aproximación semiclásica y así establecemos la siguiente forma para ψ_ℓ,

$$\psi_\ell(r) = e^{\pm i(kr+u(r))} \;. \tag{12.77}$$

Eliminando u'' y $(u')^2$ frente a u', dado que todo momento (derivada) inducido por la variación espacial del potencial es mucho menor que $\hbar k$, de (12.76) nos queda simplemente la ecuación,

$$\frac{du}{dr} + \frac{U_0}{2kr^s} = 0 \;. \tag{12.78}$$

Para $s > 1$ la solución es:

$$\begin{aligned} u(r) &= -\frac{U_0 r^{1-s}}{2k(1-s)} + C \;, \\ \psi_\ell(r) &= \exp\left[\pm ikr\left(1 - \frac{U_0}{2k^2(1-s)r^s}\right)\right] \simeq e^{\pm ikr} \;,\;\; r \to \infty \;. \end{aligned} \tag{12.79}$$

En la expresión anterior se debe entender la aparición del símbolo $\pm$ en el sentido de que la solución general de (12.76) es una combinación lineal de ondas esféricas salientes (signo $+$) y entrantes (signo $-$). De nuevo, por tanto, volvemos a recuperar el comportamiento asintótico (12.53). Notemos que la solución (12.79) es aplicable para el caso excluido en el caso a) cuando se cumple (12.71) pero $\ell = 0$. En este supuesto $s > 1$ y está claro que las soluciones anteriores están bien definidas.

Para estados ligados, con el signo $+$ en (12.79), hemos de reemplazar $k \to i\alpha$, $\alpha > 0$, y de nuevo se recuperan las formas asintóticas discutidas (10.50).

Como consecuencia de los casos a) y b) podemos por tanto afirmar que las formas asintóticas (10.50) y (12.53) se cumplen para todo potencial que satisface,

$$\lim_{r\to\infty} rU(r) = 0 \;, \tag{12.80}$$

que es la definición precisa de nuestra reiterada afirmación de potencial de corto alcance.

No ocurre lo mismo para $s = 1$, que corresponde al importante caso del potencial de Coulomb. En este supuesto, podríamos seguir con nuestro razonamiento del caso b), hasta llegar a la ecuación diferencial (12.78),

$$\begin{aligned} \frac{du}{dr} + \frac{U_0}{2kr} &= 0 \;, \\ u(r) &= \log r^{\frac{-U_0}{2k}} + A \;, \\ \psi(r)_\ell &= \exp\left[\pm i\left(kr - \frac{U_0}{2k}\log kr\right)\right] \;,\;\; r \to \infty \;. \end{aligned} \tag{12.81}$$

Por supuesto, dado el carácter periódico de la exponencial compleja, el término logarítmico no se puede despreciar.

Haciendo el cambio $k \to i\alpha$, $\alpha > 0$, en la solución anterior, con el signo +, llegamos al comportamiento asintótico para los estados ligados,

$$\psi_\ell = C \exp[-(\alpha r + \frac{U_0}{2\alpha} \log \alpha r)] = (\alpha r)^{-\frac{U_0}{2\alpha}} e^{-\alpha r} \ , \ \ r \to \infty \ , \tag{12.82}$$

y esta función de onda de estado ligado se desvanece muchas más lentamente que para el caso $s > 1$, que es puramente una exponencial decreciente. Dado que el potencial de Coulomb no es un potencial de corto alcance, no podemos determinar un rango propio de la interacción, $a \to \infty$, y en el desarrollo en ondas parciales se debe sumar sobre todas ellas, esto es, no se puede truncar la serie después de considerar unos cuantos términos. Es, por tanto, necesario tratar el caso del potencial de Coulomb separadamente, con métodos propios para este caso particular.

12.4. *Propiedades analíticas de las amplitudes de colisión

La ecuación integral (12.37) nos permite calcular las soluciones de dispersión. Es también muy apropiada a la hora de estudiar las propiedades analíticas de $A_\ell(k,r)$ en función de k. De hecho, recordemos que para $k = i\alpha$, $\alpha > 0$, pasamos a la solución de estado ligado $R_\ell(\alpha, r)$, eliminando el término de onda libre,

$$R_\ell(\alpha, r) = \alpha \int_0^\infty j_\ell(i\alpha r_<) h_\ell(i\alpha r_>) U(r') R_\ell(\alpha, r') r'^{\,2} dr' \ . \tag{12.83}$$

Esta estrecha relación entre soluciones de dispersión y estados ligados nos sugiere que será muy provechoso el estudio de $A_\ell(k,r)$ con k una variable compleja.

Tan pronto como $\mathrm{Im}k \neq 0$, $A_\ell(k,r)$ no es de cuadrado integrable, dado que $j_\ell(kr)$ diverge como una exponencial para $r \to \infty$. Sin embargo, el término puro de dispersión, proporcional a $U(r')$ en (12.37), sí que es convergente cuando $|kr| \to \infty$ e $\mathrm{Im}k > 0$, porque $h_\ell(kr)$ decae exponencialmente en el plano superior de k.

Supongamos que,

$$A(k,r) = \frac{R_\ell(k_0, r)}{(k-k_0)^m} + reg \ , \tag{12.84}$$

donde $m > 0$ y reg indica términos regulares alrededor de k_0. En la expresión anterior $R_\ell(k_0, r)$ es un coeficiente. Para $k \to k_0$ de la ecuación integral (12.37) se llega a,

$$R_\ell(k_0, r) = -ik_0 \int j_\ell(k_0 r_<) h_\ell(k_0 r_>) U(r') R_\ell(k_0, r') r'^{\,2} dr' \ . \tag{12.85}$$

De este modo, identificando $k_0 = i\alpha$, $\alpha > 0$, recuperamos la ecuación integral de estado ligado (12.83) y podemos identificar $R_\ell(k_0, r) \equiv R_\ell(\alpha, r)$, con energía $E = -\hbar^2\alpha^2/2\mu$.

Por lo tanto, $A_\ell(k,r)$ con k complejo tiene, posiblemente, polos correspondientes a estados ligados para ciertos valores de k sobre el eje imaginario positivo de energía $E = -\hbar^2|k|^2/2\mu$. Por otra parte, si $A_\ell(z,r)$ tuviese polos en el semiplano superior de k, no contenidos en el eje imaginario puro, tendríamos soluciones a la ecuación de Schrödinger estacionaria de cuadrado integrable pero con energía imaginaria. Este aspecto está en contradicción con el carácter autoadjunto del Hamiltoniano que obliga a que sus autovalores sean reales y, por lo tanto, no pueden existir tales polos.

Los polos de la amplitud de colisión son de hecho polos simples. Ésta es una propiedad genérica para cualquier potencial y tiene su origen en la función de Green de la ecuación de Schrödinger. Notemos que la función de Green (10.34) es la inversa de $k^2 - 2\mu H_0$, siendo H_0 el Hamiltoniano libre. Podríamos haber tomado igualmente la inversa de cualquier otro Hamiltoniano *no perturbado* y el resto, $H - H_0$ haría las veces de potencial en las consideraciones seguidas hasta ahora, similarmente a como procedimos en teoría de perturbaciones en las secciones 3.3 y 3.4. La inversión de $E - H_0$ implica una integral sobre las autofunciones del espectro continuo más una suma sobre las autofunciones del espectro discreto del Hamiltoniano H_0. Los polos son simples en la energía puesto que en la base que diagonaliza a H_0, $(E - H_0 + i\epsilon)^{-1}$ es diagonal y los polos para E son aquellos valores que coinciden con algunos de los autovalores de H_0. La validez de esta argumentación, para entender el por qué los polos de las amplitudes de colisión son simples, reside en que sea posible elegir H_0 tal que la diferencia pueda ser tratada como una perturbación.

Los estados ligados corresponden a polos aislados para ciertos valores de $\text{Im}k > 0$, dado que constituyen el espectro discreto. Por otra parte, está el espectro continuo y, por tanto, se deben esperar un continuo de singularidades en la inversión de $E - H_0 + i\epsilon$, para valores de E contenidos en el espectro continuo de H_0, y que, por tanto, den lugar a un corte en $f_\ell(E)$, $E = k^2/2\mu$. Matemáticamente esto se comprueba de (12.52), donde aparece $k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2}$. Dado que $\sqrt{E}$ es una función bivaluada, es necesario definir en qué hoja de Riemann se toma la misma. En la hoja física o primera hoja, k es positivo para $E > 0$, lo que implica que $k_I(E) = \sqrt{2\mu E/\hbar^2} = \sqrt{|2\mu E|/\hbar^2} e^{i\phi(E)/2}$, con $\phi(E)$ la fase de E entre $[0, 2\pi[$. En la segunda hoja, $k_{II}(E) = -k_I(E)$ y se comprueba de forma directa que $k_I(E^*) = -k_I(E)^*$. En lo que sigue suprimiremos el subíndice I en $k_I(E)$ y escribiremos simplemente $k(E)$, manteniendo la notación que se ha seguido hasta ahora.

Con este preámbulo, veamos que en efecto $S_\ell(E)$ dada en (12.52) es discontinua para $E > 0$,

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \left[S_\ell(E + i\epsilon) - S_\ell(E - i\epsilon)\right] = S_\ell(k(E)) - S_\ell(-k(E)) \ . \tag{12.86}$$

Para calcular la diferencia anterior, consideremos la solución formal iterativa de (12.52) a todos los órdenes en potencias de $U(r')$. Se procede análogamente a la serie de Born (11.19), pero ahora para ondas parciales al resolver iterativamente (12.37) y sustituyendo orden a orden en (12.52). Tenemos,

$$S_\ell(k) = 1 - 2ik(j_\ell, U j_\ell) - 2ik(j_\ell, U G_k^{(\ell)} U j_\ell) - 2ik(j_\ell, U G_k^{(\ell)} U G_k^{(\ell)} U j_\ell) + \ldots \ , \tag{12.87}$$

con la misma notación que en (11.19) pero integrando sólo sobre la variable radial. Recordando que $j_\ell(-kr) = (-1)^{\ell+1} j_\ell(kr)$ y que $h_\ell(-kr) = (-1)^{\ell+1} h_\ell^*(kr)$, y que son funciones analíticas en kr, es directo comprobar que,

$$S_\ell(-k) = 1 + 2ik(j_\ell, U j_\ell) + 2ik(j_\ell, U G_k^{(\ell)\,*} U j_\ell) + 2ik(j_\ell, U G_k^{(\ell)\,*} U G_k^{(\ell)\,*} U j_\ell) + \ldots \ , \tag{12.88}$$

puesto que siempre aparece un par explícito de funciones j_ℓ en (12.87) y $G_{-k}^{(\ell)}(r,r') = G_k^{(\ell)}(r,r')^*$, como se desprende de (12.50). Por lo tanto se tiene,

$$S_\ell(-k) = S_\ell(k)^* \ , \ \ k > 0 \ . \tag{12.89}$$

Introduciendo este resultado en (12.86) obtenemos el valor de la discontinuidad,

$$\lim_{\epsilon\to 0^+} \left(S_\ell(E+i\epsilon) - S_\ell(E-i\epsilon)\right) = 2i\, \mathrm{Im} S_\ell(k) \ . \tag{12.90}$$

A partir de (12.57) obtenemos la expresión $f_\ell(E) = -\sqrt{4\pi(2\ell+1)}(j_\ell, UA_\ell)$. De este resultado podemos proceder análogamente a como hemos hecho para $S_\ell(E)$ y llegamos a que

$$\lim_{\epsilon\to 0^+} \left(f_\ell(E+i\epsilon) - f_\ell(E-i\epsilon)\right) = 2i\mathrm{Im} f_\ell(E) = \frac{ik}{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}\sigma_\ell(k) \ , \tag{12.91}$$

teniendo en cuenta (12.62).

Desde un punto de vista físico no deben existir en el plano complejo E más singularidades de $S_\ell(E)$ o $f_\ell(E)$ impuestas por la estructura de (12.52) y válidas para cualquier potencial. No obstante determinados potenciales, por ejemplo, singulares en el origen, dan lugar a cortes adicionales en $S_\ell(E)$ debido a la dinámica particular contenida en el mismo. De esto se concluye que $S_\ell(E)$ es una función que cumple el teorema de reflexión de Schwartz, dado que es una función que sólo tiene como discontinuidades cortes y polos, y además en algún fragmento del eje real de E es real, por ejemplo para un segmento de $E < 0$ que no contenga ninguno de los valores discretos de energía de enlace de estado ligado ni incluya un hipotético corte asociado a $U(r')$. Por lo tanto, aplicando dicho teorema de variable compleja se deduce que,

$$\begin{aligned} S_\ell(E)^* &= S_\ell(E^*) \ , \\ f_\ell(E)^* &= f_\ell(E^*) \ . \end{aligned} \tag{12.92}$$

Una vez hemos llegado a (12.92) se recobran (12.90) y (12.91) tomando en las expresiones anteriores $E \to E + i\epsilon$.

Dado un potencial V que acepte transformada de Fourier, siempre podemos multiplicarlo por un parámetro adimensional λ suficientemente pequeño tal que la aproximación de Born sea aplicable. Vimos en (11.21) que la amplitud de colisión de Born, $f_B(\vec{k}\,', \vec{k})$, es proporcional a la transformada de Fourier de V, y éste no sería hermítico si en el espacio de momentos, es decir su transformada de Fourier, tuviese cortes que se solapasen con el corte debido a (12.90), para $E > 0$. Por lo tanto los cortes de f_ℓ inducidos por V no se solapan con el corte que distingue entre la primera y segunda hoja de Riemann debidos a la forma de la función $k(E)$.

En la segunda hoja de Riemann seguimos teniendo el corte (12.90), que distingue entre esta hoja y la física, y las posibles singularidades dependientes del proceso dadas por V. Además, podemos tener también polos en $A_\ell(k_{II}(E), r)$ para valores de k con $\mathrm{Im}k < 0$. De hecho, se puede utilizar el mismo argumento que anteriormente utilizamos para los estados ligados para concluir que es posible que (12.37) pueda tener polos para $k_0 = k_r - i\,k_i$, con $k_i > 0$. En este caso, el coeficiente del polo satisface la ecuación, análoga a (12.85),

$$R_\ell(k_0, r) = -ik_0 \int j_\ell(k_0 r_<) h_\ell(k_0 r_>) U(r') R_\ell(k_0, r') r'^{\,2} dr' \ . \tag{12.93}$$

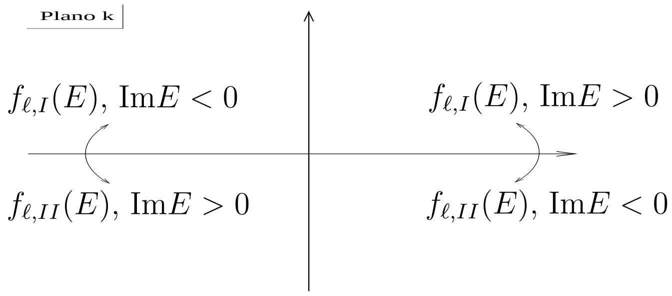

Figura 12.1: En el plano complejo k, se indican las distintas hojas de Riemann en función de la energía E para la amplitud de colisión $f_\ell(E)$.

No obstante, para $r\to\infty$ estas funciones de r divergen para potenciales que se anulan para $r>a$, por ejemplo pozos cuadrados, debido al comportamiento asintótico de $h_\ell(k_0 r)$ con Im$k_0<0$, ver (12.7). Cuando $k_r=0$, los polos anteriores se denominan estados ligados virtuales o estados antiligados debido al comportamiento exponencial creciente para $r\to\infty$ al que hemos aludido, mientras que para un estado ligado el comportamiento es exponencialmente decreciente, según hemos visto en la sección (12.3). Cuando $k_r>0$ los polos se denominan resonancias. En la figura 12.1, haciendo uso del principio de reflexión de Schwartz (12.92), se han indicado las distintas hojas de Riemann en la variable E, pero en plano complejo k. El tránsito entre la hoja física y la segunda se indica mediante flechas. La verificación de esta figura se deja como ejercicio al lector.

12.4.1. *Dispersión resonante

Analicemos a continuación el significado de la divergencia exponencial presente en (12.93) cuando se tiene un polo correspondiente a una resonancia. Para ello, consideremos que inicialmente se dispone de un tren de ondas que suficientemente lejos de la zona de interacción, evoluciona temporalmente según el Hamiltoniano libre,

$$\psi(\vec{r},t)=\int d^3k\,\chi(k)e^{i\vec{k}\vec{r}-\hbar^2k^2t/2\mu}\;. \tag{12.94}$$

La función $\chi(k)$ determina la distribución del tren de ondas en el espacio de ondas planas de acuerdo a su energía. Supondremos en lo que sigue que se trata de una función muy picada alrededor del valor $k=k_r$, tal que, para $k=k_r-ik_i$, se tiene una resonancia en onda S, $\ell=0$. Una vez tiene lugar la interacción con el blanco, cada onda plana del tren de ondas $\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ debe ser reemplazada por $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ de (10.43) que, para r mucho mayor que el rango del potencial, adopta la forma asintótica (10.47). Sustrayendo de la solución completa la parte libre (12.94), con lo que nos centramos únicamente en la parte dispersada proporcional a $f(\vec{k}\,',\vec{k})$, resulta,

$$\psi(\vec{r},t)_{dis}=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{r}\int d^3k\,\chi(k)e^{i(kr-\hbar^2k^2t/2\mu)}\,f(\vec{k}\,',\vec{k})\;. \tag{12.95}$$

Como hemos supuesto una resonancia en $\ell = 0$ y que $\chi(k)$ está muy picada alrededor de ésta, tomamos la siguiente aproximación para $f(\vec{k}', \vec{k})$,

$$f \simeq f_0 \simeq \frac{1}{k}\frac{R_0}{k - k_r + i\,k_i} \;, \tag{12.96}$$

y supondremos que k_i es mayor que la anchura de $\chi(k)$ alrededor de k_r. Por ejemplo podemos tomar

$$\chi(k) = \frac{\chi_0}{k - k_r + i\kappa} \;, \tag{12.97}$$

tal que $\kappa \gg k_i$. A continuación reescribamos la dependencia temporal de (12.95) como,

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}k^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}(k - k_r + k_r)^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left((k - k_r)^2 + k_r^2 + 2k_r(k - k_r)\right) \;. \tag{12.98}$$

Se trata de despreciar el término cuadrático frente al lineal puesto que como hemos dicho $\chi(q)$ está muy picada alrededor de k_r. Esta aproximación es posible para tiempos t tales que,

$$\frac{\hbar^2(k - k_r)^2 t}{2\mu} \ll \hbar \;, \tag{12.99}$$

es decir, para tiempos t que sean mucho menores que el tiempo de ensanchamiento de un tren de ondas gaussiano, de acuerdo a (10.12) con $\Delta p \sim \kappa$. Una vez se desprecia el término cuadrático en (12.98) el remanente se puede escribir como,

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}k^2 \simeq -\frac{\hbar^2 k_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 k_r k}{\mu} \;. \tag{12.100}$$

En lo que sigue para simplificar la notación denominaremos por $w_r = \hbar^2 k_r^2/2\mu$ y por $v_r = \hbar k_r/\mu$. Teniendo en cuenta (12.100) reescribimos (12.95) como,

$$\psi(\vec{r}, t)_{dis} \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{r}e^{iw_r t}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\, k\chi(k)\frac{R_0}{k - k_r + i\,k_i}e^{ik(r - v_r t)} \;. \tag{12.101}$$

En esta integral hemos aumentado el dominio de integración de $[0, \infty[$ a $]-\infty, \infty[$ dado que $\chi(k)$ está limitado a un entorno de k_r. Puesto que el polo explícitamente mostrado en (12.101) está en el semiplano inferior de k, así como el de $\chi(k)$, según (12.97), se sigue que para $r > v_r t$ la función de onda dispersada es nula. Esto se sigue de calcular la integral (12.101) aplicando el teorema de Cauchy de integración completando el circuito de (12.101) con un semicírculo infinito en el semiplano superior de k. Esto implica, que si hay un observador situado en r_0 éste no recibirá ninguna partícula dispersada hasta que haya transcurrido un tiempo mínimo de recepción $t_r = r_0/v_r$. Para $r < v_r t$ procedemos de igual modo, pero cerrando el circuito de integración en el semiplano inferior de k, y obtenemos entonces el siguiente resultado:

$$\begin{aligned} &r > v_r t \qquad \psi_{dis}(\vec{r}, t) = 0 \;, \\ &r < v_r t \quad \psi_{dis}(\vec{r}, t) = -\tfrac{\sqrt{8\pi}}{r}e^{iw_r t}\tfrac{R_0\chi_0}{\kappa - k_i}\left\{(k_r - ik_i)e^{i(k_r - ik_i)(r - v_r t)} - (k_r - i\kappa)e^{i(k_r - i\kappa)(r - v_r t)}\right\} \;. \end{aligned} \tag{12.102}$$

Vemos por tanto que el tren de ondas mantiene una estructura de frente de onda habiendo un tiempo bien definido de llegada de la función de onda, al igual que para el caso libre que ya discutimos en la sección 10.1.

Claramente hay dos contribuciones de estructura análoga en (12.102) dada la forma similar de las funciones $\chi(k)$ y $f_0(k)$. Supongamos que ha transcurrido el tiempo t_r y que el frente de ondas ya ha llegado a la posición de los detectores y que ha transcurrido un intervalo de tiempo suficientemente grande tal que $t \gg t_r = r_0/v_r$, recordemos que también habíamos impuesto la condición (12.99). Para estas circunstancias realistas de observación, y dado que recordemos que $\kappa \gg k_i$, los detectores comprobarían la siguiente probabilidad de presencia en función de tiempo,

$$|\psi_{dis}(\vec{r},t)|^2 \underset{t \gg t_r}{\longrightarrow} \frac{R_0^2 \chi_0^2 k_r^2 8\pi}{r^2 \kappa^2} e^{-2k_i v_r (t-t_r)} \equiv \frac{\mathcal{C}}{r^2} e^{-(t-t_r)/\tau_n} \ , \tag{12.103}$$

con $\tau = 1/2k_i v_r$ y $\mathcal{C}$ una constante positiva. Es decir, mucho después de haber pasado el frente de ondas en t_r, los contadores continuarían midiendo la llegada de una distribución esféricamente simétrica de partículas que decae exponencialmente en el transcurso del tiempo de acuerdo a una ley de desintegración de vida media τ, inversamente proporcional a k_i.

Esta misma ley exponencial de desintegración, se obtiene si la función de evolución temporal para una estado estacionario, $\exp(-iEt/\hbar)$, la aplicamos para E igual a la posición del polo de la resonancia en la segunda hoja de Riemann, $E \simeq \hbar^2(k_r^2 - 2ik_r k_i)/2\mu$ para $k_i \ll k_r$. Así, obtenemos la función exponencialmente decreciente con el tiempo,

$$|e^{-iE_r t/\hbar}|^2 = e^{-\hbar 2k_r k_i t/\mu} = e^{-t/\tau}. \tag{12.104}$$

Para finalizar estas consideraciones sobre dispersión resonante, calculemos la sección eficaz para la amplitud de colisión dominada por una resonancia (12.96) pero en una onda parcial arbitraria. La sección eficaz viene dada por,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{1}{k^2} \frac{R_\ell^2}{(k-k_r)^2 + k_i^2} |Y_\ell^0(\theta)|^2 \ , \tag{12.105}$$

Ello induce la aparición del armónico esférico $Y_\ell^0(\theta)$ en virtud de (12.61). En la figura 12.2 se muestra la dependencia en k de (12.105) para $\ell = 0$ normalizada a 1 en el pico. Se aprecia claramente un máximo localizado en k_r y una anchura en la distribución dada por k_i, tal que para $k = k_r + k_i$ el valor obtenido es aproximadamente el valor en el pico dividido por 2. Esto hace que si $k_i \ll k_r$ podamos aproximar $1/k^2$ en (12.105) por $1/k_r^2$ y obtenemos,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{1}{k_r^2} \frac{R_\ell^2}{(k-k_r)^2 + k_i^2} |Y_\ell^0(\theta)|^2 \ , \tag{12.106}$$

que corresponde a una lorenciana. A partir de la sección diferencial anterior, obtenemos la sección eficaz total,

$$\sigma = \frac{1}{k_r^2} \frac{R_\ell^2}{(k-k_r)^2 + k_i^2} \ , \tag{12.107}$$

que corresponde a la gráfica en 12.2.

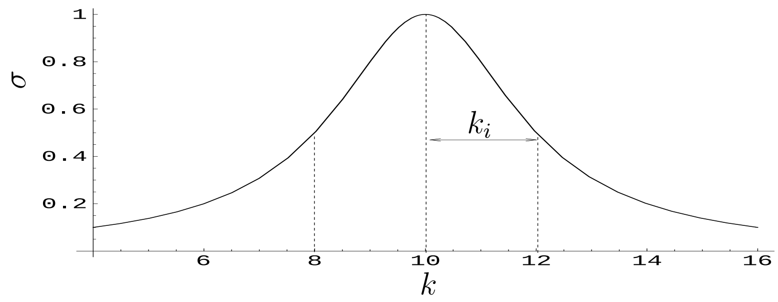

Figura 12.2: Sección eficaz total dominada por una resonancia localizada en k_r y de anchura k_i.

Por tanto, las resonancias se pueden distinguir experimentalmente mediante la presencia de máximos en la sección eficaz total. El momento angular ℓ al que están adscritas, se puede determinar midiendo la distribución angular, esto es, la sección eficaz diferencial. A este respecto es interesante darse cuenta que para $k = k_r$ la amplitud de colisión resonante (12.105) cumple el requerimiento de unitariedad en ondas parciales (12.62) con:

$$R_\ell = -\frac{\sqrt{4\pi(2\ell+1)}}{k_i} \ . \tag{12.108}$$

Entonces para $k = k_r$, f_ℓ es en un número puramente imaginario y positivo, lo que corresponde a un múltiplo impar de $\pi/2$. Para este valor se alcanza precisamente el máximo posible de σ_ℓ, véase (12.58). Por lo tanto, otra forma posible de determinar el momento angular de la resonancia que domina el proceso de colisión, es comprobar el valor en el máximo y ver que aproximadamente corresponde al valor máximo de σ_ℓ para algún ℓ.

12.5. *Desarrollo de alcance efectivo

A bajas energías, con ℓ_{max} pequeña, sólo unas pocas ondas parciales son suficientes para describir el proceso de colisión. En tales circunstancias, además, sólo unos pocos parámetros son suficientes para caracterizar los desfasajes de cada onda parcial en función de la energía. La fórmula original del desarrollo de alcance efectivo fue debida a J. Schwinger, pero H. Bethe [18] ofreció una demostración más sencilla en la que nos vamos basar en esta sección.

Consideremos la ecuación de onda radial (12.43) para $\ell = 0$ y sean u_1 y u_2 dos soluciones que se anulan en $r = 0$, con números de onda independientes, k_1 y k_2, respectivamente. Escribimos (12.43) particularizada a nuestro caso concreto:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k_1^2 - U\right) u_1 = 0 \ , \tag{12.109}$$

y

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k_2^2 - U\right) u_2 = 0 \ . \tag{12.110}$$

Multiplicando (12.109) por u_2 y (12.110) por u_1, restando e integrando por partes, obtenemos:

$$u_2 u_1' - u_1 u_2'|_0^R = (k_2^2 - k_1^2)\int_0^R u_1 u_2 dr \ , \tag{12.111}$$

donde el límite superior R es arbitrario. Así mismo se ha indicado con una prima la derivada radial.

Consideremos a continuación las funciones de onda auxiliares ψ_1 y ψ_2 que son iguales al comportamiento asintótico de u_1, u_2, en orden, para $r \to \infty$,

$$\begin{aligned}\psi_1(r) &= A_1 \mathrm{sen}(k_1 r + \delta(k_1)) \ , \\ \psi_2(r) &= A_2 \mathrm{sen}(k_2 r + \delta(k_2)) \ . \end{aligned}\tag{12.112}$$

Los números A_1 y A_2 se pueden determinar comparando con (12.53). No obstante, para nuestras consideraciones presentes, es conveniente ajustarlos de modo que $\psi_1(0) = \psi_2(0) = 1$. Por lo tanto tomaremos,

$$\psi_i(r) = \mathrm{sen}(kr + \delta)/\mathrm{sen}\delta(k_i) \ . \tag{12.113}$$

Esta elección de los coeficientes A_i fija a su vez la normalización de las funciones $u_i(r)$, ya que las ψ_i han de coincidir con el comportamiento asintótico de las u_i. Las ψ_i satisfacen $(d^2/dr^2 + k_i^2)\psi_i(r) = 0$ y por lo tanto se obtiene una relación análoga a (12.114),

$$\psi_2 \psi_1' - \psi_1 \psi_2'|_0^R = (k_2^2 - k_1^2)\int_0^R \psi_1 \psi_2 dr \ . \tag{12.114}$$

Sustrayendo (12.111) a (12.114), teniendo en cuenta que $u_i(0) = 0$ y que para $R \to \infty$ $u_i(R) \to \psi_i$ se tiene que

$$(\psi_1 \psi_2' - \psi_2 \psi_1')_{r=0} = (k_2^2 - k_1^2)\int_0^\infty (\psi_1 \psi_2 - u_1 u_2) dr \ . \tag{12.115}$$

Puesto que las $\psi_i(r)$ vienen dadas por (12.113), es trivial calcular su derivada normal en $r = 0$, y teniendo en cuenta que están normalizadas a uno en $r = 0$ podemos escribir (12.115) como,

$$k_2 \mathrm{cot}\delta(k_2) - k_1 \mathrm{cot}\delta(k_1) = (k_2^2 - k_1^2)\int_0^\infty (\psi_1 \psi_2 - u_1 u_2) dr \ . \tag{12.116}$$

Esta ecuación es exacta. Hagamos a continuación que $k_1 \to 0$ y designemos en lo que sigue a k_2 simplemente por k,

$$k \mathrm{cot}\delta_\ell(k) = \lim_{k_1 \to 0} k_1 \mathrm{cot}\delta_\ell(k_1) + k^2 \int_0^\infty (\psi_0 \psi - u_0 u) dr \ , \tag{12.117}$$

donde el subíndice 0 indica que las funciones de onda correspondientes se han de evaluar en $k = 0$. Notemos que la integral anterior está restringida a la zona de colisión donde se diferencian las funciones u_i y ψ_i, puesto que fuera de dicha zona tienden a ser iguales. Así, en el límite de bajas energías, puesto que la energía potencial V en esta zona es mucho mayor que k^2, dado que $k \to 0$, la dependencia de la integral anterior en energías es muy débil. Por lo tanto, a bajas energías dicha integral está dominada por la contribución que proviene de sustituir u por u_0 y ψ por ψ_0 y tenemos,

$$k\cot\delta(k) \simeq \lim_{k_1\to 0} k_1\cot\delta(k_1) + k^2\int_0^\infty (\psi_0^2 - u_0^2)dr \ . \tag{12.118}$$

El límite,

$$\lim_{k\to 0} k\cot\delta(k) = -\frac{1}{a_0}, \tag{12.119}$$

fija la longitud de dispersión de onda S, a_0. Mientras que es habitual denotar por,

$$r_0 = 2\int_0^\infty (\psi_0^2 - u_0^2)dr \ . \tag{12.120}$$

A r_0 se le conoce como alcance efectivo, puesto que el integrando es sólo apreciable dentro de la zona de colisión y, por ende, r_0 debe ser del orden del rango del potencial. Teniendo en cuenta (12.119) y (12.120), podemos reescribir (12.118) como,

$$k\cot\delta = -\frac{1}{a_s} + \frac{1}{2}r_0 k^2 + \ldots \tag{12.121}$$

expresión que se conoce con el nombre de desarrollo de alcance efectivo. El resto en la expresión anterior es de hecho de orden $k^4 r_0^3$ [18].

Para el resto de ondas parciales con $\ell > 0$ el límite $k\cot\delta_\ell(k)$ es cero [2]. Nosotros nos conformaremos en este texto con justificar dicho comportamiento para el límite de dispersión debida a un potencial débil en el sentido especificado para la aplicabilidad de la serie de Born. En este caso podemos sustituir $A_\ell(kr)$ por $j_\ell(kr)$ en (12.52) y desarrollando en serie de δ_ℓ el lado derecho de la fórmula, se obtiene que en efecto los desfasajes para pequeñas energías van como $k^{2\ell+1}$ teniendo en cuenta (12.4). Por lo tanto, en este límite de dispersión débil a bajas energías tendremos,

$$\lim_{k\to 0} k^{2\ell+1}\cot\delta_\ell(k) = -\frac{1}{a_\ell} \ , \tag{12.122}$$

con a_ℓ la longitud de dispersión de onda ℓ-ésima aunque se debe tener en cuenta que sus dimensiones son las de (espacio)$^{2\ell+1}$ y así para las ondas P, a_1 tiene dimensiones de volumen.

12.6. Colisiones con sistemas complejos

La teoría de colisiones que hemos presentado hasta ahora se basa en la ecuación de Schrödinger para un cuerpo con un Hamiltoniano hermítico que conduce a la conservación de probabilidad.

Sin embargo, muchos de los resultados obtenidos hasta ahora se pueden generalizar para incluir las colisiones con sistemas complejos. En estos sistemas, por ejemplo, átomos, núcleos, etc, el estado inicial del sistema, si el intercambio de energía durante la colisión es suficientemente elevado, puede cambiar, pasando el blanco, por ejemplo, a un estado interno excitado con mayor energía que tomaría de la energía inicial del proyectil. Puede incluso ocurrir que el proyectil quede absorbido por el blanco y emita nuevas partículas,

$$\pi^- + O^{16} \to N^{14} + n + n \ . \tag{12.123}$$

En física de altas energías es corriente la generación de nuevas especies de partículas a partir del vacío sin necesidad de disponer de un blanco complejo,#3

$$\pi^-\pi^+ \to K\bar{K} \ . \tag{12.124}$$

No obstante, seguiremos hablando de *sistema complejo* para hacer la discusión más intuitiva, aun cuando todo lo que se diga aquí es válido para cualquier reacción donde el estado final tras la colisión no contenga necesariamente las mismas partículas o sistemas en los mismos estados internos de energía. En este punto seguiremos estudiando el canal elástico, es decir, entre todos los procesos posibles y abiertos para una cierta energía, seguiremos estudiando el estado final que contenga las mismas partículas y con la misma energía interna que el estado inicial. No obstante, debido a la apertura de otros canales (esto es, de otros procesos permitidos) la discusión no es tan simple como la desarrollada hasta ahora a raíz de (10.23). Seguiremos considerando sistemas sin espín.

Suponiendo que el potencial sea invariante bajo rotaciones, independientemente de si el blanco es o no complejo, debe conservarse el momento angular orbital inicial. Por lo tanto, para $r \to \infty$,

$$\begin{array}{ccc} \text{Onda inicial} & & \text{Onda final} \\ j_\ell(kr) & \to & h_\ell^*(kr) + \eta_\ell h_\ell(kr) \ . \end{array} \tag{12.125}$$

Para los sistemas estudiados hasta el punto anterior, $\eta_\ell = e^{2i\delta_\ell}$, tal y como se discutió después de (12.51). En nuestro caso presente esto no es así, puesto que debido a la apertura de nuevos canales, la probabilidad de volver a obtener el canal inicial no es 1 sino menor que 1. Por ello, en lugar de que $|\eta_\ell| = 1$ tendremos en general menor flujo de partículas salientes que entrantes y, por tanto, $|\eta_\ell| \le 1$,

$$\eta_\ell = |\eta_\ell| e^{2i\delta_\ell} \ . \tag{12.126}$$

A $|\eta_\ell| \le 1$ se le llama inelasticidad. Si insistimos en expresar $\eta_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)}$, entonces los desfasajes $\delta_\ell(k)$ son complejos con una parte imaginaria positiva tal que se obtenga el módulo apropiado de $\eta_\ell(k)$. Cuando se escribe explícitamente el módulo de η_ℓ se tomarán los desfasajes $\delta_\ell(k)$ reales. Por el contrario, cuando no se especifique el módulo de $\eta_\ell(k)$, los δ_ℓ serán complejos, en el caso, por supuesto, de presencia de otros canales inelásticos.

A partir de este punto, sustituyendo $e^{2i\delta_\ell}$ por $|\eta_\ell|$ en (12.53) tenemos:

$$A_\ell(k,r) = \frac{1}{2ikr}\left(e^{i(kr-\ell\frac{\pi}{2})} e^{2i\delta_\ell}|\eta_\ell| - e^{-i(kr-\ell\frac{\pi}{2})}\right) \ . \tag{12.127}$$

Aplicando (12.54), obtenemos el desarrollo de la amplitud de colisión para el canal elástico en ondas parciales,

$$f_{el}(k,\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2\ell+1)}(|\eta_\ell|e^{2i\delta_\ell} - 1)Y_\ell^0(\theta) \ . \tag{12.128}$$

Por lo tanto, la sección eficaz elástica es,

$$\sigma_{el}(k) = \frac{\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)||\eta_\ell|e^{2i\delta_\ell} - 1|^2. \tag{12.129}$$

#3El vacío real es de hecho en muchos aspecto similar a un blanco muy complicado.

La sección eficaz total tendrá dos contribuciones, la sección eficaz elástica y la sección eficaz inelástica (la que corresponde a la producción de canales inelásticos),

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{inel} \ . \tag{12.130}$$

El cálculo de σ_{tot} se puede realizar mediante la aplicación del teorema óptico. En (10.77) y fórmulas posteriores, se estableció que,

$$\int d^3r' \, \vec{\nabla}\vec{j}(\vec{r},t) = r^2 \int d\Omega j_r = -(2\pi)^{-3} v_k \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im} f_{el}(\theta=0) + (2\pi)^{-3} v_k \sigma_{el} \ . \tag{12.131}$$

En el caso en que sólo se tenga abierto el canal elástico, para energías suficientemente bajas, la probabilidad se conserva y la integral primera se anula. En el caso más general que estamos considerando ahora, la integral no se anula en general, y es igual al número de partículas perdidas respecto al canal elástico por unidad de tiempo. Menos este número, dividido por el flujo inicial, nos da la sección eficaz inelástica. Dicho flujo es $(2\pi)^{-3} v_k$ con lo que de (12.131) se obtiene:

$$\begin{aligned} \sigma_{inel} &= -\sigma_{el} + \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im} f_{el}(\theta=0) \rightarrow \\ \sigma_{tot} &= \sigma_{el} + \sigma_{inel} = \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im} f_{el}(\theta=0) \ . \end{aligned} \tag{12.132}$$

De (12.132) y (12.128) es directo obtener,

$$\begin{aligned} \sigma_{tot} &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(1 - |\eta_\ell| \cos 2\delta_\ell) \ , \\ \sigma_{inel} &= \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)(1 - |\eta_\ell|^2) \ . \end{aligned} \tag{12.133}$$

De (12.129) σ_{el} está siempre presente excepto cuando $\eta_\ell = 1$, en cuyo caso, σ_{inel} y σ_{tot} también se anulan. Es interesante recalcar que $\sigma_{inel} = 0$ siempre que $|\eta_\ell| = 1$ y, por tanto, consistentemente para energía inferiores a la apertura de los canales inelásticos $\sigma_{inel} = 0$.

En esta sección hemos obtenido tan sólo una parametrización de la amplitud de colisión elástica (12.128), válida en presencia de otros canales, además del importante resultado de extender el teorema óptico para sistemas complejos. Sin embargo, para el caso puramente elástico, analizado en detalle en (12.2), también hemos desarrollado una teoría dinámica que nos permite obtener las amplitudes de colisión para cualquier potencial central. Para el caso de sistemas complejos habría que disponer de una teoría dinámica que incluyese el blanco y sus interacciones propias que caracterizan su estructura interna, así como las de éste con el proyectil. De este modo, se podría calcular las amplitudes de colisión. Por ejemplo, si pensamos en las colisiones de un átomo con un electrón, cuando éste fuese suficientemente energético y se excitase el átomo, el estudio de estos procesos requiere dejar de considerar al átomo como elemental y, por contra, hay que tomar el núcleo y los electrones que forman el átomo como grados de libertad y hacer el estudio completo con el electrón incidente. Si la energía del electrón incidente continua aumentando, cuando ésta fuese suficientemente alta, haría necesario considerar los constituyentes elementales del núcleo, protones y neutrones, y así sucesivamente se van explorando distancias menores. Nótese que la longitud de de Broglie del electrón para ser sensible a la estructura interna del núcleo debe ser del orden del $fm = 10^5$ Amstrong.

12.7. ⋆Relación con la aproximación eikonal

En el método de ondas parciales, se descompone el proceso en varios subprocesos con ℓ bien definido y se suma sobre todos ellos para obtener la amplitud de colisión (12.56). Por otro lado, en la aproximación eikonal los procesos de colisión se distinguen según el parámetro de impacto y se integran sobre todos ellos (11.59).

La aproximación eikonal es válida si $1/k \ll a$. En este límite, puesto que $ak \simeq \ell_{max} \gg 1$ se sigue que en el límite de validez de la aproximación eikonal se debe sumar sobre muchas ondas parciales. De (12.56) tenemos:

$$f_{el} = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2\ell+1)}(\eta_\ell - 1)Y_\ell^0(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)(\eta_\ell-1)P_\ell(\cos\theta) \ . \tag{12.134}$$

Apliquemos esta serie al límite de validez de la aproximación eikonal. Dado que $\ell_{max} \to \infty$ sustituimos la suma sobre ℓ en (12.134) por una integral. Además hacemos uso de la igualdad

$$P_\ell(\cos\theta) \simeq J_0(2\ell \text{sen}\frac{\theta}{2}) \ , \tag{12.135}$$

que es válida para $\text{sen}^2\theta/2 \ll 1$ con $\ell \gg 1$. Estas dos aproximaciones se espera que sean buenas en el límite de aplicabilidad de la aproximación eikonal puesto que (i) hay que sumar sobre infinitas ondas parciales, (ii) las ondas parciales con ℓ grande están amplificadas por el factor $2\ell+1$ y (iii) no se espera ninguna razón dinámica por la que en el límite de proyectiles energéticos el factor $\eta_\ell - 1$ tenga que estar suprimido para $\ell \gg 1$. Introduciendo estas aproximaciones en (12.134) tenemos:

$$f_{el} \simeq \frac{1}{ik}\int_0^\infty d\ell\,\ell(\eta_\ell - 1)J_0(2\ell\text{sen}\frac{\theta}{2}) \ , \tag{12.136}$$

donde adicionalmente hemos despreciado el término 1 frente a 2ℓ, puesto que estamos considerando dominante el comportamiento para ℓ grandes. Si en la integral anterior hacemos además el cambio de variable $kb = \ell$, llegamos a la siguiente expresión para $f_{el}(k,\theta)$,

$$f_{el}(k,\theta) \simeq -ik\int_0^\infty db\, bJ_0(qb)(e^{2i\delta(b)} - 1) \ , \ \ q = 2k\text{sen}\frac{\theta}{2} \ . \tag{12.137}$$

Esta relación se convierte en el resultado para la aproximación eikonal (11.59) realizando la identificación,

$$\delta_\ell(b) = \Delta(b) \ . \tag{12.138}$$

Como $kb = \ell$, se sigue por tanto,

$$\delta_\ell(k) = \Delta(\ell/k) \ , \tag{12.139}$$

que, teniendo en cuenta (11.60), nos proporciona el método eikonal para calcular los desfasajes. Fijémonos que para obtener $\delta_\ell(k)$ compleja, como se requiere para sistemas complejos, el potencial V en (11.60) debe ser complejo. Éste es un método efectivo mediante el cual el Hamiltoniano deja de ser autoadjunto y permite así que haya pérdida de probabilidad correspondiente a otros canales abiertos. A los potenciales complejos se les suele denominar potenciales ópticos.

Ejemplo: La esfera opaca.
Consideremos la colisión de un sistema con un potencial tipo esfera opaca de radio R tal que:

$$\begin{aligned} \eta(b) &= 0 \; , \; b < R \; , \\ &= 1 \; , \; b > R \; , \end{aligned} \tag{12.140}$$

con b el parámetro de impacto. Al ser $\eta(b) = 0$ para $r < R$ es por lo que a la esfera se le denomina opaca, dado que de (12.127) la onda resultante del blanco sólo consta de ondas que asintóticamente para $r \to \infty$ se comportan como ondas esféricas entrantes. Por tanto, también se podría calificar este potencial como sumidero de radio R.

Haciendo uso de (12.137) tenemos para este caso:

$$f_{el} = ik \int_0^R db\, b J_0(qb) = ik \frac{R}{q} J_1(qR) = iR^2 k \frac{J_1(2kR\text{sen}\frac{\theta}{2})}{2kR\text{sen}\frac{\theta}{2}} \; . \tag{12.141}$$

Aplicando el teorema óptico (12.132),

$$\begin{aligned} \sigma_{tot} &= \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(k, \theta = 0) = 4\pi R^2 \lim_{\theta \to 0} \frac{J_1(2kR\text{sen}\frac{\theta}{2})}{2kR\text{sen}\frac{\theta}{2}} \\ &= 2\pi R^2 \; , \end{aligned} \tag{12.142}$$

teniendo en cuenta que

$$J_1(x) \to \frac{1}{2} x \; , \;\; x \to 0 \; . \tag{12.143}$$

Es remarcable destacar que σ_{tot} calculada en (12.142) es dos veces el área geométrica de la esfera opaca. De (12.129) calculamos la sección eficaz elástica sin más que pasar de serie a integral en ℓ, despreciar el $+1$ frente a 2ℓ y hacer el cambio de variable $kb = \ell$, tal y como hemos hecho antes para obtener f_{ell}, más rápido que calcular $\int d\Omega |f_{el}|^2$ con f_{el} dada por (12.137). Tenemos:

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \int_0^\infty db\,' 2k^2 b |\eta(b) - 1|^2 = \frac{\pi}{k^2} \int_0^R db\, 2k^2 b = \pi R^2 \; , \tag{12.144}$$

que es igual al área de la sección geométrica. La sección eficaz $\sigma_{el} \neq 0$, puesto que el flujo final de partículas hacia fuera es nulo y eso es distinto con respecto a la situación inicial. Así, se cuentan partículas para $r \to \infty$ procedentes del flujo inicial que pasan el blanco sin interaccionar. Finalmente la sección eficaz inelástica,

$$\sigma_{inel} = \sigma_{tot} - \sigma_{el} = \pi R^2 \; . \tag{12.145}$$

También es igual a la sección transversal. Queda claro que el efecto sorprendente de que σ_{tot} sea dos veces el área geométrica de la sección transversal de la esfera es porque la sección eficaz elástica no se anula debido a la contribución de partículas no dispersadas que se alejan del blanco. Nuestra intuición sí que se aplica a la sección eficaz inelástica.

Parte IV

Simetrías de las amplitudes de colisión

Capítulo 13

Ecuación de Lippmann-Schwinger

Con este capítulo se inicia la cuarta y última parte del curso donde exploramos las restricciones y consecuencias que sobre las amplitudes de colisión supone la imposición de las simetrías espacio-temporales y de intercambio de partículas idénticas, discutidas en los capítulos 3–9. Para ello, redescribiremos el proceso de colisión en el presente capítulo según el formalismo abstracto, sin restringirnos a la mecánica ondulatoria. Este formalismo, más general al tratar directamente con operadores, es más adecuado para estudiar la colisión con sistemas de muchos cuerpos (factores de forma) y proceder a estudiar a continuación las restricciones que sobre las amplitudes de colisión imponen invarianza bajo rotaciones, paridad e inversión temporal, tanto para partículas sin espín, en el capítulo 15, como para partículas con espín, en el capítulo 16. Para ello, se habrá generalizado el proceso de colisión discutido en los capítulos anteriores a la presencia de espín. Concluiremos el capítulo 16 con la colisión de partículas idénticas, tanto fermiones como bosones.

13.1. Matriz T de colisiones

Al igual que en la sección 10.2, buscamos soluciones estacionarias que cumplan las condiciones de contorno adecuadas para el proceso de colisión, esto es, que consten de una plana incidente más ondas esféricas salientes. Sea H el Hamiltoniano del sistema. En lo que sigue, designaremos por $H_0 = p^2/2\mu$ al Hamiltoniano libre. Designemos por $|\vec{k}+\rangle$ una de dichas soluciones que debe satisfacer,

$$H|\vec{k}+\rangle = E_k|\vec{k}+\rangle \ , \tag{13.1}$$

con energía $E_k = \hbar^2 k^2/2\mu$. Descomponiendo $H = H_0 + V$, podemos escribir

$$\begin{aligned}(H_0 - E_k)|\vec{k}+\rangle &= -V|\vec{k}+\rangle \ , \\ |\vec{k}+\rangle &= (E_k - H_0)^{-1}V|\vec{k}+\rangle \ . \end{aligned} \tag{13.2}$$

La inversa del operador $(H_0 - E_k)^{-1}$ para $E > 0$ es singular puesto que los autovalores de H_0 constituyen un continuo de 0 a ∞. No obstante, extendiendo E_k al plano complejo, $E_k \equiv z$, con $\mathrm{Im}z \neq 0$, entonces sí que se puede proceder con la inversa del operador $H_0 - E_k$. Este mismo problema ya fue considerado en la sección 10.2 para dar sentido a (10.34) y la solución fue tomar $\mathrm{Im}z > 0$ y después pasar al límite $\mathrm{Im}z \to 0$, cumpliéndose entonces las correctas condiciones de contorno. Al igual que en dicha sección notemos, además, que si $|\vec{k}\rangle$ es una onda plana solución de

$$(H_0 - E_k)|\vec{k}\rangle = 0 \; , \tag{13.3}$$

entonces de la solución $|\vec{k}+\rangle$ de (13.2) podemos formar una nueva solución, $|\vec{k}+\rangle + |\vec{k}\rangle$. De este modo, la solución buscada es,

$$|\vec{k}+\rangle = |\vec{k}\rangle + (z - H_0 + i0^+)^{-1} V |\vec{k}+\rangle \; , \tag{13.4}$$

tomando el límite Im$z \to 0^+$ al resolver esta ecuación, que se especifica explícitamente en la expresión anterior con 0^+. Esta es la conocida como ecuación de Lippmann-Schwinger. Estos resultados ya deben sernos familiares por su similitud con aquellos discutidos y presentados en la sección 10.2, ahora estamos considerando vectores y operadores dentro del espacio de Hilbert sin establecer las ecuaciones anteriores en la base particular de posiciones. Por completitud en la exposición, veamos que en efecto en la base de posiciones (13.4) se reduce a (10.43),

$$\langle \vec{r}|\vec{k}+\rangle = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \int d^3r'\, d^3r''\, \langle \vec{r}|(z - H_0 + i0^+)^{-1}|\vec{r}\,'\rangle\langle \vec{r}\,'|V|\vec{r}\,''\rangle \psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,'') \; . \tag{13.5}$$

Evaluemos,

$$\langle \vec{r}|(z - H_0 + i0^+)^{-1}|\vec{r}\,'\rangle = \int d^3q \frac{\langle \vec{r}|\vec{q}\rangle\langle \vec{q}|\vec{r}\,'\rangle}{z - \hbar^2 q^2/2\mu + i0^+} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q \frac{e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{z - \hbar^2 q^2/2\mu + i0^+} \; . \tag{13.6}$$

La integral anterior es muy similar a (10.32), basta sacar factor común $2\mu/\hbar^2$ en (13.6) y entonces ambas coinciden salvo un factor constante de proporcionalidad. Con ello aparece $2\mu z/\hbar^2$ que es igual a k^2 y, por lo tanto, de (10.42) obtenemos,

$$\langle \vec{r}|(z - H_0 + i0^+)^{-1}|\vec{r}\,'\rangle = -\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \; . \tag{13.7}$$

Que da lugar a la función de Green con el comportamiento asintótico adecuado según se vio en la sección 10.2. Es más, si como en esa sección suponemos que V es un potencial local, de modo que,

$$\langle \vec{r}\,''|V|\vec{r}\,'\rangle = V(\vec{r}\,')\delta(\vec{r}\,' - \vec{r}\,'') \; , \tag{13.8}$$

entonces sustituyendo la función de Green (13.7) y (13.8) en (13.5) obtenemos de hecho (10.43),

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi}\int d^3r' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} U(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k}}(\vec{r}\,') \; . \tag{13.9}$$

La ventaja de la ecuación (13.4) reside en el empleo de un lenguaje abstracto que no requiere de ninguna base en especial. De hecho, también permite generalizar de forma directa el proceso de colisión para sistemas con espín, puesto que entonces V es un operador potencial con dependencia en el espín de las partículas involucradas, pero la ecuación (13.4) no cambia, sólo que los estados $|\vec{k}+\rangle$ y $|\vec{k}\rangle$ pasarán a tener nuevos números cuánticos λ_1, λ_2, referentes a las proyecciones de los espines,

$$|\vec{k}+\rangle \; , |\vec{k}\rangle \to |\vec{k},\lambda_1,\lambda_2+\rangle \; , |\vec{k},\lambda_1,\lambda_2\rangle \; , \tag{13.10}$$

respectivamente. Como ejemplo de lo dicho, expresemos (13.4) en la base de momento lineal bien definido. En lugar de impulso seguiremos hablando de número de onda, ello simplemente implica eliminar el factor $\hbar^{-3/2}$ en las funciones de onda de los estados con momento lineal definido en (4.44), como de hecho, ya hicimos al introducir $\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ en (10.43), dada la relación $\delta(\vec{p}-\vec{p}\,')=\delta(\vec{k}-\vec{k}\,')\hbar^3$. La función de onda en el espacio de momentos la designamos por $\Phi_{\vec{k}}(k\,')=\langle\vec{k}\,'|\vec{k}+\rangle$, y así tenemos:

$$\begin{aligned}\Phi_{\vec{k}}(\vec{k}\,') &= \delta(\vec{k}\,'-\vec{k})+\frac{1}{E-\hbar^2k'^{\,2}/2\mu+i0^+}\langle k\,'|V|\vec{k}+\rangle \\ &= \delta(\vec{k}\,'-\vec{k})+\frac{1}{E-\hbar^2k'^{\,2}/2\mu+i0^+}\int d^3k''\,\langle\vec{k}\,'|V|\vec{k}\,''\rangle\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}\,'')\ . \end{aligned} \tag{13.11}$$

Definimos a continuación el operador de transición T tal que,

$$V|\vec{k}+\rangle = T|\vec{k}\rangle\ . \tag{13.12}$$

Para ver que esta definición no es vacía, es obvio que en el límite de potencial débil, en el sentido discutido en la serie de Born, sección 11.1, podemos hacer $|\vec{k}+\rangle\simeq|\vec{k}\rangle$ y, por tanto, para este caso $T\simeq V$.

Multipliquemos (13.4) por la izquierda por V y apliquemos la definición (13.12), llegamos a,

$$V|\vec{k}+\rangle = T|\vec{k}\rangle = V|\vec{k}\rangle + V\frac{1}{E-H_0+i0^+}T|\vec{k}\rangle\ , \tag{13.13}$$

que como es válida para todo $|\vec{k}\rangle$ se convierte en una ecuación operacional para T,

$$T=V+V\frac{1}{E-H_0+i0^+}T\ , \tag{13.14}$$

también conocida como ecuación de Lippmann-Schwinger. En las dos últimas relaciones hemos empleado la notación habitual de expresar $(E-H_0+i0^+)^{-1}\equiv 1/(E-H_0+i0^+)$.

De nuevo si el potencial V se puede considerar pequeño en el sentido discutido en la sección 11.1, la ecuación (13.14) se puede resolver iterativamente,

$$T=V+V\frac{1}{E-H_0+i0^+}V+V\frac{1}{E-H_0+i0^+}V\frac{1}{E-H_0+i0^+}V+\mathcal{O}(\lambda^4)\ , \tag{13.15}$$

siendo λ un parámetro pequeño adimensional que caracteriza a V. Por ejemplo, para el potencial de Coulomb éste es la constante α de estructura fina, $\alpha=e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$, y para el potencial de Yukawa (11.4), es $\lambda=2\mu V_0/\hbar^2\alpha^2$, como vimos en la sección 11.1.1. Al calcular los elementos de matriz de T entre estados de partícula libre, la serie (13.15) es entonces la misma que la serie de Born (11.19), salvo el factor global constante $-4\pi^2\mu/\hbar^2$ con que habría que multiplicar (13.15) para que fuesen idénticas. De este modo resulta la importante relación,

$$\langle\vec{k}\,'|T|\vec{k}\rangle = -\frac{\hbar^2}{4\pi^2\mu}f(\vec{k}\,',\vec{k})\ . \tag{13.16}$$

13.2. Matriz S de colisiones

Consideremos de nuevo la ecuación (13.4) y según la definición del operador de transición T (13.12), tenemos:

$$
\begin{aligned}
|\vec{k}+\rangle &= \left(1+\frac{1}{E_k - H_0 + i0^+}T\right)|\vec{k}\rangle \\
&\equiv S|\vec{k}\rangle \; .
\end{aligned} \tag{13.17}
$$

El operador S es un operador unitario.

$$
\langle \vec{k}\,' + |\vec{k}+\rangle = \delta(\vec{k}\,' - \vec{k}) = \langle \vec{k}\,'|S^\dagger S|\vec{k}\rangle \; , \tag{13.18}
$$

por tanto,

$$
S^\dagger S = S S^\dagger = 1 \; . \tag{13.19}
$$

El operador S transforma los estados base $\{|\vec{k}\rangle\}$ al conjunto de vectores $\{S|\vec{k}\rangle\}$, que es una nueva base del espacio de Hilbert $\mathcal{H}$. En efecto,

$$
\begin{aligned}
|\phi\rangle &= \int d^3k |\vec{k}\rangle\langle\vec{k}|\phi\rangle = \int d^3k\, S^\dagger |\vec{k}+\rangle\langle\vec{k}+|S|\phi\rangle \; , \\
S|\phi\rangle &= \int d^3k |\vec{k}+\rangle\langle\vec{k}+|S|\phi\rangle \; .
\end{aligned} \tag{13.20}
$$

La relación de S y T dada en (13.17) se puede simplificar muy notablemente. Debido a la presencia del operador singular $(E_k - H_0 + i0^+)^{-1}$ y dado que la matriz de colisión T sólo conecta a estados con la misma energía se tiene, por tanto, el resultado divergente $\langle\vec{k}\,'|S-1|\vec{k}\rangle \to 1/i0^+$ para (13.17). Para solventar este problema calculemos los elementos de matriz de (13.17) entre dos trenes de ondas en energía,

$$
\begin{aligned}
|\psi_{\hat{k}_1}\rangle &= \int_0^\infty k_1^2 dk_1\, \chi_1(k_1)|\vec{k}_1\rangle \; , \\
|\psi_{\hat{k}_2}\rangle &= \int_0^\infty k_2^2 dk_2\, \chi_2(k_2)|\vec{k}_2\rangle \; ,
\end{aligned} \tag{13.21}
$$

con $\chi_i(k)$ funciones centradas alrededor de $k_i > 0$ y que consideraremos arbitrariamente picadas en torno a dicho valor. Al final del cálculo tomaremos el límite

$$
\chi_i(k) \to \frac{1}{k_i^2}\delta(k-k_i) \; . \tag{13.22}
$$

El elemento de matriz viene dado por la integral,

$$
\langle\psi_{\hat{k}_2}|S-1|\psi_{\hat{k}_1}\rangle = \int_0^\infty k_2^2 dk_2 \chi_2^*(k_2) \int_0^\infty k_1^2 dk_1 \chi_1(k_1) \frac{1}{\frac{\hbar^2 k_1^2}{2\mu} - \frac{\hbar^2 k_2^2}{2\mu} + i0^+} \langle\vec{k}_2|T|\vec{k}_1\rangle \; . \tag{13.23}
$$

El dominio de integración, tanto en k_1 como en k_2, se puede extender de $-\infty$ a $+\infty$ puesto que las funciones $\chi_i(k_i)$ están centradas alrededor de $k_i > 0$, tal que para $k_i < 0$ son nulas. Procedamos primero a realizar la integración de k_2. Debido a la singularidad en $1/(E_{k_1} - H_0)$, tomaremos $\text{Im}k_1 > 0$, tal y como se ha discutido en esta sección y en la sección 10.2. Por otra parte, dado que $\chi_2(k_2)$ está picada alrededor de k_2, podemos pensar en realizar la integral anterior empleando el teorema de Cauchy con un circuito cerrado por un semicírculo en el infinito, similar a los circuitos mostrados en la figura 10.2. El contorno de integración lo cerramos por arriba puesto que, como hemos visto en la sección (12.4), la amplitud de colisión $f(k,\theta)$ tiene un corte para $k > 0$ y los valores físicos se obtienen de hacer el límite $\text{Im}k \to 0^+$. De este modo, el polo $k_2 = k_1$ es el que da contribución (recordemos que $\text{Im}k_1 > 0$) al aplicar el teorema de los residuos. Notemos que la contribución del semicírculo en el infinito es nula puesto que $\chi_2(k_2)$ se anula para valores suficientemente alejados de k_2. Por lo tanto (13.23) resulta,

$$\langle\psi_{\hat{k}_2}|S-1|\psi_{\hat{k}_1}\rangle = -i\frac{2\mu\pi}{\hbar^2}\int_0^\infty k_1^2 dk_1 \chi_1(k_1) k_1 \chi_2^*(k_1)\langle k_1\hat{k}_2|T|\vec{k}_1\rangle \; . \tag{13.24}$$

En la expresión anterior ya hemos tomado también el límite de k_1 real y hemos representado por $\hat{k}_2 k_1$ el vector en la dirección de $\vec{k}_2$ pero con módulo k_1. Tomando el límite (13.22) en (13.24), tenemos entonces los elementos de matriz de S entre estados $|\vec{k}_1\rangle$ y $|\vec{k}_2\rangle$,

$$\langle\vec{k}_2|S-1|\vec{k}_1\rangle = -i\frac{2\mu\pi k_1}{\hbar^2}\frac{\delta(k_1-k_2)}{k_1^2}\langle\vec{k}_2|T|\vec{k}_1\rangle \; , \tag{13.25}$$

donde $\delta(k_1 - k_2)$ asegura la conservación de energía.

13.2.1. Unitariedad

En la sección 12.2.3 obtuvimos la relación de unitariedad (12.67) mediante el empleo del desarrollo en ondas parciales que es válido para potenciales centrales. En esta sección vamos a profundizar en la demostración de (12.67), de modo que obtendremos que es una consecuencia del carácter unitario de S y, de ahí, que se hable de unitariedad en referencia a (12.67).

Dado que $SS^\dagger = 1$ y, teniendo en cuenta los elementos de matriz de S dados en (13.25), tenemos,

$$\begin{aligned}
\langle\vec{k}\,'|SS^\dagger|\vec{k}\rangle &= \delta(\vec{k}-\vec{k}\,') \\
&= \delta(\vec{k}-\vec{k}\,') - i\frac{2\mu\pi k}{\hbar^2}\frac{\delta(k-k')}{k^2}\langle\vec{k}|T|\vec{k}\,'\rangle + i\frac{2\mu\pi k}{\hbar^2}\frac{\delta(k-k')}{k^2}\langle\vec{k}'|T|\vec{k}\rangle^* \\
&+ \frac{4\mu^2\pi^2}{\hbar^4}\delta(k'-k)\int d\hat{k}''\,\langle\vec{k}\,'|T|\hat{k}''k\rangle\langle\vec{k}|T|\hat{k}''k\rangle^* \; .
\end{aligned} \tag{13.26}$$

Introduciendo este resultado en (13.26) y simplificando, tenemos la relación, válida para $k' = k$,

$$\langle\vec{k}\,'|T|\vec{k}\rangle - \langle\vec{k}|T|\vec{k}\,'\rangle^* = -i\frac{2\pi\mu k}{\hbar^2}\int d\hat{k}''\,\langle\vec{k}\,'|T|\vec{k}\,''\rangle\langle\vec{k}|T|\vec{k}\,''\rangle^* \; . \tag{13.27}$$

La relación anterior es equivalente a,

$$\langle\vec{k}\,'|T|\vec{k}\rangle - \langle\vec{k}\,'|T^\dagger|\vec{k}\rangle = -i\frac{2\pi\mu k}{\hbar^2}\int d\hat{k}''\,\langle\vec{k}\,'|T|\vec{k}\,''\rangle\langle\vec{k}\,''|T^\dagger|\vec{k}\rangle \; , \tag{13.28}$$

dado que $\langle\vec{k}|T|\vec{k}\,'\rangle^* = \langle\vec{k}\,'|T^\dagger|\vec{k}\rangle$. Teniendo en cuenta (13.16), la ecuación (13.27) en términos de f implica,

$$f(\vec{k},\vec{k}\,') - f(\vec{k}\,',\vec{k})^* = i\frac{k}{2\pi}\int d\hat{k}'' f(\vec{k}\,',\vec{k}\,'')f^*(\vec{k},\vec{k}\,'') \tag{13.29}$$

Si suponemos invarianza bajo rotaciones, como hicimos para obtener (12.67), dado que $f(\vec{k},\vec{k}\,') \equiv f(k,\cos\theta)$, se sigue que $f(\vec{k}\,',\vec{k}) = f(\vec{k},\vec{k}')$ y, por lo tanto, $f(\vec{k},\vec{k}\,') - f(\vec{k}\,',\vec{k})^* = 2i\mathrm{Im}f(k,\theta)$. Así, (13.29) se puede reescribir como,

$$\mathrm{Im}f(k,\theta) = \frac{k}{4\pi}\int d\hat{k}|f(k,\theta)|^2 \ , \tag{13.30}$$

y recuperamos (12.67).[#1]

[#1]De hecho no es necesario suponer invarianza bajo rotaciones para obtener el mismo resultado anterior, ya que, combinando invarianza bajo paridad (15.8) e inversión temporal (15.5), también obtenemos que $f(\vec{k}\,',\vec{k}) = f(\vec{k},\vec{k}\,')$, con lo que obtenemos de nuevo (13.30).

Capítulo 14

Factores de forma

Supongamos que una partícula interactúa con un objeto compuesto y su longitud de onda de de Broglie es lo suficientemente pequeña para ser sensible a la estructura interna de dicho objeto. Por ejemplo, un electrón interactuando con un conjunto de N electrones experimenta un potencial total del tipo,

$$V(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} V(\vec{r} - \vec{r}_i) \ , \tag{14.1}$$

siendo $\vec{r}_i$ la posición del i-ésimo electrón (partícula) en la nube electrónica (sistema). Para el caso de la colisión de Coulomb, $V(|\vec{r} - \vec{r}_i|) = -e^2/4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_i|$.

Consideremos la transición en el proyectil $|\vec{k}\rangle \to |\vec{k}\,'\rangle$, y en el blanco $|n\rangle \to |n'\rangle$. Entonces, a primer orden en la serie de Born,

$$\begin{aligned}
f_{n',n}(\vec{k}\,', \vec{k}) &= -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}\langle\vec{k}\,'n'|\sum_{i=1}^{N} e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\vec{r}_i}|\vec{k}n\rangle = \frac{-4\pi^2\mu}{\hbar^2}\sum_{i=1}^{N}\int d^3r'\prod_{s=1}^{N} d^3r_s\,(2\pi)^{-3}e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\vec{r}\,'} \\
&\times \ \psi^*_{n'}(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N)V(\vec{r}\,'-\vec{r}_i)\psi_n(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N) \\
&= \frac{-4\pi^2\mu}{\hbar^2}\int\prod_{s=1}^{N} d^3r_s\psi^*_{n'}(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N)\psi_n(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N)\int d^3r'(2\pi)^{-3}\sum_{i=1}^{N} e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')(\vec{r}\,'-\vec{r}_i)} \\
&\times \ e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\vec{r}_i}V(\vec{r}-\vec{r}_i) \\
&= \left[\int\prod_{s=1}^{N} d^3r_s\psi^*_{n'}(\vec{r}_1,..,\vec{r}_N)\psi_n(\vec{r}_1,...,\vec{r}_N)\sum_{i=1}^{N} e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\vec{r}_i}\right] \\
&\times \ \frac{-4\pi^2\mu}{\hbar^2}\int d^3r'\frac{e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\vec{r}\,'}}{(2\pi)^3}V(\vec{r}\,') \ .
\end{aligned} \tag{14.2}$$

Notemos que el factor de la última línea no es más que la amplitud de Born (10.48) para un cuerpo mientras que el término entre corchetes es el elemento de transición

$$N\,F(\vec{q}) = \langle n'|\sum_{i=1}^{N} e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\vec{r}_i}|n\rangle \ , \tag{14.3}$$

y $F(\vec{q})$ se conoce como factor de forma de la transición $|n\rangle \to |n'\rangle$ y $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}\,'$. La función $F(\vec{q})$ tiene un significado muy claro si pensamos en que $\psi_n = \psi_{n'}$ y viene dada por el producto de funciones de onda de un solo cuerpo, $\psi_n = \prod \psi(\vec{r}_i)$, puesto que entonces es simplemente,

$$F(\vec{q}) = \frac{1}{N}\langle n'|\sum_{i=1}^{N} e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\vec{r}_i}|n\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\int d^3r_i e^{i(\vec{k}-\vec{k}\,')\vec{r}_i}\rho_i(\vec{r}_i) \;, \tag{14.4}$$

y es el promedio de las transformadas de Fourier de las densidades monoparticulares. Si $\vec{q} = 0$ entonces se tiene que $F(0) = 1$ y por eso es por lo que se incluye el factor de normalización N en (14.3). Siguiendo para el caso de transición elástica para el sistema compuesto, $|n\rangle \to |n\rangle$, es muy interesante el desarrollo para bajas energías puesto que nos proporciona información directa sobre el tamaño del sistema. De (14.3) y haciendo un desarrollo en potencias de $\vec{q}$ en la exponencial tenemos,

$$\begin{aligned} &\langle n|\sum_{i=1}^{N} 1 + \sum_{i=1}^{N} i\vec{q}\vec{r}_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j,k=1}^{3} q_j q_k r_{i,j} r_{i,k} + \mathcal{O}(q^3a^3)|n\rangle \\ =\;& N - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j,k=1}^{3} q_j q_k \langle n|r_{i,j} r_{i,k}|n\rangle + \mathcal{O}(q^3a^3) \;, \end{aligned} \tag{14.5}$$

donde a es el tamaño típico del sistema compuesto. Hemos supuesto que $\langle n|r_i|n\rangle = 0$ admitiendo, por ejemplo, que el estado $|n\rangle$ es invariante bajo paridad o que tenga momento angular total bien definido y por inversión temporal, tal y como vimos en la sección 8.4, el valor medio anterior se anula. Además por invarianza bajo rotaciones se sigue que,

$$\langle n|r_{i,j} r_{i,k}|n\rangle = \delta_{jk}\frac{1}{3}\langle n|r_i^2|n\rangle \;, \tag{14.6}$$

puesto que el tensor identidad es el único que podemos formar si el estado $|n\rangle$ es esféricamente simétrico, como necesariamente ocurre para sistemas no polarizados que también es muy habitual. De hecho para sistemas esféricamente simétricos el factor de forma sólo puede depender del módulo de $\vec{q}$. Pensemos por ejemplo en los estados fundamentales del átomo de Hidrógeno o de un potencial esférico. Introduciendo (14.6) en (14.5) tenemos,

$$F(q) = 1 - \frac{1}{6}q^2\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle n|r_i^2|n\rangle\right) + \mathcal{O}(q^3a^3) \;. \tag{14.7}$$

El coeficiente $\sum_{i=1}^{N}\langle n|r_i^2|n\rangle/N$ corresponde al radio cuadrático medio del sistema y, así, se obtiene información sobre el tamaño del mismo a partir de la dependencia en energía del factor de forma.

También se puede tener en cuenta grados de libertad de espín a la hora de definir factores de forma, pero en este caso se habla de los factores de forma asociados con los distintos operadores que acompañan a las estructuras de espín permitidas en el Hamiltoniano, véase por ejemplo el Hamiltoniano (16.31).

Capítulo 15

Simetrías en las amplitudes de colisión. Partículas sin espín

Supongamos una transformación de simetría, que por el teorema de Wigner corresponde a un operador unitario U o antiunitario θ en el espacio de Hilbert. En el caso unitario, esta transformación constituye una simetría dinámica si,

$$\begin{aligned} UH_0U^\dagger &= H_0 \ , \\ UVU^\dagger &= V \ , \end{aligned}$$

y, por tanto, se cumple que $UHU^\dagger = H$. De (13.14) se deduce,

$$UTU^\dagger = T \ . \tag{15.1}$$

Por lo tanto, dados dos estados de partícula libre $|\vec{k}\rangle$ y $|\vec{k}\,'\rangle$, con

$$|\widetilde{\vec{k}}\rangle = U|\vec{k}\rangle \ , \ \ |\widetilde{\vec{k}}\,'\rangle = U|\vec{k}\,'\rangle \ , \tag{15.2}$$

entonces se deduce que las amplitudes de colisión permanecen invariantes bajo la transformación de simetría,

$$\langle\widetilde{\vec{k}}\,'|T|\widetilde{\vec{k}}\rangle = \langle\vec{k}\,'|U^\dagger TU|\vec{k}\rangle = \langle\vec{k}\,'|T|\vec{k}\rangle \ . \tag{15.3}$$

En estas circunstancias se habla de invarianza bajo dicha simetría o que dicha simetría se conserva.

Discutiremos a continuación en detalle invarianza bajo paridad, rotaciones e inversión temporal. Para un sistema cerrado, todas las interacciones fundamentales conocidas entre partículas (gravitación, electromagnetismo, interacciones fuertes e interacciones débiles) son invariantes bajo rotaciones. Sin embargo, las interacciones débiles violan maximalmente paridad y también inversión temporal, que sí son conservadas por el resto de interacciones fundamentales. Téngase en mente que cuando decimos que una simetría se conserva por una cierta interacción, esta afirmación tiene dos frentes. Por una parte, la teoría física que actualmente describe la interacción es invariante bajo dicha transformación. Pero por otra parte, está la verificación experimental de que, en efecto, dichas transformaciones son invariantes y en este último aspecto las afirmaciones no pueden ir más allá de la precisión de los experimentos llevados a cabo hasta la fecha.

- Para el caso de inversión temporal, como sabemos, el operador de la simetría es antiunitario. La inversión temporal es una buena simetría dinámica cuando el Hamiltoniano sea invariante bajo θ, $\theta H \theta^{-1} = H$. Como H_0 es trivialmente invariante resulta, por tanto, que se debe cumplir $\theta V \theta^{-1} = V$. Hagamos uso de la solución formal (13.15) para determinar $\theta T \theta^{-1}$,

$$\begin{aligned} \theta T \theta^{-1} &= \theta V \theta^{-1} + \theta V \theta^{-1} \theta \frac{1}{E - H_0 + i0^+} \theta^{-1} \theta V \theta^{-1} + ... \\ &= V + V \frac{1}{E - H_0 - i0^+} V + ... = T^\dagger \; . \end{aligned} \tag{15.4}$$

  Haciendo uso de este importante resultado se deduce,

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}\,' | T | \vec{k} \rangle &= \langle \widetilde{\vec{k}}\,' | \theta T | \vec{k} \rangle^* = \langle \widetilde{\vec{k}}\,' | T^\dagger | \widetilde{\vec{k}} \rangle = \langle \widetilde{\vec{k}} | T | \widetilde{\vec{k}}\,' \rangle \\ &= \langle -\vec{k} | T | -\vec{k}\,' \rangle \qquad (15.5) \\ f(\vec{k}, \vec{k}\,') &= f(-\vec{k}, -\vec{k}\,') \; , \qquad (15.6) \end{aligned}$$

  donde hemos hecho uso de (8.38) y, análogamente a (15.3), hemos empleado la notación $|\widetilde{\vec{k}}\rangle = \theta|\vec{k}\rangle$ y $|\widetilde{\vec{k}}\,'\rangle = \theta|\vec{k}\,'\rangle$.

- Invarianza bajo paridad:

$$\langle \vec{k}\,' | T | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k}\,' | P T P^{-1} | \vec{k} \rangle = \langle -\vec{k}\,' | T | -\vec{k} \rangle \; . \tag{15.7}$$

  Se sigue por tanto, como consecuencia de conservación de paridad, que,

$$f(\vec{k}\,', \vec{k}) = f(-\vec{k}\,', -\vec{k}) \; . \tag{15.8}$$

- Invarianza bajo rotaciones:

$$\langle \vec{k}\,' | T | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k}\,' | \mathcal{D}(R)^\dagger T \mathcal{D}(R) | \vec{k} \rangle = \langle R\vec{k}\,' | T | R\vec{k} \rangle \; , \tag{15.9}$$

  por lo tanto,

$$f(\vec{k}\,', \vec{k}) = f(R\vec{k}\,', R\vec{k}) \; , \tag{15.10}$$

  y la amplitud de colisión es un escalar. Como ya sabíamos, f sólo puede depender de k y del producto escalar $\vec{k}\vec{k}\,'$. Además, si tomamos como estado inicial para el proceso de colisión un estado con momento angular orbital bien definido $|E\ell m\rangle$, el que T sea invariante bajo rotaciones es una nueva forma de verificar que las ondas parciales no se mezclan.

Si combinamos invarianza bajo paridad e invarianza bajo inversión temporal, sin imponer invarianza bajo rotaciones, se llega a que:

$$f(\vec{k}\,', \vec{k}) \underset{P}{=} f(-\vec{k}\,', -\vec{k}) \underset{\theta}{=} f(\vec{k}, \vec{k}\,') \; , \tag{15.11}$$

con lo que,

$$f(\vec{k}\,',\vec{k}) = f(\vec{k},\vec{k}\,')\ . \tag{15.12}$$

Este resultado implica la importante conclusión de que, dada una interacción invariante bajo paridad e inversión temporal se tiene,

$$\frac{d\sigma(\vec{k}\to\vec{k}\,')}{d\Omega} = \frac{d\sigma(\vec{k}\,'\to\vec{k})}{d\Omega}\ , \tag{15.13}$$

para transiciones elásticas. Ésta es la fórmula de balance detallado que nos dice que la sección eficaz es independiente de cuál de los dos estados sea el inicial o el final, es simétrica bajo el intercambio de los mismos. Este resultado es muy intuitivo, dado que al actuar con paridad invertimos los momentos, de modo que si invertimos temporalmente obtenemos una distribución de momentos de acuerdo a un proceso de colisión con el estado final intercambiado por el inicial.

Capítulo 16

Simetrías en las amplitudes de colisión. Partículas con espín

16.1. Colisión de partículas con espín

Para fijar ideas consideremos primero que el haz incidente tiene espín 1/2. Al tener las partículas espín, el potencial V será un operador en el espacio de espín. Para $s = 1/2$ lo escribimos como,

$$V \equiv \begin{pmatrix} V_{++} & V_{+-} \\ V_{-+} & V_{--} \end{pmatrix} . \tag{16.1}$$

La ecuación de Schrödinger en este caso queda,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r},t) \\ \psi_-(\vec{r},t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{++} & V_{+-} \\ V_{-+} & -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r},t) \\ \psi_-(\vec{r},t) \end{pmatrix} . \tag{16.2}$$

Notemos que si los potenciales no diagonales son nulos, $V_{+-} = V_{-+} = 0$, entonces cada componente del espinor $(\psi_+ \ , \ \psi_-)^T$ evoluciona independientemente, puesto que tenemos entonces dos ecuaciones de Schrödinger desacopladas.

En general, para espinores de rango s, la solución de (10.43) es,

$$\psi_{\vec{k},\mu}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k},\mu}(\vec{r}\,') - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \sum_{\nu=-s}^{s} U_{\mu\nu}(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k},\nu}(\vec{r}\,')d^3r' \ , \tag{16.3}$$

que incorpora las correctas condiciones de contorno discutidas en la sección 10.2. De hecho, para $r \to \infty$ y considerando un potencial de corto alcance, tenemos,

$$\psi_{\vec{k},\mu}(\vec{r}) \sim \phi_{\vec{k},\mu} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \int e^{-i\vec{k}\,'\vec{r}\,'} \sum_{\nu=-s}^{s} U(\vec{r}\,')_{\mu\nu}\psi_{\vec{k}\nu}(\vec{r}\,')d^3r' \ . \tag{16.4}$$

La ecuación (16.3) para $s = 1/2$ es equivalente a la ecuación de Schrödinger (16.2).

Comparando (16.4) con (10.47), se deduce que la amplitud de colisión es,

$$f_{\nu\mu}(\vec{k}\,', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2}(\phi_{\vec{k}\,'}, V\psi_{\vec{k}}) \ , \tag{16.5}$$

donde los subíndices μ y ν en $f_{\mu\nu}(\vec{k}\,',\vec{k})$ se refieren a las componentes de espín del estado inicial y final respectivamente. Notemos que el producto escalar también tiene en cuenta los grados de libertad de espín,

$$(\phi_{\vec{k}\,'},V\psi_{\vec{k}}) \equiv \sum_{\alpha\beta}\int d^3r'\phi^*_{\vec{k}\,',\alpha}V_{\alpha\beta}(\vec{r}\,')\psi_{\vec{k},\beta}~. \tag{16.6}$$

Es importante destacar que la ecuación de Lippmann-Schwinger (13.14) es una relación operacional que involucra V y $1/(E-H_0+i0^+)$ y su estructura es independiente de la presencia del espín o no. Éste sólo implicará la existencia de índices matriciales discretos en V y T. Por supuesto, $E-H_0+i0^+$ es un operador diagonal en el espacio de espines.

Es conveniente introducir un operador de colisión $M(\vec{k}\,',\vec{k})$ en el espacio de espín, tal que,

$$M(\vec{k}\,',\vec{k})|\chi_n\rangle = \sum_{m=-s}^{s} f_{mn}(\vec{k}\,',\vec{k})|\chi_m\rangle~. \tag{16.7}$$

De este modo, la sección eficaz diferencial correspondiente al proceso de colisión de un estado inicial $|\vec{k},\chi_\mu\rangle$ a otro final $|\vec{k}\,',\chi_\nu\rangle$ es igual a:

$$|\langle\chi_\nu|M(\vec{k}\,',\vec{k})|\chi_\mu\rangle|^2 = \langle\chi_\nu|M|\chi_\mu\rangle\langle\chi_\mu|M^\dagger|\chi_\nu\rangle~. \tag{16.8}$$

Si en el estado inicial cada estado de tercera componente de espín $\hbar\mu$ tiene un peso w_μ y no se detecta el espín en el estado final, para calcular la sección eficaz diferencial hay que sumar sobre todos los espines finales y promediar sobre los iniciales, de acuerdo a su peso relativo w_μ, y así se obtiene,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{k}\to\vec{k}\,') = \sum_{\nu,\mu=-s}^{s}\langle\chi_\nu|M|\chi_\mu\rangle w_\mu\langle\chi_\mu|M^\dagger|\chi_\nu\rangle = tr(M\rho M^\dagger)~, \tag{16.9}$$

dado que la matriz densidad inicial es $\rho=\sum_\mu|\chi_\mu\rangle w_\mu\langle\chi_\mu|$.

Respondamos a continuación a la pregunta de ¿cuál es la matriz densidad resultante del haz dispersado en la dirección $\vec{k}\,'$?. Dado que la amplitud de transición del estado inicial $|\vec{k},\chi_\mu\rangle$ al estado $|\vec{k}\,',\chi_\nu\rangle$ es proporcional a $f_{\nu\mu}(\vec{k}\,',\vec{k})$, se sigue, por tanto, que la matriz densidad del haz dispersado en la dirección $\vec{k}\,'$ es,

$$\rho'_{\vec{k}\,'} = \frac{1}{N}\sum_{\mu=-s}^{s} M(\vec{k}\,',\vec{k})|\chi_\mu\rangle w_\mu\langle\chi_\mu|M^\dagger(\vec{k}\,',\vec{k})~, \tag{16.10}$$

con N un factor de normalización que se determina tal que $tr(\rho'_{\vec{k}\,'})=1$. De esta forma,

$$\rho'_{\vec{k}\,'} = M(\vec{k}\,',\vec{k})\rho M^\dagger(\vec{k}\,',\vec{k})/tr(M\rho M^\dagger)~. \tag{16.11}$$

Determinado $\rho'_{\vec{k}\,'}$, se dispone de toda la información posible sobre el haz dispersado en la dirección de $\vec{k}\,'$. Por ejemplo, la polarización después de la colisión según $\vec{k}\,'$ para un haz de espín 1/2 es,

$$\vec{P}'_{\vec{k}\,'} = tr(\vec{\sigma}\rho'_{\vec{k}\,'}) = \frac{tr(\vec{\sigma}M\rho M^\dagger)}{tr(M\rho M^\dagger)}~. \tag{16.12}$$

A lo largo de este punto y en el resto del capítulo seguiremos considerando que el espín del blanco es nulo. No obstante, todo lo que se diga en estas secciones se puede generalizar directamente a este otro caso más general sin más que trabajar en la base de espín total definido del sistema proyectil+blanco. Así, en lugar de hablar de estados de espín $|s\,\chi_\mu\rangle$, tendremos estados de espín total $|S\,\chi_\mu, s_1 s_2\rangle$.

16.2. Transformación de M bajo simetrías

En (13.16) establecimos la relación entre los elementos de matriz del operador de transición T y la amplitud de colisión $f(\vec{k}\,', \vec{k})$. Su generalización para incluir los grados de libertad de espín es directa,

$$f_{\mu\nu}(\vec{k}\,', \vec{k}) = \langle \vec{k}\,', \chi_\mu | \frac{-4\pi^2\mu}{\hbar^2} T | \vec{k}, \chi_\nu \rangle = \frac{-\hbar^2}{4\pi^2\mu} \langle \chi_\mu | M(\vec{k}\,', \vec{k}) | \chi_\nu \rangle \ . \tag{16.13}$$

Veamos una a una las restricciones que sobre M imponen las simetrías tratadas en la sección 15, pero ahora generalizadas al caso con espín.

- Paridad: $PTP^{-1} = PTP = T$,

$$-\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2} \langle \vec{k}\,', \chi_\mu | PTP | \vec{k}, \chi_\nu \rangle = -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2} \langle -\vec{k}\,', \chi_\mu | T | -\vec{k}, \chi_\nu \rangle = \langle \chi_\mu | M(-\vec{k}\,', -\vec{k}) | \chi_\nu \rangle \ . \tag{16.14}$$

  Por lo tanto,

$$\begin{aligned} f_{\mu\nu}(\vec{k}\,', \vec{k}) &= f_{\mu\nu}(-\vec{k}\,', -\vec{k}) \ , \\ M(\vec{k}\,', \vec{k}, \vec{s}) &= M(-\vec{k}\,', -\vec{k}, \vec{s}) \ , \end{aligned} \tag{16.15}$$

  donde se ha especificado explícitamente el operador de espín, $\vec{s}$, presente en M .

- Rotaciones:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}\,', \chi_\mu | T | \vec{k}, \chi_\nu \rangle &= \frac{-\hbar^2}{4\pi^2\mu} \langle \chi_\mu | M(\vec{k}\,', \vec{k}, \vec{s}) | \chi_\nu \rangle \\ &= \langle \vec{k}\,', \chi_\mu | \mathcal{D}(R)^\dagger T \mathcal{D}(R) | \vec{k}, \chi_\nu \rangle = \langle R\vec{k}\,', \chi_{R\hat{z},\mu} | T | R\vec{k}, \chi_{R\hat{z},\nu} \langle \\ &= \frac{-\hbar^2}{4\pi^2\mu} \langle \chi_\mu | M(R\vec{k}\,', R\vec{k}, R\vec{s}) | \chi_\nu \rangle \ . \end{aligned} \tag{16.16}$$

  Por lo tanto, $M(\vec{k}\,', \vec{k}, \vec{s})$ es un operador escalar construido a partir de los vectores $\vec{k}\,'$, $\vec{k}$ (son autovalores) y del operador vectorial de espín $\vec{s}$.

- Inversión temporal: Ya hemos visto en la sección anterior que $\theta T \theta^{-1} = T^\dagger$. Sigamos el mismo razonamiento que en (15.5),

$$\langle \vec{k}\,', \chi_\mu | T | \vec{k}, \chi_\nu \rangle = \langle \widetilde{\vec{k}\,', \chi_\mu} | \theta T | \vec{k}, \chi_\nu \rangle^* = \langle \widetilde{\vec{k}\,', \chi_\mu} | T^\dagger | \widetilde{\vec{k}, \chi_\nu} \rangle^* \ . \tag{16.17}$$

Teniendo en cuenta las leyes de transformación bajo inversión temporal (8.38) y (8.23),

$$\langle \vec{k}\,', \chi_\mu | T | \vec{k}, \chi_\nu \rangle = i^{2\mu} (i^{2\nu})^* \langle -\vec{k}, \chi_{-\nu} | T | -\vec{k}\,', \chi_{-\mu} \rangle = i^{2(\nu-\mu)} \langle -\vec{k}, \chi_{-\nu} | T | -\vec{k}\,', \chi_{-\mu} \rangle \;, \quad (16.18)$$

que implica,

$$f_{\mu\nu}(\vec{k}\,', \vec{k}) = i^{2(\nu-\mu)}\, f_{-\nu-\mu}(-\vec{k}\,', -\vec{k}) \;. \quad (16.19)$$

Si además imponemos inversión bajo paridad resulta,

$$f_{\mu\nu}(\vec{k}\,', \vec{k}) = i^{2(\nu-\mu)} f_{-\nu-\mu}(\vec{k}\,', \vec{k}) \;. \quad (16.20)$$

Rotaciones	$M(\vec{k}\,', \vec{k}, \vec{s})$ es un escalar
Paridad	$M(\vec{k}\,', \vec{k}, \vec{s}) = M(-\vec{k}\,', -\vec{k}, \vec{s})$
Inversión temporal (+ rotaciones)	$f_{\mu\nu}(\vec{k}\,', \vec{k}) = i^{2(\mu-\nu)} f_{-\nu-\mu}(-\vec{k}\,', -\vec{k})$

Cuadro 16.1: Cuadro resumen de las restricciones impuestas por la conservación de la simetría correspondiente.

La expresión (16.19) se puede simplificar para espín 1/2 de forma notable. De la relación (6.157) podemos escribir,

$$\begin{aligned}
\langle \vec{k}\,', \chi_\mu | T | \vec{k}, \chi_\nu \rangle &= i^{2(\nu-\mu)} \langle -\vec{k}, \chi_{-\nu} | T | -\vec{k}\,', \chi_{-\mu} \rangle \\
&= i^{2(\nu-\mu)} (-1)^{j-\mu} (-1)^{j-\nu} \langle -\vec{k}, \chi_\nu | \mathcal{D}_{y,spin}(\pi)^\dagger T \mathcal{D}_{y,spin}(\pi) | -\vec{k}\,', \chi_\mu \rangle \\
&= \frac{-\hbar^2}{4\pi^2 \mu} \langle \chi_\nu | M(-\vec{k}, -\vec{k}\,', R_y(\pi) s_x, R_y(\pi) s_y, R_y(\pi) s_z) | \chi_\mu \rangle \\
&= \frac{-\hbar^2}{4\pi^2 \mu} \langle \chi_\nu | M(-\vec{k}, -\vec{k}\,', -s_x, s_y, -s_z) | \chi_\mu \rangle \\
&= \frac{-\hbar^2}{4\pi^2 \mu} \langle \chi_\mu | M^\dagger(-\vec{k}, -\vec{k}\,', -s_x, s_y, -s_z) | \chi_\nu \rangle^* \;, \quad (16.21)
\end{aligned}$$

donde se ha tenido en cuenta la ley de transformación de los operadores cartesianos (6.163). Dado que los coeficientes de Clebsch-Gordan son reales y, en virtud del producto de Kronecker de matrices de rotación (6.89), cualquier matriz de rotación asociada a la representación irreducible j se puede construir a partir del producto de $2j$ matrices de rotación de espín 1/2, con lo que el generador s_y siempre será una matriz imaginaria pura mientras que s_x y s_z serán reales[#1]. Por lo tanto, si denotamos por γ todos los posibles coeficientes complejos que hayan en M, tendremos la relación,

$$M^\dagger(-\vec{k}, -\vec{k}\,', -s_x, s_y, -s_z, \gamma)^* = M(-\vec{k}, -\vec{k}\,', -s_x, -s_y, -s_z, \gamma) \;, \quad (16.22)$$

[#1] Los generadores para espín 1 dados en (6.9) y (6.11) no están dados en la base esférica sino en la cartesiana.

téngase en cuenta además que para partículas de espín 1/2 M sólo puede depender linealmente de $\vec{s}$ ya que el producto de dos matrices de Pauli vuelve a ser una combinación de la identidad y de matrices de Pauli. Insertando este resultado en (16.21), tenemos,

$$\langle \vec{k}\,', \chi_\mu | T | \vec{k}, \chi_\nu \rangle = \frac{-\hbar^2}{4\pi^2\mu} \langle \chi_\mu | M(-\vec{k}, -\vec{k}\,', -s_x, -s_y, -s_z, \gamma) | \chi_\nu \rangle \,, \tag{16.23}$$

puesto que los estados $|\chi_{\mu(\nu)}\rangle$ no inducen factores complejos adicionales ya que son vectores columna reales. Resumiendo,

$$M(\vec{k}\,', \vec{k}, \vec{s}) = M(-\vec{k}\,', -\vec{k}, -\vec{s}) \,. \tag{16.24}$$

Combinando a su vez invarianza bajo paridad llegamos al resultado válido para espín 1/2,

$$M(\vec{k}\,', \vec{k}, \vec{s}) = M(\vec{k}\,', \vec{k}, -\vec{s}) \,. \tag{16.25}$$

16.2.1. ⋆Fórmula de balance detallado

Empleando (16.20), podemos generalizar el resultado del balance detallado dado en (15.13) para el caso de partículas con espín. En una colisión no polarizada, donde no se determina el espín de las partículas finales y todas las proyecciones de espín del estado inicial son igualmente posibles, se tiene que la sección eficaz viene dada por,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\vec{k}\,'|}{|\vec{k}|} \frac{1}{2s+1} \sum_{\mu,\nu=-s}^{s} |f_{\mu\nu}(\vec{k}\,', \vec{k})|^2 \,, \tag{16.26}$$

de (16.9) con $w_\mu = 1/(2s+1)$. Para dar mayor generalidad a nuestros resultados no se ha supuesto que necesariamente $|\vec{k}| = |\vec{k}\,'|$. Puesto que para el cálculo de la sección eficaz hay que dividir por el flujo de partículas iniciales y estamos permitiendo que $|\vec{k}| \neq |\vec{k}\,'|$, es por lo que aparece el factor k'/k en (16.26), ya que las velocidades en (10.61) y (10.63) no son entonces iguales y no se cancelan al calcular la sección eficaz. De hecho, ni tan siquiera se requiere que el contenido en partículas de los sistemas inicial y final sea el mismo, ya que, cualquier paridad intrínseca que podría aparecer en (16.20) desaparece al calcular el módulo al cuadrado. Dado que estamos sumando sobre todos los espines, podemos pasar de $-\mu(-\nu)$ a $\nu(\mu)$ en (16.26), y, como consecuencia de (16.20), resulta la siguiente igualdad entre secciones eficaces,

$$\begin{aligned}
(2s_i+1)\frac{k'}{k}\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{k} \to \vec{k}\,') &= (2s_f+1)\frac{k}{k'}\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{k}\,' \to \vec{k}) \,, \\
\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{k} \to \vec{k}\,') &= \frac{2s_f+1}{2s_i+1}\left(\frac{k'}{k}\right)^2 \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{k}\,' \to \vec{k}) \,,
\end{aligned} \tag{16.27}$$

donde s_i y s_f son los espines inicial y final, respectivamente.

16.2.2. Forma general de M para el caso de espín 1/2

Determinemos la forma general del operador de espín $M(\vec{k}\,', \vec{k}, \vec{s})$ para espín 1/2, imponiendo invarianza bajo paridad, rotaciones e inversión temporal.

De invarianza bajo rotaciones se sigue,

$$M = g_1 + \vec{\sigma}(\vec{k} \times \vec{k}\,')g_2 + \vec{\sigma}(\vec{k} + \vec{k}\,')g_3 + \vec{\sigma}(\vec{k} - \vec{k}\,')g_4 \ , \tag{16.28}$$

donde $g_i = g_i(k^2, k'^{\,2}, \vec{k}\,'\vec{k})$ son funciones escalares de los momentos. En la expresión anterior se ha hecho uso de que las matrices $\vec{\sigma}_i$ y la identidad constituyen un álgebra cerrada bajo el producto de matrices, por lo tanto, cualquier término cuadrático y de grado superior en $\vec{\sigma}_i$ se puede expresar como combinación lineal de la estructura general en (16.28).

Si además imponemos inversión temporal (16.24), esto implica que $g_4 = 0$, puesto que, al cambiar de signo los momentos y $\vec{\sigma}$, aparece un signo menos afectando a la estructura proporcional a g_4.

Finalmente, inversión espacial (16.15) implica por sí misma que no sólo $g_4 = 0$, sino también $g_3 = 0$.

Por lo tanto, la imposición de todas estas simetrías implica una estructura en espín muy limitada para M,

$$M = g + (\vec{\sigma}\hat{n})h \ , \tag{16.29}$$

donde $\hat{n}$ es el vector director de $\vec{k}\,' \times \vec{k}$ y g y h son funciones de k, k' y $\cos\theta$.

16.2.3. *Imposición de simetrías en el Hamiltoniano

Si la interacción no depende de espín, vimos en el capítulo 5, cuando se trató la invarianza bajo las transformaciones de Galileo, que el potencial debe ser una función escalar de las coordenadas relativas de las partículas del sistema, garantizándose así invarianza bajo transformaciones de Galileo, rotaciones, paridad e inversión temporal. Sin embargo, en la naturaleza existen fuerzas dependientes de espín, muy conocida es la interacción espín órbita en física atómica y nuclear o fuerzas tensoriales en la interacción nucleón-nucléon,etc.

Consideremos a continuación un sistema de dos partículas de masa reducida μ y espín 1/2, y establezcamos las estructuras permitidas en un Hamiltoniano invariante bajo rotaciones, paridad e inversión temporal. Por la misma razón que para el caso del operador M, es suficiente considerar estructuras lineales en $\vec{\sigma}$. El Hamiltoniano será una función de $\vec{\sigma}$, esto es, de espín, de momento lineal, $\vec{p}$, y de posición, $\vec{x}$. A partir de ellos podemos construir los siguientes escalares,

$$\vec{\sigma}(\vec{r} \times \vec{p}) \ , \ \ \vec{\sigma}\vec{p} \ , \ \ \vec{\sigma}\vec{r} \ , \tag{16.30}$$

no considerando términos posibles de interacción cuadráticos en el operador $\vec{p}$ y de potencias superiores. Por lo tanto, en esta aproximación, podemos escribir el Hamiltoniano como,

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu} + V_0(r) + V_1(r)\vec{\sigma}\vec{\ell} \, , \tag{16.31}$$

donde no hemos considerado $\vec{\sigma}\vec{p}$ ni $\vec{\sigma}\vec{r}$, puesto que violan paridad y la segunda estructura, además inversión temporal. Las funciones V_0 y V_1 son escalares y, por tanto, sólo pueden depender en general de r, p y de su producto escalar, $\vec{r}\vec{p}$, $\vec{p}\vec{r}$. No obstante, en el Hamiltoniano anterior sólo se han supuesto dependientes de r dado que es el caso más habitual y sencillo de resolver.

El termino $\vec{\sigma}\vec{\ell}$ es el denominado acoplamiento de espín-órbita y como se ha mencionado es fundamental en física nuclear y en física atómica, donde da lugar a correcciones relativistas en el espectro.

Si sólo hubiésemos impuesto invarianza bajo inversión temporal, la estructura $\vec{\sigma}\vec{p}$ estaría permitida y daría lugar a un término adicional en el Hamiltoniano (16.31),

$$\frac{1}{2}\left[V_2(r)\vec{\sigma}\vec{p} + \vec{\sigma}\vec{p}V_2(r)\right] \ , \tag{16.32}$$

donde la estructura simétrica anterior garantiza que H sea hermítico. Estos términos dan lugar a contribuciones a M de la forma $\vec{\sigma}(\vec{k}+\vec{k}\,')$, que conservan inversión temporal pero violan paridad, como hemos visto en (16.28).

Si permitimos la violación además de inversión temporal, tendríamos términos en el Lagrangiano de la forma $V_3(r)\vec{\sigma}\vec{r}$, que darían lugar a contribuciones en M (16.28) de la forma $\vec{\sigma}(\vec{k}-\vec{k}\,')$ que violan T y P.

16.3. Polarización producida tras la colisión

Aplicamos a continuación las restricciones impuestas sobre M que hemos tratado en la sección 16.2.2 para colisión de partículas de espín 1/2. Calculemos primero la sección eficaz (16.9) de un haz no polarizado, para M dada (16.29) y que conserva paridad, inversión temporal y rotaciones. Resulta,

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} = tr(M\rho M^\dagger) &= \frac{1}{2}trMM^\dagger = \frac{1}{2}tr\left[(g+\vec{\sigma}\hat{n}\,h)(g^*+\vec{\sigma}\hat{n}\,h^*)\right] = \frac{1}{2}tr\left(|g|^2+|h|^2\right)\\ &= |g|^2+|h|^2 \ .\end{aligned} \tag{16.33}$$

Vemos, por tanto, que para la colisión de un haz no polarizado la sección eficaz diferencial es independiente del ángulo acimutal que distingue entre distintos planos de colisión.

No obstante, el haz dispersado en una cierta dirección sí que puede resultar polarizado dado que la interacción puede favorecer unos valores de la proyección de espín sobre otros. Siguiendo con el caso del haz no polarizado y con M dada en (16.29), la polarización del haz resultante en la dirección $\vec{k}\,'$ viene dada por,

$$\vec{P}_f = \frac{tr\left(\vec{\sigma}M\rho M^\dagger\right)}{trM\rho M^\dagger} = \hat{n}\,\frac{2\mathrm{Re}gh^*}{|g|^2+|h|^2} \ , \tag{16.34}$$

y es perpendicular al plano de la interacción. Notemos que si hubiésemos considerado términos que violasen paridad en M, de la forma $\vec{\sigma}(\vec{k}\pm\vec{k}\,')$, en lugar de $\hat{n}$ en (16.34), tendríamos vectores directores según $\vec{k}\pm\vec{k}\,'$ que darían lugar a componentes en $\vec{P}_f$ contenido en el plano de colisión. Por lo tanto, la medida de la polarización del haz resultante se puede emplear para hacer pruebas de violación o conservación de paridad. De hecho, así se procedió en el descubrimiento experimental de la violación de paridad por las interacciones débiles [17].

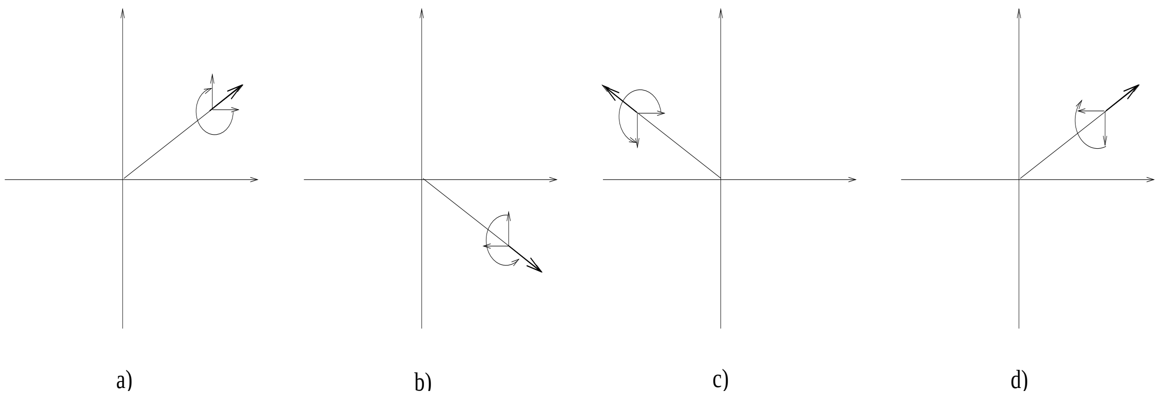

Figura 16.1: Explicación de por qué para un haz inicialmente no polarizado, el haz resultante sólo puede tener polarización con componentes en el plano perpendicular al de colisión.

Existe una explicación pictórica muy adecuada de que la polarización del haz dispersado en una cierta dirección esté contenida en el plano perpendicular al de colisión. Para ello, consideremos la figura 16.1. En esta figura las componentes xy de la polarización en el plano de la figura, que corresponde al de colisión, se indican mediante flechas, mientras que la componente según el eje z se señala mediante las flechas circulares, tal que el sentido z positivo corresponde al giro de éstas en sentido antihorario. Hagamos las siguientes transformaciones sobre la figura 16.1a: (i) una reflexión en el plano yz, (ii) una rotación de ángulo 180^o alrededor del eje z y (iii) una rotación de ángulo 180 alrededor del eje x. Estas operaciones dan lugar a las figuras 16.1,b,c y d respectivamente. Si la interacción conserva rotaciones y paridad, la probabilidad de que ocurra el suceso de la figura 16.1a y 16.1d es la misma y, por tanto, se cancelan las componentes de la polarización en el plano de colisión que tienen signo opuesto en las dos figuras.

De hecho, el estudio de la dependencia acimutal en procesos de colisión, ausente como hemos visto para el caso de polarización inicial nula, constituye un método experimental adecuado para determinar la polarización inicial. Sea $\vec{P}_i$ la polarización del haz inicial, entonces

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{2} tr\left[(1+\vec{P}_i\vec{\sigma})(g^*+\vec{\sigma}\hat{n}\,h^*)(g+\vec{\sigma}\hat{n}\,h)\right] \\ &= |g|^2+|g|^2+2\vec{P}_i\hat{n}\,\mathrm{Re}(g^*h)\ . \end{aligned} \tag{16.35}$$

Dado un cierto vector número de onda dispersado $\vec{k}\,'$, sea $\vec{k}\,''$ el vector reflejado de $\vec{k}\,'$ por el plano que contiene a $\vec{k}$ y es perpendicular al plano formado por $\vec{k}$ y $\vec{k}\,'$. Se sigue,

$$\frac{\left|\frac{d\sigma}{d\Omega}_{\vec{k}\,'}-\frac{d\sigma}{d\Omega}_{\vec{k}\,''}\right|}{\frac{d\sigma}{d\Omega}_{\vec{k}\,'}+\frac{d\sigma}{d\Omega}_{\vec{k}\,''}}=\frac{2|\mathrm{Re}gh^*||\vec{P}_i|}{|g|^2+|h|^2}\ , \tag{16.36}$$

que se denomina asimetría izquierda–derecha. Mediante el estudio de haces no polarizados inicialmente podemos conocer $|g|^2+|h|^2$ (medida de la sección eficaz diferencial), véase (16.33), y midiendo entonces la polarización resultante, se determina $\mathrm{Re}gh^*$ según (16.34). Con esta información se puede conocer $|\vec{P}_i|$ a partir de (16.36).

16.4. Dispersión de partículas idénticas

16.4.1. Bosón-bosón

Consideremos la dispersión de partículas idénticas de espín nulo. Dada la simetría de la función de onda bajo el intercambio de dos bosones, la parte libre de la función de onda será,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_{\vec{k}}(\vec{r})+\phi_{-\vec{k}}(\vec{r})\right) \ . \tag{16.37}$$

Cada onda plana da lugar a una onda esférica saliente modulada por la amplitud de colisión $f(\vec{k}\,',\vec{k})$. Por lo tanto, el comportamiento asintótico para $r\to\infty$ de $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ es,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}}\left[e^{i\vec{k}\vec{r}}+\frac{e^{ikr}}{r}f(\vec{k}\,',\vec{k})+\frac{e^{-i\vec{k}\vec{r}}}{r}+\frac{e^{ikr}}{r}f(\vec{k}\,',-\vec{k})\right] \ . \tag{16.38}$$

Dado que f es un escalar,

$$f(\vec{k}\,',-\vec{k})=f(-\vec{k}\,',\vec{k}) \ . \tag{16.39}$$

Se sigue de (10.62) que la corriente dispersada de probabilidad para $r\to\infty$ es,

$$\vec{j}_{disp}(\vec{r},t)=\frac{v_k\hat{r}}{2(2\pi)^3r^2}\left|f(\vec{k}\,',\vec{k})+f(-\vec{k}\,',\vec{k})\right|^2 \ . \tag{16.40}$$

Procediendo igual que en el caso de partículas distinguibles, la sección eficaz diferencial es,

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left|f(\vec{k}\,',\vec{k})+f(-\vec{k}\,',\vec{k})\right|^2\\ \sigma &= \int d\Omega\left|f(\vec{k}\,',\vec{k})+f(-\vec{k}\,',\vec{k})\right|^2 \ .\end{aligned} \tag{16.41}$$

Es importante destacar el término de interferencia que aparece en el cálculo de las secciones eficaces para bosones idénticos,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(k,\theta)|^2+|f(k,\pi-\theta)|^2+2\mathrm{Re}f(k,\theta)f^*(k,\pi-\theta) \ , \tag{16.42}$$

este término de interferencia no tiene análogo clásico y produce efectos experimentales muy importantes. Así, para $\theta=\pi/2$, tendremos una interferencia constructiva:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}_{\theta=\frac{\pi}{2}}=4|f(k,\pi/2)|^2 \ . \tag{16.43}$$

Clásicamente se esperaría sólo un factor 2 y no un factor cuatro, puesto que desde el punto de vista clásico sumaríamos partículas dispersadas según θ y $\pi-\theta$ dado que, al ser partículas idénticas, no se puede distinguir entre ambas configuraciones en el contaje experimental.

Desarrollo en ondas parciales En este caso el desarrollo en ondas parciales se debe hacer sobre $f(k,\theta)+f(k,\pi-\theta)$. De (12.56) se sigue,

$$f(k,\theta)+f(k,\pi-\theta)=\frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2\ell+1)}e^{i\delta_\ell}\mathrm{sen}\delta_\ell\left(Y_\ell^0(\theta)+Y_\ell^0(\pi-\theta)\right) \ , \tag{16.44}$$

teniendo en cuenta que $Y_\ell^0(\pi-\theta) = (-1)^\ell Y_\ell^0(\theta)$, sólo las ondas pares contribuyen. Haciendo $\ell = 2n$, con n entero,

$$f(k,\theta)+f(k,\pi-\theta) = \frac{2}{k}\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(4n+1)}e^{i\delta_{2n}}\text{sen}\delta_{2n}Y_{2n}^0(\theta) \; . \tag{16.45}$$

16.4.2. Fermión-fermión

Dado que el aspecto novedoso y el que recalcamos en esta sección, es la presencia de dos fermiones idénticos en el proceso de colisión, tomemos el supuesto más simple respecto al resto de variables que entran en el proceso de colisión. Así, consideremos que se trata de partículas de espín 1/2.

De la combinación de dos espines 1/2 obtenemos las representaciones triplete (spin=1) y singlete(espín= 0) de espín. Las funciones de onda de espín son respectivamente simétricas y antisimétricas bajo el intercambio de los dos espinores. Si pensamos en ondas parciales, los estados triplete sólo podrán incluir ondas parciales impares mientras que los estados singlete requieren ondas parciales pares, para que de este modo la función de onda total sea antisimétrica. Por lo tanto, en la medida en que se conserve paridad, como así lo supondremos en esta sección, los estados singlete y triplete no se mezclan, puesto que la ondas parciales impares tienen paridad -1 mientras que las pares la tienen $+1$. Por lo tanto, podemos abordar el problema de colisión de dos fermiones de espín 1/2 como un doble proceso de colisión disjunto para los estados triplete y singlete. Denotamos por el subíndice t las amplitudes de colisión referidas a los estados triplete y, por el subíndice s, aquellas otras referidas al singlete. La amplitud de colisión es una matriz cuatro por cuatro en el espacio de espines, que podemos escribir como:

$$\mathcal{M}(\vec{k}\,',\vec{k}) = \left[M_s(\vec{k}\,',\vec{k})+M_s(\vec{k}\,',-\vec{k})\right]+\left[M_t(\vec{k}\,',\vec{k})-M_t(\vec{k}\,',-\vec{k})\right] \; , \tag{16.46}$$

donde M_s es una matriz que sólo afezca al estado singlete y M_t es una matriz en el espacio de estados triplete. Ambas se calculan como si las partículas fuesen distinguibles (al igual que hicimos en bosón-bosón) tal que la matriz de espín es $M(\vec{k}\,',\vec{k}) = M_s(\vec{k}\,',\vec{k})+M_t(\vec{k}\,',\vec{k})$.

La sección eficaz diferencial cuando el estado inicial, que incluye blanco y proyectil, tiene la matriz densidad ρ en el espacio de espines viene dada en virtud de (16.9) por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = tr\mathcal{M}\rho\mathcal{M}^\dagger \; . \tag{16.47}$$

La forma más general de ρ para dos partículas de espín 1/2 es,

$$\rho = \frac{1}{4}\left[1+\vec{\sigma}_1\vec{P}_1+\vec{\sigma}_2\vec{P}_2+\sum_{\alpha\beta}\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}Q_{\alpha\beta}\right] \; , \tag{16.48}$$

dado que cualquier otro término de mayor grado en las $\sigma_{i,\alpha}$ se puede expresar como combinación de los términos dados por la misma razón que se adujo en (16.28). Es trivial comprobar que,

$$\begin{aligned} tr\rho &= 1 \; , \\ tr\rho\vec{\sigma}_1 &= \vec{P}_1 \\ tr\rho\vec{\sigma}_2 &= \vec{P}_2 \; . \end{aligned} \tag{16.49}$$

Téngase en cuenta que la traza se ha de tomar sobre el espacio directo del producto de los dos espines. El tensor $Q_{\alpha\beta}$ describe las correlaciones entre los espines de las dos partículas idénticas en el estado inicial y también se puede generar en la matriz densidad de los haces finales tras la colisión aunque el estado inicial sea no polarizado.

De (16.11) la matriz densidad de un haz dispersado según $\vec{k}\,'$ es,

$$\rho'_{\vec{k}\,'} = \frac{\mathcal{M}\rho\mathcal{M}^\dagger}{tr\mathcal{M}\rho\mathcal{M}^\dagger} \ . \tag{16.50}$$

Si $\rho = 1/4$, haz inicial no polarizado,

$$\rho'_{\vec{k}\,'} = \frac{\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger}{tr\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger} \ . \tag{16.51}$$

También es directo calcular que,

$$Q_{\alpha\beta} = \frac{tr\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger}{tr\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger} \ , \tag{16.52}$$

para el haz dispersado según la dirección $\vec{k}\,'$.

Dado el diferente comportamiento de los estados singlete y triplete es interesante introducir un formalismo más compacto. Esto se consigue mediante el empleo de los proyectores sobre los subespacios triplete y singlete, P_t y P_S, respectivamente, definidos por:

$$\begin{aligned} P_t &= \frac{1}{4}(1 - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \ , & (16.53) \\ P_s &= \frac{1}{4}(3 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) \ , & (16.54) \end{aligned}$$

teniendo en cuenta que el espín total al cuadrado, S^2, viene dado por,

$$S^2 = s_1^2 + s_2^2 + 2\vec{s}_1\vec{s}_2 \ , \tag{16.55}$$

nos permite calcular $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ y, con ello, comprobar que P_s se anula cuando actúa sobre estados triplete y P_t se anula sobre los estados singlete. De hecho, $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = 1$ para $S = 0$, y $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = -3$. Además es directo comprobar que,

$$\begin{aligned} P_s^2 &= P_s \ , \\ P_t^2 &= P_t \ , \\ P_t P_s &= 0 \ , \\ P_t + P_s &= 1 \ , \\ trP_s &= 1 \ , \\ trP_t &= 3 \ . \end{aligned} \tag{16.56}$$

Por lo tanto podemos escribir,

$$\begin{aligned} M_t &= P_t M P_t \ , \\ M_s &= P_s M P_s \ . \end{aligned} \tag{16.57}$$

En lo que sigue consideramos el caso simple de un potencial cuya dependencia en el espín de las dos partículas es de la forma,

$$V(r) = V_1(r) + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \, V_2(r) \; . \tag{16.58}$$

Dado que $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$, en virtud de (16.55), es una función del espín total S^2, queda claro que el potencial anterior conserva el espín total, tanto su magnitud (triplete o singlete) como su componente tercera. De esta forma podemos hablar de una única amplitud de transición para singlete-singlete y de otra para triplete-triplete, tal que:

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= (f_s(k,\theta) + f_s(k,\pi-\theta))P_s + (f_t(k,\theta) - f_t(k,\pi-\theta))P_t \\ &\equiv \tilde{f}_s P_s + \tilde{f}_t P_t \; . \end{aligned} \tag{16.59}$$

y con ello la sección eficaz diferencial queda como,

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= tr\rho(\tilde{f}_s P_s + \tilde{f}_t P_t)(\tilde{f}_s^* P_s + \tilde{f}_t^* P_t) \\ &= |f_s(k,\theta) + f_s(k,\pi-\theta)|^2 \, tr\rho P_s + |f_t(k,\theta) - f_t(k,\pi-\theta)|^2 \, tr\rho P_t \; . \end{aligned} \tag{16.60}$$

Si el estado inicial es no polarizado tenemos sencillamente

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{3}{4} |f_t(k,\theta) - f_t(k,\pi-\theta)|^2 + \frac{1}{4} |f_s(k,\theta) + f_s(k,\pi-\theta)|^2 \; . \tag{16.61}$$

Nótese que hay tres estados triplete y uno sólo singlete.

Si el proceso es independiente de espín, $V_2 = 0$, se tiene que $f_s = f_t = f$ y, por lo tanto, en este supuesto,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} |f(k,\theta) + f(k,\pi-\theta)|^2 \; , \tag{16.62}$$

igual que en la colisión de partículas idénticas de espín nulo (16.41).

También el desarrollo en ondas parciales es directo a partir de (12.56) y, procediendo análogamente que en (16.44), se llega a,

$$\begin{aligned} f_s(k,\theta) + f_s(k,\pi-\theta) &= \frac{2}{k} \sum_{\ell=0,2,4\ldots} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{i\delta_\ell} \mathrm{sen}\delta_\ell Y_\ell^0(\theta) \; , \\ f_t(k,\theta) - f_t(k,\pi-\theta) &= \frac{2}{k} \sum_{\ell=1,3,5\ldots} \sqrt{4\pi(2\ell+1)} e^{i\delta_\ell} \mathrm{sen}\delta_\ell Y_\ell^0(\theta) \; . \end{aligned} \tag{16.63}$$

Calculemos $Q_{\alpha\beta}$ resultante de la dispersión para haces no polarizados inicialmente. De (16.59), es directo comprobar que,

$$\begin{aligned} \mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger &= \tilde{f}_s \tilde{f}_s^* P_s + \tilde{f}_t \tilde{f}_t^* P_t \; , \\ tr\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger &= |f_s(k,\theta) + f_s(k,\pi-\theta)|^2 + 3|f_t(k,\theta) - f_t(k,\pi-\theta)|^2 \; , \\ tr\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}P_s &= -\delta_{\alpha\beta} \; , \\ tr\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}P_t &= \delta_{\alpha\beta} \; , \\ -\frac{1}{4} tr\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 &= -\delta_{\alpha\beta} \; , \\ tr\mathcal{M}\mathcal{M}^\dagger\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta} &= \left\{ |f_t(k,\theta) - f_t(k,\pi-\theta)|^2 - |f_s(k,\theta) + f_s(k,\pi-\theta)|^2 \right\} \delta_{\alpha\beta} \; . \end{aligned} \tag{16.64}$$

Teniendo en cuenta estos cálculos, de (16.52) se sigue,

$$
\begin{aligned}
Q_{\alpha\beta} &= Q(k,\theta)\,\delta_{\alpha\beta} ~, \\
Q(k,\theta) &= \frac{|f_t(k,\theta)-f_t(k,\pi-\theta)|^2-|f_s(k,\theta)+f_s(k,\pi-\theta)|^2}{|f_s(k,\theta)+f_s(k,\pi-\theta)|^2+3|f_t(k,\theta)-f_t(k,\pi-\theta)|^2} ~.
\end{aligned}
\tag{16.65}
$$

Si el proceso de colisión sólo tiene lugar en uno de los dos canales de espín total,

$$
\begin{aligned}
Q &= 1/3 \text{ sólo triplete, espines paralelos } , \\
Q &= -1 \text{ sólo singlete, espines antiparalelos } ,
\end{aligned}
\tag{16.66}
$$

en general

$$
-1 \leq Q \leq \frac{1}{3} ~. \tag{16.67}
$$

Es importante destacar que la correlación de espín es no nula incluso en el caso de que las fuerzas sean independientes de espín. Sustituyendo $f_t = f_s = f$ en (16.65),

$$
Q = -\frac{\mathrm{Re} f(k,\theta) f^*(k,\pi-\theta)}{d\sigma/d\Omega} ~, \tag{16.68}
$$

con $d\sigma/d\Omega$ dada en (16.61). Por ejemplo, a muy bajas energías sólo la onda S contribuirá, por tanto sólo habrá estado singlete, y en este caso $f(k,\theta) \simeq f(k,\pi-\theta)$ y los espines son antiparalelos, $Q=-1$, como debe ser.

Parte V

Colección de problemas

Apéndice A

Primer boletín

1. Encuentra los autovalores y autovectores de

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} .$$

Supóngase que un electrón está en un estado,

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} .$$

Si se mide S_y, determinar la probabilidad de obtener $\hbar/2$.

2. Considera la matriz 2×2 definida por:

$$U = \frac{a_0 + i\vec{\sigma} \cdot \vec{a}}{a_0 - i\vec{\sigma} \cdot \vec{a}} ,$$

donde a_0 es una variable real y $\vec{a}$ es un vector tridimensional con componentes reales.

a) Prueba que U es unitaria y unimodular.

b) En general, una matriz unitaria 2×2 representa una rotación en 3 dimensiones. Encuentra el eje y el ángulo de rotación para U en términos de a_0 y $\vec{a}$.

3. El Hamiltoniano dependiente de espín de un sistema formado por un electrón-positrón en la presencia de un campo magnético uniforme B en la dirección z se puede escribir como:

$$H = A\vec{S}^{(-)} \cdot \vec{S}^{(+)} + \frac{eB}{2m}(S_z^{(-)} - S_z^{(+)}) .$$

Supóngase que la función de ondas del sistema es $\chi_+^{(-)}\chi_-^{(+)}$.

a)En el límite $A \to 0$, $eB/m \neq 0$, determinar si la función de onda anterior es un autovalor de H. Si lo es determínese su autovalor y si no su valor medio.

b) Lo mismo que en el apartado anterior pero para el caso $eB/m \to 0$, $A \neq 0$.

4. a) Considérese un estado puro de un sistema de espín 1/2. Supóngase conocidos los valores medios $\langle S_x \rangle$, $\langle S_z \rangle$ y el signo de $\langle S_y \rangle$. Mostrar cómo podemos determinar el correspondiente vector estado y justificar por qué es necesario conocer sólo el signo de $\langle S_y \rangle$.

   b) Considera un estado mezcla de sistemas de espín 1/2. Supongamos conocidos los valores medios $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$ y $\langle S_z \rangle$. Construir la correspondiente matriz densidad.

5. Considérese un estado mezcla de sistemas de espín 1. La matriz densidad es ahora una matriz 3×3. Determinar el número de parámetros reales para caracterizar la matriz densidad. ¿Qué debemos conocer además de $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$ y $\langle S_z \rangle$?.

6. Utilizando un espectrógrafo de masas y un aparato de Stern-Gerlach demostrar que L_z y el Hamiltoniano son observables compatibles para un átomo aislado.

Apéndice B

Segundo boletín

1. Demostrar:

$$
\begin{aligned}
[x_i, G(\vec{p})] &= i\hbar \frac{\partial G(\vec{p})}{\partial p_i} \ , \\
[p_i, F(\vec{x})] &= -i\hbar \frac{\partial F(\vec{x})}{\partial x_i} \ ,
\end{aligned}
$$

donde $\vec{x}$ y $\vec{p}$ son los operadores de posición y momento. F y G son funciones que se pueden expresar en serie de potencias de $\vec{x}$ y $\vec{p}$, respectivamente.

2. Sea A una matriz arbitraria, demostrar:

$$
\lim_{N\to\infty} \left(1 - i\frac{A}{N}\right)^N = e^{-iA} \ .
$$

Haced uso del desarrollo en serie de potencias de la exponencial como definición de e^{-iA}.

3. Sea $\{|a'\rangle\}$ una base ortonormal del espacio de Hilbert, correspondiente a los autovectores del observable A. No hay degeneración.
a) Probar que:

$$
\prod_{a'} (A - a') \ = \ 0 \ .
$$

b) Determinar el significado de:

$$
\prod_{a'' \neq a'} \frac{A - a''}{a' - a''} \ .
$$

c) Ilustrar a) y b) utilizando como A el operador S_z, tercera componente del espín para sistemas de espín 1/2.

4. Un haz de átomos de espín 1/2 recorre una serie de medidas Stern-Gerlach como sigue:

   a. La primera medida acepta átomos con $S_z = +\hbar/2$ y rechaza átomos con $S_z = -\hbar/2$.

   b. La segunda medida acepta átomos con $S_n = +\hbar/2$ y rechaza átomos con $S_n = -\hbar/2$, donde S_n es la componente del espín según el vector director $\hat{n}$ contenido en el plano xz y que hace un ángulo β con el eje z.

   c. La tercera medida acepta átomos con $S_z = -\hbar/2$ y los rechaza con $S_z = +\hbar/2$.

   ¿Cuál es la intensidad del haz final con $S_z = -\hbar/2$ cuando la intensidad del haz con $S_z = +\hbar/2$, superviviente del primer experimento, se normaliza a 1?. ¿Cómo se debe orientar el segundo aparato de medida si queremos maximizar la intensidad del haz final con $S_z = -\hbar/2$?.

5. Considera un espacio tridimensional. Si un cierto conjunto de vectores ortonormales, digamos $|1\rangle$, $|2\rangle$ y $|3\rangle$, se emplea como base, entonces los operadores A y B se representan por:

$$
\begin{aligned}
A &= \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} \\
B &= \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} ,
\end{aligned}
$$

   donde a y b son ambos reales.

   a) El espectro de A es degenerado, ¿ocurre lo mismo con el de B?.

   b) Mostrar que A y B conmutan. Justificar el resultado por simple inspección de las matrices A y B.

   c) Encuentra un nuevo conjunto de kets que sean autovectores comunes de A y B. ¿Especifican los autovalores completamente a los autovectores?.

   d) Sea un nuevo observable que viene dado por:

$$
\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} .
$$

   Encontrar los autovectores normalizados a uno y los autovalores. ¿Hay degeneración?. Dar un ejemplo físico donde el resultado obtenido sea relevante.

6. La imagen de interacción se emplea usualmente para calcular probabilidades de transición en sistemas que se perturban débilmente. Como ilustración, consideremos un oscilador armónico unidimensional que se perturba por una fuerza débil, dependiente del tiempo, pero espacialmente uniforme $K(t)$, donde $K(t) = 0$ para $t < 0$. Inicialmente ($t < 0$) el sistema estaba en su estado fundamental $|0\rangle$, y para $t > 0$ suponemos que la respuesta se puede tratar por la serie de Dyson en imagen de interacción, serie de potencias en $K(t)$.

a) Mostrar que en la aproximación en que truncamos la serie de Dyson a orden K^n, el sistema no puede ser excitado más allá del estado excitado n-ésimo $|n\rangle$.

b) A primer orden en K, mostrar que la probabilidad de encontrar el sistema en $|1\rangle$ en el tiempo t es:

$$p_1(t) = \frac{1}{2m\hbar w}|\mathcal{K}(t)|^2 ,$$

donde

$$\mathcal{K}(t) = \int_0^t K(t')e^{iwt'}\,dt' .$$

c) Para $t \geq 0$, sea

$$K(t) = K_0(1 - e^{-t/\tau}) .$$

Mostrar que para tiempos grandes,

$$p_1(t) \simeq \frac{K_0^2}{2m\hbar w^3} ,$$

si $w\tau \gg 1$. Si $\tau = 0$, mostrar que $p_1(t)$ oscila indefinidamente. Compara el promedio temporal de esta función oscilante con la fórmula anterior.

d) Consideremos un oscilador que está en un campo de fuerzas uniforme y constante K y designemos por $|\widetilde{0}\rangle$ a su estado fundamental. Si $|1\rangle$ es el primer estado excitado del oscilador cuando $K = 0$, mostrar que $|\langle 1|\widetilde{0}\rangle|^2$ viene dado por la ecuación anterior, (B.1), en la aproximación más baja en que dicho resultado es diferente de cero. Coméntese el resultado.

7. Sea el Hamiltoniano de un sistema de partículas de espín 1/2:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} - \vec{M}\cdot\vec{B} , \\ \vec{M} &= \frac{e}{2m}\vec{\ell} + \frac{e}{2m}g_s\,\vec{S} , \end{aligned}$$

donde $\vec{\ell}$ es el momento angular orbital, $\vec{S}$ es el espín y g_s una constante.

a) Justificar que $\vec{\ell}^{\,2}$, ℓ_z y S_z conmutan con el Hamiltoniano anterior si $\vec{B}$ es paralelo al eje z.

En lo que sigue consideramos la base de estados $|\ell\,\ell_z S_z\rangle$.

b) Determinar la evolución temporal de la polarización del haz $\vec{P} = \langle 2\vec{S}/\hbar\rangle$ en la imagen de Heisenberg siendo $\vec{B}||\hat{z}$.

c) Haciendo uso de la imagen de Dirac, considerando B como pequeño, determinar a primer orden en la serie de Dyson la probabilidad de transición de un estado $|\ell\,\ell_z{+}1/2\rangle$ a $|\ell\,\ell_z{-}1/2\rangle$ cuando $\vec{B}||\hat{x}$.

d) Obtener el resultado anterior de forma exacta para una perturbación $-eg_sS_xB'/2m\hbar$.

Apéndice C

Tercer boletín

1. a) Consideremos la desigualdad de Schwartz

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \ .$$

Demuestra que la igualdad se cumple si y sólo si:

$$|\alpha\rangle = \lambda|\beta\rangle \ ,$$

con λ un número complejo.

b) Mostrar que el signo de la igualdad en la relación de incertidumbre generalizada se cumple sólo si el estado en cuestión satisface:

$$\Delta A|\alpha\rangle = \lambda\Delta B|\alpha\rangle \ .$$

Con λ un número imaginario puro.

c) Un tren de ondas gaussiano puede escribirse como:

$$\langle x'|\alpha\rangle = (2\pi d^2)^{-1/4} \exp\left[\frac{i\langle p\rangle x'}{\hbar} - \frac{(x' - \langle x\rangle)^2}{4d^2}\right] \ .$$

Dicho tren de ondas satisface la relación de incertidumbre mínima:

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

Probar que se satisface en este caso el teorema del apartado b):

$$\langle x'|\Delta x|\alpha\rangle = (\text{núm. imaginario puro})\langle x'|\Delta p|\alpha\rangle \ .$$

d) Probar el resultado inverso, es decir, cualquier función de ondas que satisfaga el principio de incertidumbre mínimo debe ser un tren de ondas gaussiano.

2. Considérese una partícula libre en una dimensión. En $t = 0$ satisface la relación de incertidumbre mínima:

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

Además se sabe que:

$$\langle x\rangle = \langle p\rangle = 0 \ (t = 0) \ .$$

Utilizando la imagen de Heisenberg, calcular $\langle(\Delta x)^2\rangle_t$ como función de t ($t \geq 0$) tomando $\langle(\Delta x)^2\rangle_{t=0}$ conocido. (*Ayuda* : hacer uso del apartado b) del problema anterior.)

3. Una caja que contiene una partícula se divide en dos compartimentos, izquierdo y derecho, separados por una fina partición. Los autovectores de posición $|R\rangle(|L\rangle)$ representan estados de la partícula en los que con seguridad ésta se encuentra en el lado derecho (izquierdo) de la caja. El estado vector más general viene dado por:

$$|\alpha\rangle = |R\rangle\langle R|\alpha\rangle + |L\rangle\langle L|\alpha\rangle \ ,$$

donde $\langle R|\alpha\rangle$ y $\langle L|\alpha\rangle$ se pueden considerar como funciones de onda. La partícula puede atravesar la partición por efecto túnel, que se caracteriza por el Hamiltoniano:

$$H = \Delta\left(|L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L|\right) \ ,$$

donde Δ es real y tiene dimensiones de energía.

a) Encontrar los autovalores y autovectores normalizados a 1 de H.

b) Empleando la base de autoestados del Hamiltoniano del apartado anterior, determinar el estado $|\alpha, t\rangle$ en un tiempo posterior t, $t \geq 0$. Se considera que para $t = 0$ $|\alpha\rangle$ es el vector dado arriba.

c) En $t = 0$ la partícula está en el lado derecho con toda certeza. ¿Cuál es la probabilidad de encontrar la partícula en el lado izquierdo como función del tiempo?.

d) Escribir las ecuaciones de Schrödinger acopladas para las funciones de onda $\langle R|\alpha, t\rangle$ y $\langle L|\alpha, t\rangle$. Mostrar que la solución de dichas ecuaciones es la misma que del apartado b).

e) Supongamos que $H = \Delta|L\rangle\langle R|$. ¿Es hermítico este Hamiltoniano?. ¿Se conserva la probabilidad a lo largo del tiempo?.

4. Clásicamente el producto de una traslación $\vec{x} \to \vec{x} + \vec{a}$ y una transformación pura de Galileo $\vec{x} \to \vec{x} + \vec{v}t$ es $\vec{x} \to \vec{x} + \vec{v}t + \vec{a}$. Demostrar que en el espacio de Hilbert también se tiene esta relación salvo una fase global:

$$\exp\left(\frac{-i\vec{K}\vec{v}}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-i\vec{P}\vec{a}}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{iM\vec{a}\vec{v}}{2\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{\vec{K}\vec{v} + \vec{P}\vec{a}}{\hbar}\right) \ ,$$

donde M es la masa de la partícula. Discutir la regla de superselección a que la relación anterior da lugar en el espacio de Hilbert.

Ayuda : Hacer uso de la relación $e^A\, e^B = e^{A+B} e^{[A,B]/2}$ si $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$

5. Calcular la función de onda del vector estado resultante de una transformación de Galileo en términos de la función de onda del vector estado original.

6. Sean $\mathcal{O}$ y $\mathcal{O}'$ dos sistemas de referencia inerciales. Demostrar que $H_{\mathcal{O}'} = H_{\mathcal{O}}$.

7. Sea $J^0(\vec{x},t)$ un operador densidad asociado a una carga Q tal que se satisface la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial J^0(\vec{x},t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial J^i(\vec{x},t)}{\partial x_i} = 0 ~,$$

donde $\vec{J}(\vec{x},t) = (J^1, J^2, J^3)$ es una corriente. Se utiliza la imagen de Heisenberg. La carga Q viene dada por la integral de la densidad:

$$Q = \int d^3x \, J^0(\vec{x},t) ~.$$

a) Siendo $|0\rangle$ un estado invariante bajo traslaciones y con energía nula (vacío), dar una expresión de $\langle 0|Q|0\rangle$ en función de $\langle 0|J^0(\vec{0},0)|0\rangle$, haciendo uso de invarianza bajo traslaciones y desplazamientos temporales. ¿Qué condición debe cumplir $\langle 0|J^0(\vec{0},0)|0\rangle$ para que $\langle 0|Q|0\rangle$ sea finito?.

b) Sea $|\vec{p}\rangle$ un estado de una partícula de momento $\vec{p}$. Expresar $\langle \vec{p}|Q|0\rangle$ en función de $\langle \vec{p}|J^0(\vec{0},0)|0\rangle$. Utilizar el resultado obtenido para calcular $\langle F|Q|0\rangle$ siendo $|F\rangle$ el tren de ondas:

$$|F\rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} |\vec{p}\rangle f(\vec{p}) ~,$$

con $f(\vec{p})$ en una función arbitraria de cuadrado integrable.

c) Demostrar haciendo uso de la ecuación de continuidad que

$$\frac{dQ}{dt} = 0 ~.$$

d) ¿Qué masa debe tener la partícula $|\vec{p}\rangle$ para que $\langle F|\frac{dQ}{dt}|0\rangle = 0$?.

e) Llegar a la misma respuesta del apartado anterior haciendo uso de:

$$i\hbar\frac{dQ}{dt} = [Q,H] ~.$$

8. Sean s_i ($i = x,y,z$) las matrices de momento angular $s_i = J_i/\hbar$ de espín 1. Mostrar que $s_i^3 = s_i$ y de aquí deducir que:

$$\mathcal{D}^{(1)}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-i\alpha s_z}\left[1 - i\sin\beta s_y - (1-\cos\beta)s_y^2\right] e^{-i\gamma s_z}$$

Apéndice D

Cuarto boletín

1. Calcular los coeficientes de Clebsch-Gordan $\langle j\, m\, j - m|00\rangle$.

2. Sea el estado fundamental de un átomo de hidrógeno y considérese la perturbación $\delta V(\vec{r}) = Bz^2$, siendo B una constante, que actúa para tiempos $t > 0$.

   a) Calcúlese a primer orden en teoría de perturbaciones el cambio en la energía del estado fundamental $n = 1$, $\ell = 0$.

   b) Si el estado inicial tiene $\ell = 0$, ¿qué momentos angulares puede tener el estado final tras actuar la perturbación un tiempo t.?

   c) Calcular en primer orden en teoría de perturbaciones la probabilidad de transición desde el estado $n = 1$, $\ell = 0$ al estado $n = 2$, $\ell = 1$ tras un tiempo t.

   Ayuda: Funciones radiales del átomo de hidrógeno.

$$
\begin{aligned}
R_{10}(r) &= \frac{2}{a_0^{3/2}} \exp^{-r/a_0} \; , \\
R_{21}(r) &= \frac{2}{(2a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp^{-r/(2a_0)} \; ,
\end{aligned}
$$

   siendo a_0 el radio de Bohr.

3. De la definición de $D(R)$, derivar en sucesión las siguientes relaciones.

   a)

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\alpha} D(R) &= -i\frac{J_z}{\hbar} D(R) \; , \\
\frac{\partial}{\partial\beta} D(R) &= -i\frac{J_{y'}}{\hbar} D(R) \; , \\
\frac{\partial}{\partial\gamma} D(R) &= -i\frac{J_\xi}{\hbar} D(R) \; ,
\end{aligned}
$$

   donde:

$$
J_\xi = J_z \cos\beta + \frac{1}{2}\left(e^{-i\alpha} J_+ + e^{i\alpha} J_-\right) \mathrm{sen}\beta \; ,
$$

$$
\begin{aligned}
[J_\xi, J_z] &= -iJ_{y'}\,\mathrm{sen}\beta \ , \\
J_{y'} &= \frac{i}{2}\left(e^{i\alpha}J_- - e^{-i\alpha}J_+\right) \ .
\end{aligned}
$$

b)

$$
\vec{J}^{\,2} = cosec^2\beta\left(J_z^2 + J_\xi^2 - 2\cos\beta J_z J_\xi\right) + J_{y'}^2 + i\hbar J_{y'}\cot\beta \ .
$$

c) De las relaciones anteriores derivar que las matrices $d^{(j)}$ satisfacen la ecuación diferencial:

$$
\left\{\frac{d^2}{d\beta^2} + cot\beta\frac{d}{d\beta} - \frac{m^2+(m')^2-2mm'\cos\beta}{\mathrm{sen}^2\beta} + j(j+1)\right\} d^{(j)}_{mm'} = 0 \ .
$$

4. El producto escalar de dos tensores esféricos del *mismo* rango se define como:

$$
T^{(k)}\cdot U^{(k)} = (-1)^k\sqrt{2k+1}\sum_{m=-k}^{k}\langle k\,m\,k-m|00\rangle T^{(k)}_m U^{(k)}_{-m} \ .
$$

Mostrar las siguientes igualdades:

a)

$$
\begin{aligned}
\langle n\,j\,m\,|T^{(k)}\cdot U^{(k)}|n'\,j'\,m'\rangle &= \frac{\delta_{jj'}\delta_{mm'}}{2j+1}\sum_{n''}\sum_{j''=|j-k|}^{j+k}(-1)^{j-j''}\sqrt{(2j+1)(2j''+1)} \\
&\quad\times\langle n\,j||T^{(k)}||n''\,j''\rangle\cdot\langle n''\,j''||U^{(k)}||n'\,j\rangle \ .
\end{aligned}
$$

b)

$$
\langle n\,j||\vec{J}||n'\,j'\rangle = -\delta_{nn'}\delta_{jj'}\hbar\sqrt{j(j+1)} \ .
$$

Los operadores correspondientes a los números cuánticos n conmutan con $\vec{J}$.

c)

$$
\langle n\,j\,m'\,|V_k|\,n'\,jm\rangle = [j(j+1)]^{-1}\langle n\,j\,m\,|\vec{V}\cdot\vec{J}|\,n'\,j\,m\rangle\langle j\,m\,|J_k|j\,m'\rangle \ .
$$

Ayuda: Hacer uso del resultado del problema 1 de este boletín.

5. Sea P el operador de paridad. Invarianza bajo paridad implica que si $U(t)$ es el operador de evolución temporal de un sistema tenemos que

$$
P\,U(t) = U(t)P \ .
$$

No obstante podríamos introducir una fase global $e^{iw(t)}$ tal que:

$$
P\,U(t) = e^{iw(t)}U(t)P \ ,
$$

donde w es una función real de t. Demostrar que si éste fuera el caso se tendría que $e^{iw(t)} = 1$ para todo t.

6. Consideremos un haz de partículas de espín 1/2 sometidas a un campo magnético uniforme y estacionario $\vec{B} = \hat{u}B$. El Hamiltoniano es:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{M}\cdot\vec{B} \ , \\ \vec{M} &= \frac{e}{2m}\vec{\ell} + \frac{e}{2m} g_s \vec{s} \ , \end{aligned}$$

donde $\vec{\ell}$ es el momento angular orbital y $\vec{s}$ el espín. El factor giromagnético de Lande g_s vale muy aproximadamente 2 para el electrón (2.0023), -1.92 para el neutrón y 5.59 para el protón, todas ellas partículas de espín 1/2.

Determinar la evolución temporal del vector de polarización del haz $\vec{P}(t) = \langle 2\vec{s}/\hbar\rangle_t$, siendo $\langle A\rangle_t$ el valor medio del operador A en el tiempo t. Se ha de obtener:

$$\vec{P}(t) = \vec{P}\cos(wt) + \hat{u}(\vec{P}\cdot\hat{u})2\mathrm{sen}^2(\frac{wt}{2}) + (\vec{P}\times\hat{u})\mathrm{sen}(wt) \ ,$$

siendo $\vec{P}$ el vector de polarización inicial, supuestamente conocido, $w = \mu B$ con μ el llamado momento magnético intrínseco de la partícula e igual a $eg_s/2m$.

7. Considerar los procesos de desintegración:

$$\begin{aligned} f_0(600) &\to \pi^0\pi^0 \ , \\ \rho(770) &\to \pi^+\pi^- \ . \end{aligned}$$

Las amplitudes de desintegración corresponden a:

$$\begin{aligned} \langle \pi^0\pi^0|U(t)|f_0(600)\rangle &= A_t\left(f_0(600)\to\pi^0\pi^0\right) \ , \\ \langle \pi^+\pi^-|U(t)|\rho(770)\rangle &= A_t\left(\rho(770)\to\pi^+\pi^-\right) \ . \end{aligned}$$

La $f_0(600)$ es una partícula escalar ($J = 0$, $P = +1$) mientras que la $\rho(770)$ es una partícula vectorial ($J = 1$ y $P = -1$). Los piones π^0 (neutrones), π^+ (carga positiva), π^- (carga negativa) son pseudoescalares ($J = 0$ y $P = -1$). Estudiar invarianza bajo rotaciones, paridad e inversión temporal aplicada a los procesos anteriores.

8. a) Escribir xy, xz, $x^2 - y^2$ y $3z^2 - r^2$ como las componentes de un tensor esférico irreducible de rango 2.

   b) El valor esperado:

$$Q \equiv e\langle \alpha, j, m = j|3z^2 - r^2|\alpha, j, m = j\rangle \ ,$$

   es conocido como el *momento cuadrupolar*. Evaluar:

$$e\langle \alpha, j, m'|x^2 - y^2|\alpha, j, m = j\rangle \ ,$$

   en términos de Q y de los correspondientes coeficientes de Clebsch-Gordan. En la expresión anterior $m' = j, j-1, ..., -j$.

   c) Particularizar para:

$$e\langle \alpha, 2, 0|x^2 - y^2|\alpha, 2, 2\rangle \ .$$

9. Sea $|1/2, m; \alpha\rangle$ el vector correspondiente al estado de un sistema de momento angular total $1/2$ y tercera componente m. Supóngase conocido el elemento de matriz

$$\langle 1/2, 1/2|z|1/2, 1/2\rangle = A \ .$$

a) Calcular $\langle 1/2, -1/2|z|1/2, 1/2\rangle$ y $\langle 1/2, -1/2|z|1/2, -1/2\rangle$.

b) Calcular $\langle 1/2, -1/2|x|1/2, 1/2\rangle$.

c) Si suponemos que el estado $|1/2\, m; \alpha\rangle$ es autoestado de paridad, ¿Cuánto vale A?.

d) Supóngase que el estado anterior no es invariante bajo paridad sino que viene dado por una combinación lineal de estados $|1/2, m; \ell\, s\, n\rangle$, donde ℓ es el momento angular, s es el espín y n está relacionado con la función de onda radial.

$$|1/2, m; \alpha\rangle = \sum_{\ell} C_\ell |1/2, m; \ell\, s\, n\rangle \ ,$$

Tomemos el caso $s = 1/2$.

a) ¿Qué valores puede tomar ℓ?.

b) Demostrar que dicho estado no es en general invariante bajo paridad.

c) Demostrar que aun así, suponiendo invarianza bajo inversión temporal, $A = 0$.

Apéndice E

Quinto boletín

1. La ecuación integral de Schrödinger la podemos aplicar a problemas unidimensionales de transmisión-reflexión con un potencial de rango finito, por ejemplo, apliquémosla para $V(x) \neq 0$ sólo en $0 < |x| < a$.

   a. Suponer que tenemos una onda incidente desde la izquierda: $\langle x|\phi\rangle = e^{ikx}/\sqrt{2\pi}$. ¿ Cómo hemos de tratar la singularidad en el operador $1/(E - H_0)$ para tener sólo una onda que se propaga hacia la derecha para $x > a$ y onda reflejada e incidente para $x < -a$?. ¿Es la prescripción $E \to E + i\epsilon$ $(\epsilon > 0)$ todavía correcta?. Obtener una expresión para la correcta función de Green y escribir una ecuación integral para $\langle x|\Psi^{(+)}\rangle$.

   b. Considerar el caso especial del potencial de una delta de Dirac atractiva:

   $$V = -\left(\frac{\gamma\hbar^2}{2m}\right)\delta(x), \quad (\gamma > 0) \ .$$

   Resolver la ecuación integral para obtener las amplitudes transmitidas y reflejadas.

   c. El potencial unidimensional anterior admite para $\gamma > 0$ un único estado ligado para cada valor de γ. Mostrar que las amplitudes de reflexión-transmisión computadas tienen polos de estado ligado en el valor esperado de k, extendiendo k al plano complejo. Calcular dicho valor resolviendo la ecuación diferencial de Schrödinger estacionaria directamente.

2. Probar que:

   $$\sigma_{tot} \simeq \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int d^3x \int d^3x'\, V(r)V(r')\frac{\mathrm{sen}^2 k|\vec{x}-\vec{x}'|}{k^2|\vec{x}-\vec{x}'|^2} \ ,$$

   siendo V un potencial central.

   a. Calculando la amplitud de colisión a primer orden en la serie de Born y a partir de ella la sección eficaz total.

   b. Aplicando el teorema óptico, calculando la amplitud de colisión a segundo orden en la serie de Born.

3. Considerar el potencial, $V = 0$ para $r > R$, y $V = V_0$ para $r < R$, donde V_0 puede ser positivo o negativo. Utilizando el método de ondas parciales, mostrar que para $|V_0| \ll E = \hbar^2 k^2/2m$ y $kR \ll 1$, la sección eficaz es isotrópica y que la sección eficaz total viene dada por:

$$\sigma_{tot} = \left(\frac{16\pi}{9}\right)\frac{m^2 V_0^2 R^6}{\hbar^4} \; .$$

Obtener el mismo resultado aplicando la serie de Born a primer orden y desarrollar en serie de $qR \ll 1$ a primer orden no nulo.

Suponer que la energía se incrementa ligeramente. Mostrar entonces que la distribución angular puede escribirse como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = A + B\cos\theta \; .$$

Obtener expresiones aproximadas para A y B.

4. Una partícula sin espín es dispersada por un potencial de Yukawa débil, $V = V_0 e^{-\mu r}/\mu r$, donde $\mu > 0$ pero V_0 puede ser negativo o positivo. Vimos que la amplitud de colisión de Born a primer orden es:

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2\mu}\frac{1}{2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2} \; .$$

a. Utilizando $f^{(1)}(\theta)$ y suponiendo que $|\delta_\ell| \ll 1$, obtener una expresión para δ_ℓ en términos de la función de Legendre de segunda especie,

$$Q_\ell(\xi) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{P_\ell(\xi')}{\xi-\xi'}\,d\xi' \; .$$

b. Utilizar la fórmula del desarrollo:

$$\begin{aligned} Q_\ell(\xi) &= \frac{\ell\,!}{(2\ell+1)!!}\times\left\{\frac{1}{\xi^{\ell+1}}+\frac{(\ell+1)(\ell+2)}{2(2\ell+3)\xi^{\ell+3}}\right. , \\ &+ \left.\frac{(\ell+1)(\ell+2)(\ell+3)(\ell+4)}{2\cdot 4(2\ell+3)(2\ell+5)\xi^{\ell+5}}\ldots\right\} , \end{aligned}$$

con $|\xi| > 1$, para probar:

i) δ_ℓ es negativa (positiva) cuando el potencial es repulsivo (atractivo).

ii) Cuando la longitud de onda de de Broglie es mucho mayor que el rango del potencial, δ_ℓ es proporcional a $k^{2\ell+1}$. Encontrar la constante de proporcionalidad.

5. Considérese el potencial tridimensional $V(r) = g\delta(r-a)$, siendo r la variable radial:

a) Discútase para qué valores de g se puede aplicar la aproximación de Born.

b) Obténgase la amplitud de colisión en la aproximación de Born.

c) Obtener a partir del apartado b) la longitud de dispersión en onda S.

6. Considerar la dispersión de una partícula por una esfera impenetrable:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > a \ , \\ \infty & r < a \ . \end{cases}$$

   a. Derivar una expresión para el desfasaje en onda S.

   b. Dar la sección eficaz total en el límite $k \to 0$. Comparar con la sección geométrica πa^2.

7. Considerar el potencial gaussiano $V = V_0 \exp(-r^2/a^2)$, con V_0 una constante.

   a) Determinar qué relación deben satisfacer los valores de V_0 y a para que la aproximación de Born sea aplicable.

   b) En el límite de baja energía la amplitud de colisión se puede desarrollar en serie de potencias de q^2: $f(k,\theta) = a_0 + a_2 q^2 + ...$ Obtener dentro de la aproximación de Born los coeficientes a_0 y a_2 para el potencial dado.

   Nota:

$$\int_0^\infty \exp(-x^2)dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \ .$$

8. Utilizar el resultado $\delta_\ell = \Delta(b)$, con $b = \ell/k$, para obtener el desfasaje δ_ℓ a altas energías para un potencial gaussiano, $V = V_0 \exp(-r^2/a^2)$ y para un potencial de Yukawa, $V = V_0 \exp(-\mu r)/\mu r$. Verificar la afirmación que $\delta_\ell \to 0$ muy rápidamente al aumentar ℓ (k fijado) para $\ell \gg kR$, siendo R el rango del potencial.

9. Considerar la dispersión elástica de un electrón rápido por un átomo de hidrógeno en su estado fundamental a primer orden en la serie de Born. Determinar el factor de forma.

Bibliografía

[1] P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics.* Oxford University Press, 1958.

[2] K. Gottfried, *Quantum Mechanics. Vol. I. Fundamentals.* Advanced Book Classics. Addison-Wesley Publishing Company, 1989.

[3] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics.* Addisón-Wesley Publishing Company. The Advanced Book Program, 1985.

[4] H. A. Bethe and R. Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics.* Advanced Book Classics. Addison-Wesley, 1997.

[5] W. Pauli, *Pauli Lectures on Physics. Vol. 5. Wave Mechanics.* Dover Publications, Inc., 2000.

[6] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields. Vol. I. Fundations.* Cambridge University Press, 1995.

[7] R. P. Feynman, R. B. Leighton y M. Sands, *Física. Vol. III: Mecánica Cuántica.* Addison-Wesley Iberoamericana, S.A., 1987.

[8] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica Cuántica*, Vol. 3. Editorial Reverté, S.A., 1986.

[9] M. E. Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum.* Dover Publications, Inc., 1995.

[10] H. Georgi, *Lie Algebras in Particle Physics. From Isospin to Unified Theories.* Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., Advanced Book Program, Reading Massachusetts, 2nd edition, 1999.

[11] J. D. Jackson, *Electrodinámica Clásica.* Alhambra, 1982.

[12] A. Sommerfeld, *Partial Differential Equations in Physics*, Vol. VI. Academic Press, 1967.

[13] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica*, Vol. 1. Editorial Reverté, S.A., 1991.

[14] A. Galindo y P. Pascual, *Mecánica Cuántica.* Eudema Universidad, 1989.

[15] F. J. Yndurain, *Mecánica Cuántica.* Alianza Editorial, 1988.

[16] S. Gasiorowicz, *Quantum Physics.* John Wiley&Sons, 1995.

[17] T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. **104**, 258 (1956);
C.S. Wu et al., Phys. Rev. **105**, 1413 (1957) .

[18] H. A. Bethe, Phys. Rev. **D76**, 38 (1949).