Clase 18 - Martes 02/11/2021

La clase pasada vimos:

- Dos ejemplos breves de H con dos espines
- Suma de momentos angulares: motivación del método general
- Caso general J_1+J_2 --- Planteo
- Caso general J_1+J_2 --- Solución
- Coeficientes Clebsch-Gordan

En esta clase veremos:

- **Ejemplo: suma de momentos angulares L y S**
- **Operador de traslación**
- **Repaso: conservación y simetría en mecánica clásica**
- **Simetrías en mecánica cuántica**
- **Operador paridad**

Caso general **J**$_1$+**J**$_2$

REPASO

Autoestados comunes del C.C.O.C. $\{J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z}\}$

$$|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle = |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle$$

Definimos: **J** = **J**$_1$+**J**$_2$

Hay otra opción de C.C.O.C. conveniente: $\{J_1^2, J_2^2, J^2, J_z\}$

$$J_1^2 |j_1 j_2 j m\rangle = j_1 (j_1+1)\hbar^2 |j_1 j_2 j m\rangle$$

$$J_2^2 |j_1 j_2 j m\rangle = j_2 (j_2+1)\hbar^2 |j_1 j_2 j m\rangle$$

$$J^2 |j_1 j_2 j m\rangle = j (j+1)\hbar^2 |j_1 j_2 j m\rangle$$

$$J_z |j_1 j_2 j m\rangle = m\hbar |j_1 j_2 j m\rangle$$

REPASO

¿Cómo se relacionan $\{|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\}$ y $\{|j_1 j_2 j m\rangle\}$?

$$|s M\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle m_1 m_2 | s M\rangle \, |m_1 m_2\rangle$$

Suma de MA $\longleftrightarrow$ cambio de base:

$\{S_{1z}, S_{2z}\} \rightarrow \{S^2, S_z\}$

Propiedad principal:

1) $m = m_1 + m_2$

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

REPASO

$$J_- = J_{1-} + J_{2-}$$

$m \backslash j$	j_1+j_2	j_1+j_2-1	$\cdots$	j_1-j_2
j_1+j_2	$\vert j_1+j_2, j_1+j_2\rangle$ 1			
j_1+j_2-1	$\vert j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle$	$\vert j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle$		
j_1+j_2-2	$\vert j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle$	$\vert j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle$		$\vert j_1-j_2, j_1-j_2\rangle$
	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$
$-j_1-j_2+2$	$\vert j_1+j_2, -(j_1+j_2)+2\rangle$	$\vert j_1+j_2-1, -(j_1+j_2-1)+1\rangle$		$\vert j_1-j_2, -(j_1-j_2)\rangle$
$-j_1-j_2+1$	$\vert j_1+j_2, -(j_1+j_2)+1\rangle$	$\vert j_1+j_2-1, -(j_1+j_2-1)\rangle$		
$-j_1-j_2$	$\vert j_1+j_2, -(j_1+j_2)$			

Ejemplo: suma de **L** y **S**

Suma de $\vec{L}$ y $\vec{S}$

Sea electrón en átomo de H con MAO ℓ.

$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ puede tomar valores $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ si $\ell \neq 0$

(recordar $j_1 + j_2, \cdots$
$\cdots j_1 - j_2$)

Estados producto: $|\ell\, m_\ell, s\, m_s\rangle$

Estados de $\vec{J}_{TOTAL}$: $|j\, m\rangle = |\ell, s, j, m\rangle$

Para $\ell = 0$ tenemos solamente $j = \dfrac{1}{2}$

Ejemplo: suma de L y S

Ejemplo $\ell = 1$:

$$\mathrm{j} = \ell + \tfrac{1}{2} \longrightarrow j = \frac{3}{2} \Rightarrow m = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$$

$$\mathrm{j} = \ell - \tfrac{1}{2} \longrightarrow j = \frac{1}{2} \Rightarrow m = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

Ejemplo $\ell = 2$:

$$\mathrm{j} = \ell + \tfrac{1}{2} \longrightarrow j = \frac{5}{2} \Rightarrow m = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}$$

$$\mathrm{j} = \ell - \tfrac{1}{2} \longrightarrow j = \frac{3}{2} \Rightarrow m = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$$

Querríamos expresar los estados $|\ell, s, j, m\rangle$ en términos de $|\ell, m_\ell; s, m_s\rangle$

Para obtener un dado $m = m_\ell + m_s$ hay dos posibilidades de m_ℓ y m_s:

$$\begin{cases} m_\ell = m + \frac{1}{2} \ , & m_s = -\frac{1}{2} \\ m_\ell = m - \frac{1}{2} \ , & m_s = \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$|\ell, s = \frac{1}{2}, j = \ell + \frac{1}{2}, m\rangle = \alpha|\ell, m + \frac{1}{2}; s, -\frac{1}{2}\rangle + \beta|\ell, m - \frac{1}{2}; s, \frac{1}{2}\rangle$$

y notar que el mismo valor de m puede aparecer para $j = \ell - \dfrac{1}{2}$:

$$|\ell, s = \frac{1}{2}, j = \ell - \frac{1}{2}, m\rangle = \alpha'|\ell, m + \frac{1}{2}; s, -\frac{1}{2}\rangle + \beta'|\ell, m - \frac{1}{2}; s, \frac{1}{2}\rangle$$

$$\left| j = \ell \pm \frac{1}{2}, m \right\rangle = \frac{1}{(2\ell+1)^{1/2}} \left[\pm \left(\ell + \frac{1}{2} \pm m\right)^{1/2} \left| \ell, m-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right.$$

$$\left. + \left(\ell + \frac{1}{2} \mp m\right)^{1/2} \left| \ell, m+\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right]$$

Operador de traslación

Operador traslación e invariancia Translacional

Definimos el operador translación sobre la base de estados con posición bien definida $|x\rangle$

La traslación infinitesimal actúa como:

$$T(\varepsilon)\,|x\rangle = |x+\varepsilon\rangle$$

Desplaza a la Partícula: $x \longrightarrow x+\varepsilon$

Sakurai

44 Fundamental Concepts

Translation

We now introduce the very important concept of translation, or spatial displacement. Suppose we start with a state that is well localized around $\mathbf{x}'$. Let us consider an operation that changes this state into another well-localized state, this time around $\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'$ with everything else (for example, the spin direction) unchanged. Such an operation is defined to be an **infinitesimal translation** by $d\mathbf{x}'$, and the operator that does the job is denoted by $\mathscr{T}(d\mathbf{x}')$:

$$\mathscr{T}(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}'+d\mathbf{x}'\rangle, \qquad (1.6.12)$$

Veamos su acción sobre un ket $|\psi\rangle$ general:

$$
\begin{aligned}
|\psi_\varepsilon\rangle &= T(\varepsilon)\,|\psi\rangle \\
&= T(\varepsilon) \int dx\; |x\rangle\langle x|\psi\rangle \\
&= \int dx\; |x+\varepsilon\rangle\langle x|\psi\rangle \\
&= \int dx'\; |x'\rangle\langle x'-\varepsilon|\psi\rangle = \int dx'\; |x'\rangle\, \psi(x'-\varepsilon)
\end{aligned}
$$

Haciendo $\langle x| \longrightarrow$ $\langle x|\psi_\varepsilon\rangle = \langle x|T(\varepsilon)|\psi\rangle = \psi(x-\varepsilon)$

Ej: $\psi(x) \sim e^{-x^2} \xrightarrow{T(\varepsilon)} \psi(x-\varepsilon) \sim e^{-(x-\varepsilon)^2}$

Definición:

Hay invariancia traslacional en un sistema si:

$$\langle \psi_\varepsilon | H | \psi_\varepsilon \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle$$

¿Cuál es la ley de conservación asociada?

Construyamos el operador $T(\varepsilon)$.
Como $T(\varepsilon=0) = \mathbb{1}$, expandimos a 1er orden:

$$T(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G$$

generador de traslaciones (hermítico)

Operador de traslación

$$T(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G$$

$\uparrow$ generador de traslaciones (hermítico)

Vimos $\langle x | T(\varepsilon) | \psi \rangle = \psi(x-\varepsilon)$

Expandimos a primer orden:

$$\langle x | \mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G | \psi \rangle = \langle x | \psi \rangle - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle x | G | \psi \rangle$$

$$\psi(x-\varepsilon) = \psi(x) - \frac{d\psi}{dx}(x)\,\varepsilon \leftarrow \text{haciendo Taylor}$$

$$\Rightarrow \langle x | G | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi = \langle x | \hat{P} | \psi \rangle \qquad \Rightarrow \qquad G = P\,!$$

Operador de traslación

$$\Rightarrow \quad T(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon P$$

Para traslaciones finitas: $T(a) = e^{-iaP/\hbar}$

Notar que $T(a)\,T(b) = T(a+b)$.

Invariancia traslacional: $\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi_\varepsilon | H | \psi_\varepsilon \rangle$

$$= \langle T(\varepsilon)\psi \,|\, H \,|\, T(\varepsilon)\psi \rangle$$

$$= \langle \psi | T^\dagger(\varepsilon) H T(\varepsilon) | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \left(\mathbb{1} + \frac{i\varepsilon}{\hbar} P\right) H \left(1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} P\right) | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | H | \psi \rangle + \frac{i\varepsilon}{\hbar} \langle \psi | [P, H] | \psi \rangle + O(\varepsilon^2)$$

$$\Rightarrow \langle \psi | [P, H] | \psi \rangle = 0 \Rightarrow \underbrace{\langle \dot{P} \rangle = 0}_{\text{Ehrenfest}}$$

Breve repaso de conservación y simetría en mecánica clásica

Simetrías en física clásica

Constantes de movimiento

- Formalismo Lagrangiano: $L(q, \dot{q})$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

Si L no depende de $q_i \rightarrow \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \Rightarrow$

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

Se define el momento canónico conjugado de q_i

$$P_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

Ej. si $q_i = x$ y hay invariacia traslacional $L \neq L(x)$

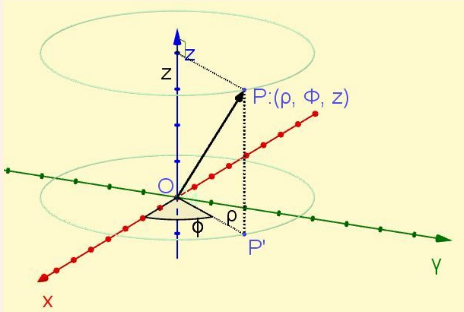
$$\Rightarrow P_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \text{constante.}$$

Si L no depende de $q_i \rightarrow \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \Rightarrow$

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

Se define el momento canónico conjugado de q_i

$$P_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$



Otro ejemplo: $q_1 = \rho \ , \ q_2 = \phi \ , \ q_3 = z$

Si $L \neq L(\phi)$ $\Rightarrow P_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}}$

$$= \frac{\partial}{\partial \dot{\phi}}\left(\frac{1}{2} m\left(\dot{\rho}^2 + \rho^2 \dot{\phi}^2\right) - V(\vec{r})\right)$$

$$= m\rho^2\dot{\phi}$$

$$= m\rho\,\rho\dot{\phi} = L_z$$

Se conserva L_z

Formalismo Hamiltoniano: $H(q_i, p_i)$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

De nuevo, si $H \neq H(q_i) \Rightarrow \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0$

$\Rightarrow p_i =$ constante

Simetrías y conservación en mecánica cuántica

Operadores unitarios o de simetría → traslación T, rotación R, paridad Π

Para Transformaciones infinitesimales:

$$\mathcal{U} = \mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} G$$

donde G es el generador hermítico del operador unitario.

Sup. H invariante frente a $\mathcal{U}$:

$$\Rightarrow \mathcal{U}^{+} H \mathcal{U} = H \Rightarrow [G, H] = 0$$

Sup. H invariante frente a $\mathcal{U}$:

$$\Rightarrow \mathcal{U}^{+} H \, \mathcal{U} = H \Rightarrow [G, H] = 0$$

Y por la ec. de movimiento de Heisenberg

$$i\hbar \frac{dG}{dt} = [G, H] = 0 \Rightarrow G = \text{constante}$$

Ej. Generador de traslación : $\vec{P}$

Si H invariante frente a traslación $\Rightarrow \vec{P} = \text{constante}$

Otro ejemplo:

Si H invariante frente a rotaciones $\Rightarrow$ J = constante

porque $R_{\hat{u}}(d\alpha) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} d\alpha \, \vec{J} \cdot \hat{u}$ $\leftarrow$ $\vec{J}$ es el generador de rotaciones.

En particular, si H invariante frente a rotaciones eje z $\Rightarrow$ se conserva J_z

Otra forma de ver la conservación de G:

Supongamos que $[G, H] = 0$

Sean los autoestados de G: $G|g\rangle = g|g\rangle$

Supongamos para el estado inicial: $|\psi(t_0)\rangle = |g\rangle$

La evolución está dada por: $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|g\rangle$

como $[G, H] = 0 \Rightarrow [G, U(t, t_0)] = 0$

Entonces:

$$G|\psi(t)\rangle = G\,U(t,t_0)|g\rangle = U(t,t_0)\,G|g\rangle = g\,U(t,t_0)|g\rangle = g|\psi(t)\rangle$$

Conclusión:

$|\psi(t)\rangle$ permanece como autoestado de G con el mismo autovalor.

Degeneración del Hamiltoniano por simetrías

Sup. $[H, \mathcal{U}] = 0$ y $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$\Rightarrow \quad H(\mathcal{U}|n\rangle) = \mathcal{U}H|n\rangle = E_n \mathcal{U}|n\rangle$$

$\Rightarrow \mathcal{U}|n\rangle$ autoestado de H con autov. E_n

Si $|n\rangle \neq \mathcal{U}|n\rangle \Rightarrow$ son autovec. deg. de H

Si $\mathcal{U}(\lambda) \Rightarrow$ todos los $\mathcal{U}(\lambda)|n\rangle$ tienen misma energía.
donde λ es un parámetro contínuo

Simetría de rotación

Sup. H invariante rotacional $\Rightarrow [R, H] = 0$

y esto implica $[\bar{J}, H] = 0$ y $[J^2, H] = 0$

Entonces existe la base estándar $\{|kjm\rangle\}$ de autoestados comunes de $\{H, J^2, J_z\}$

$$H\,|kjm\rangle = E\,|kjm\rangle$$

$$J^2\,|kjm\rangle = j(j+1)\hbar^2\,|kjm\rangle$$

$$J_z\,|kjm\rangle = m\hbar\,|kjm\rangle$$

Como $[H, J_\pm] = 0 \overset{y}{\Rightarrow} J_\pm |kjm\rangle \propto |kj\, m\pm 1\rangle$

$\Rightarrow$ Todos los estados $|kjm\rangle$ con $m = -j \dots j$

Son autoestados de H con la misma energía.

Esta es una degeneración "esencial" porque no depende del $V(r)$, sólo del hecho de que H tiene invariancia rotacional.

Ej. Átomo de H con interacción espín-órbita:

$$H = K + V(r) + V_{LS}(r)\, \vec{L}\cdot\vec{S}$$

$\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}\left(J^2 - L^2 - S^2\right)$ es invariante rotacional.

~~es decir~~ en otras palabras: $\left[R, \vec{L}\cdot\vec{S}\right] = 0$. También r $\Rightarrow$ deg. $(2j+1)$

Operador paridad

Operador paridad

Definimos

Introducimos operador unitario π

$$|\psi'\rangle = \pi|\psi\rangle$$

tal que

$$\left.\begin{array}{l}\langle\psi'|\vec{x}|\psi'\rangle = -\langle\psi|\vec{x}|\psi\rangle \\ \langle\psi'|\vec{x}|\psi'\rangle = \langle\psi|\pi^{\dagger}\vec{x}\pi|\psi\rangle\end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad \pi^{\dagger}\,\vec{x}\,\pi = -\vec{x} \qquad \vec{x} \text{ es "impar"}$$

$$\Rightarrow \quad \vec{x}\pi = -\pi\vec{x} \;\rightarrow\; \vec{x}\pi + \pi\vec{x} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \{\vec{x}, \pi\} = 0$$

↳ anticonmutador

Vemos que $\Pi|\vec{x}'\rangle$ es un autoestado de $\vec{X}$:

$$\vec{X}\,\Pi|\vec{x}\rangle = -\Pi\,\vec{X}|\vec{x}\rangle = -\Pi\,\vec{x}|\vec{x}\rangle = (-\vec{x})\,\Pi|\vec{x}\rangle$$

Como el autovalor es $-\vec{x}$, podemos decir que

$$\Pi|\vec{x}\rangle \propto |-\vec{x}\rangle$$

Podríamos definir Π incluyendo una fase $e^{i\alpha}$, pero elegimos $\alpha=0$ y

$$\Pi|\vec{x}\rangle = |-\vec{x}\rangle$$

Vemos: $\Pi^2|x\rangle = \Pi(\Pi|\vec{x}\rangle) = \Pi|-\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle$

o sea $\Pi^2 = \mathbb{1}$

Entonces: $\Pi^2 = \mathbb{1} \Rightarrow \Pi^{-1} = \Pi$

Como además es unitario: $\Pi^{-1} = \Pi^{+}$

$\Rightarrow \Pi = \Pi^{+}$ es hermítico

$\Rightarrow$ autovalores: ± 1

Paridad del operador momento

Físicamente:

Traslación + paridad = paridad * Traslación

$$\Rightarrow \quad \Pi\, T(d\vec{x}) = T(-d\vec{x})\, \Pi$$

$$\Rightarrow \quad \Pi \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x} \right) \Pi^{+} = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot d\vec{x}$$

$$\Rightarrow \quad -\Pi \vec{p}\, \Pi^{+} = \vec{p} \quad \Rightarrow \{ \Pi , \vec{p} \} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\Pi^{+} \vec{p}\, \Pi = -\vec{p}$$ $\vec{p}$ es impar también

Paridad del momento angular

$$[\hat{\Pi}, \hat{L}_z] = [\hat{\Pi}, \quad x p_y - y p_x]$$

$$= [\Pi, x p_y] - [\Pi, y p_x]$$

$$= x[\Pi, p_y] + [\Pi, x] p_y - y[\Pi, p_x] - [\Pi, y] p_x$$

$$[A, B] = \{A, B\} - 2BA$$

$$= -2 x p_y \Pi - 2 x \Pi p_y + 2 y p_x \Pi + 2 y \Pi p_x$$

$$= -2x \{p_y, \Pi\} + 2y \{p_x, \Pi\} = 0$$

$$\Rightarrow [\Pi, \vec{L}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{L} \text{ es "par"}$$

Resumen de la Clase **18**

En esta clase vimos:

- Ejemplo: suma de momentos angulares L y S
- Operador de traslación
- Repaso: conservación y simetría en mecánica clásica
- Simetrías en mecánica cuántica
- Operador paridad