Clase 19 - Viernes 05/11/2021

La clase pasada vimos:

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

En esta clase veremos:

- **Operador paridad**
- **Funciones de onda y paridad**
- **Paridad de autoestados de H, reglas de selección**
- **Perturbaciones independientes del tiempo: Planteo del problema**
- **Perturbación de un nivel no degenerado**

REPASO

Operador traslación

La traslación infinitesimal actúa sobre un estado localizado como: $T(\varepsilon)\,|x\rangle = |x+\varepsilon\rangle$

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

El generador de las traslaciones es el momento: $T(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon P$

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

REPASO

Operadores unitarios o de simetría

Para Transformaciones infinitesimales :

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

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

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

Operador paridad

Operador paridad

Definimos

Introducimos operador unitario Π

$$|\psi'\rangle = \Pi|\psi\rangle$$

tal que

$$\mathbf{r} \longrightarrow -\mathbf{r}$$

$$\begin{aligned} r &\to r \\ \theta &\to \pi - \theta \\ \phi &\to \phi + \pi. \end{aligned}$$

$$\left.\begin{aligned} \langle\psi'|\vec{x}|\psi'\rangle &= -\langle\psi|\vec{x}|\psi\rangle \\ \langle\psi'|\vec{x}|\psi'\rangle &= \langle\psi|\Pi^{\dagger}\vec{x}\,\Pi|\psi\rangle \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$\Rightarrow \Pi^{\dagger}\vec{x}\,\Pi = -\vec{x}$ $\qquad$ $\vec{X}$ es "impar"

$\Rightarrow \vec{x}\,\Pi = -\Pi\vec{x} \rightarrow \vec{x}\,\Pi + \Pi\vec{x} = 0$

$\Rightarrow \{\vec{x}, \Pi\} = 0$

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

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

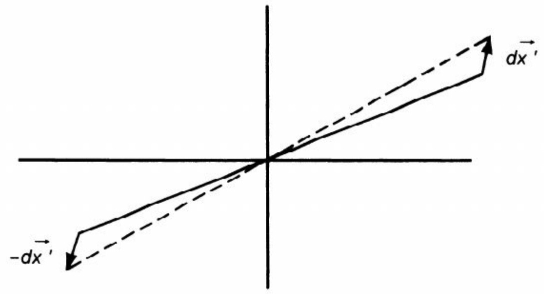


FIGURE 4.2. Translation followed by parity, and vice versa.

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

$$[\Pi, L_z] = [\Pi, xp_y - yp_x]$$

$$= [\Pi, xp_y] - [\Pi, yp_x]$$

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

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

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

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

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

Funciones de onda y paridad

Funciones de onda y paridad

Sea $\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \psi \rangle$

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\Pi} \Pi|\psi\rangle$$

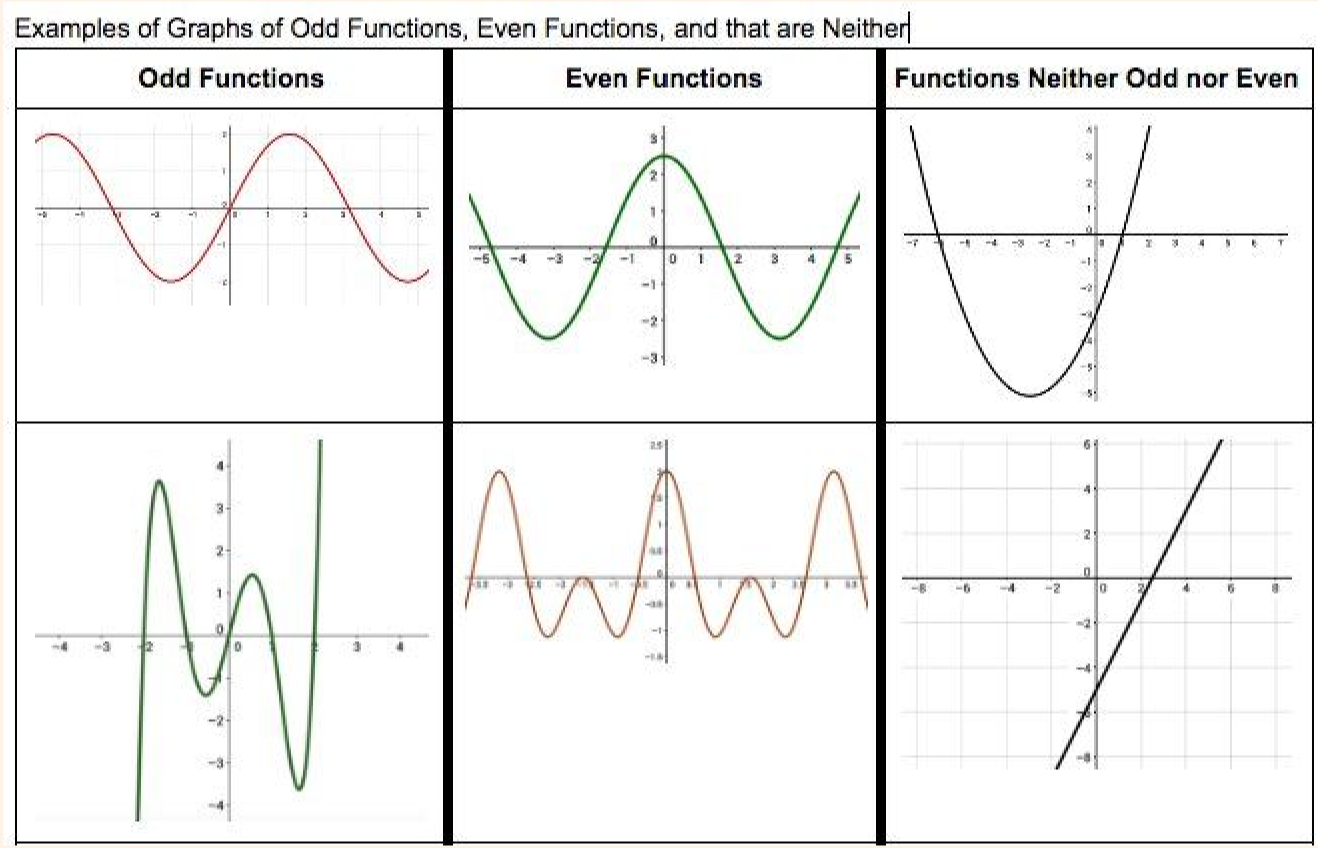
Es $\langle \vec{x} | \Pi | \psi \rangle = \langle -\vec{x} | \psi \rangle = \psi(-\vec{x})$

Supongamos $|\psi\rangle$ es autoestado de Π $\Rightarrow$

$$\Pi|\psi\rangle = \pm |\psi\rangle$$

$$\left.\begin{array}{l} \Rightarrow \langle \vec{x} | \Pi | \psi \rangle = \pm \langle \vec{x} | \psi \rangle \\ \\ \text{Por otro lado } \langle \vec{x} | \Pi | \psi \rangle = \langle -\vec{x} | \psi \rangle \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$\psi(-\vec{x}) = \begin{cases} +\psi(\vec{x}) & \text{par} \\ -\psi(\vec{x}) & \text{impar} \end{cases}$$


Examples of Graphs of Odd Functions, Even Functions, and that are Neither
Odd Functions
Even Functions
Functions Neither Odd nor Even

Paridad de autoestados de $\vec{L}$

Como $[\vec{L}, \pi] = 0 \Rightarrow$ hay base de autoestados comunes.

Veamos paridad de autoest. de L^2 y L_z:

$$\langle \vec{x} | n \ell m \rangle = R_{n\ell}(r)\, Y_\ell^m(\theta, \phi)$$

$$\vec{x} \to -\vec{x} \quad = \begin{cases} r \to r \\ \theta \to \pi - \theta \\ \phi \to \phi + \pi \end{cases}$$

se puede ver que: $Y_\ell^m \to (-1)^\ell \, Y_\ell^m$

se puede ver que: $Y_\ell^m \rightarrow (-1)^\ell Y_\ell^m$

$$\Rightarrow \Pi |n\ell m\rangle = (-1)^\ell |n\ell m\rangle$$

La paridad está dada por la paridad de ℓ.

Paridad de autoestados de H

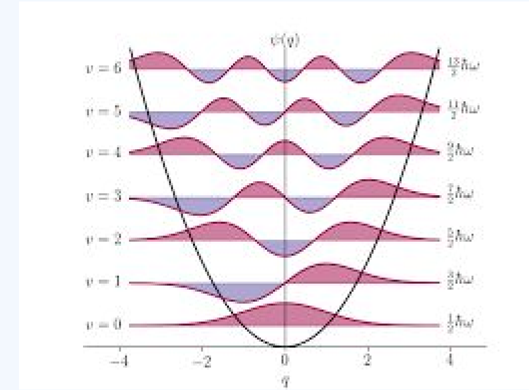
Reglas de selección

Paridad de autoestados de H

Paridad de autoest. de H

Teo: Si $[H, \Pi] = 0$ y $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ no deg.

$\Rightarrow \Pi|n\rangle = \pm|n\rangle$



Demostración:

Considerar $|\varphi\rangle = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)|n\rangle$

$$\Pi|\varphi\rangle = \frac{1}{2}(\Pi \pm \Pi^2)|n\rangle = \frac{1}{2}(\Pi \pm \mathbb{1})|n\rangle$$

$$= \pm \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)|n\rangle = \pm|\varphi\rangle$$

$|\varphi\rangle$ es autoestado de Π

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)|n\rangle$$

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

Además: $H|\varphi\rangle = \frac{1}{2}(H \pm H\Pi)|n\rangle$

$= \frac{1}{2}(H \pm \Pi H)|n\rangle = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)H|n\rangle$

$= \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)E_n|n\rangle = E_n|\varphi\rangle$

Por suposición de no degeneración

$\Rightarrow |\varphi\rangle = |n\rangle$

$\Rightarrow |n\rangle$ es autoest. de Π

Reglas de selección por paridad

Supongamos: $\Pi |\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\alpha\rangle$

$$\Pi |\beta\rangle = \varepsilon_\beta |\beta\rangle$$

Veamos elementos de matriz: $\vec{d} = e\vec{x}$

Momento dipolar eléctrico

Reglas de selección

$$\langle \beta | \vec{x} | \alpha \rangle = \langle \beta | \Pi^{-1} \Pi \vec{x} \Pi^{-1} \Pi | \alpha \rangle$$

$$= \varepsilon_\beta \varepsilon_\alpha \langle \beta | \Pi \vec{x} \Pi^{-1} | \alpha \rangle$$

$$= \varepsilon_\beta \varepsilon_\alpha \langle \beta | -\vec{x} | \alpha \rangle$$

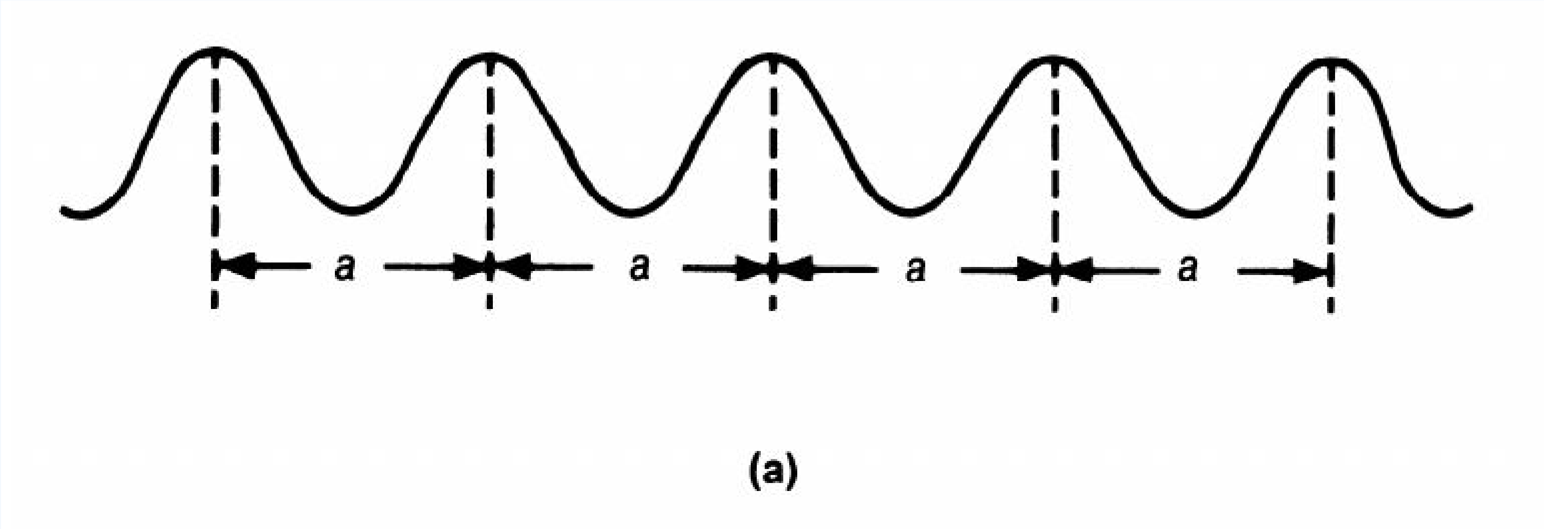
$$= - \varepsilon_\beta \varepsilon_\alpha \langle \beta | \vec{x} | \alpha \rangle$$

Si $\varepsilon_\beta \neq \varepsilon_\alpha$ es OK

Si $\varepsilon_\beta = \varepsilon_\alpha \Rightarrow \langle \beta | \vec{x} | \alpha \rangle = 0$

Significa que el Hamiltoniano dipolar eléctrico no induce transiciones entre estados con la misma paridad: transiciones prohibidas en absorpción óptica de la luz

Potenciales periódicos:



Estructura de la materia 2

Teoria de perturbaciones independientes del tiempo:

Planteo del problema

Perturbaciones independientes del tiempo (TIPT)

Hay pocos ejemplos de Hamiltonianos cuyos autovalores y autovectores se puedan calcular exactamente.
Se usan **métodos aproximados** (se intenta que la aproximación sea controlada).

TIPT: Rayleigh-Schrödinger pert. theory

Supongamos que podemos escribir el H como:

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V$$

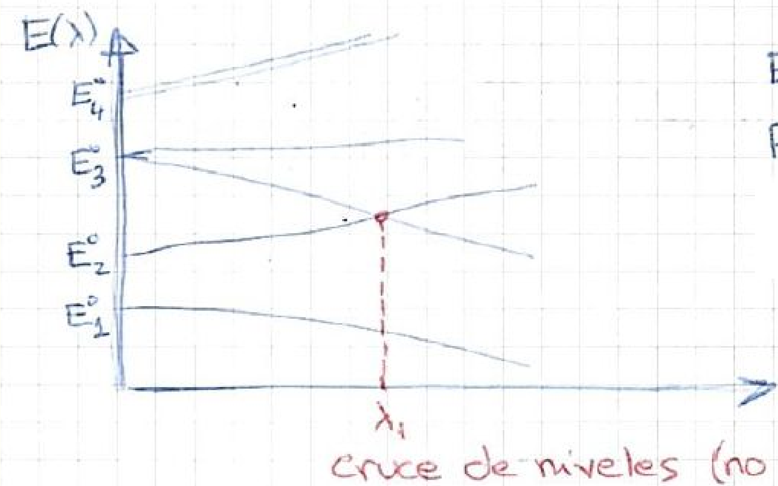
donde la pertubación V tiene una magnitud comparable a H_0

$\lambda \in \mathbb{R}$, nos interesa el límite $\lambda \ll 1$

(3 ó 4 órdenes de magnitud típicamente)

Objetivo:

Resolver $H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$ aprox.//



E_3^0, E_4^0 son degen.

Perturbación rompe deg. de E_3^0

pero no rompe la degeneración de E_4^0

$$H(\lambda)\,|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)\,|\psi(\lambda)\rangle$$

Suponemos conocido:

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \qquad \left\{ \begin{array}{l} \langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm} \\ \\ \displaystyle\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \end{array} \right.$$

(suponemos espectro discreto)

Ej: $H_0 \longleftarrow$ átomo de hidrógeno

$\lambda V \rightarrow \quad e\,\vec{r}\cdot\vec{E} = e\,x\,E_0 \quad (\vec{E} = E_0\,\hat{x})$ efecto Stark

↳ parámetro λ

$\lambda V \rightarrow \quad \dfrac{e}{2m_e c}\,\vec{B}\cdot(\vec{L} + g_e\,\vec{S})$ efecto Zeeman

Solución aproximada a primer orden en λ

$H(\lambda) = H_0 + \lambda V$

Expandimos:

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \dots + \lambda^q \varepsilon_q + \dots$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda |1\rangle + \dots + \lambda^q |q\rangle + \dots$$

$$(H_0 + \lambda V)\left(\sum_q \lambda^q |q\rangle\right) = \left(\sum_q \lambda^q \varepsilon_q\right)\left(\sum_q \lambda^q |q\rangle\right)$$

Orden $q = 0$ en λ :

$$H_0|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle$$

Orden λ^1 :

$$H_0\,\lambda\,|1\rangle + \lambda V\,|0\rangle = \varepsilon_0\,\lambda\,|1\rangle + \lambda\,\varepsilon_1|0\rangle$$

$$\Rightarrow \quad (H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$$

Orden λ^2 :

$$(H_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + (V - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0$$

Orden λ^q :

$$(H_0 - \varepsilon_0)|q\rangle + (V - \varepsilon_1)|q-1\rangle - \varepsilon_2|q-2\rangle \ldots - \varepsilon_q|0\rangle = 0$$

Perturbación de un nivel no degenerado

Perturbación de un nivel no-degenerado

A orden cero: $H_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle$

ε_0 corresponde a alguno de los autovalores de H_0

Sup. $\varepsilon_0 = E_n^0$

$|0\rangle = |\varphi_n\rangle$

A orden 1: $(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$

PROYECTAMOS SOBRE $|\varphi_n\rangle$:

$$\underbrace{\langle \varphi_n | H_0 - \varepsilon_0 | 1 \rangle}_{=0} + \langle \varphi_n | V - \varepsilon_1 | 0 \rangle = 0$$

A orden 1: $(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0$

PROYECTAMOS SOBRE $|\varphi_n\rangle$:

$$\underbrace{\langle \varphi_n | H_0 - \varepsilon_0 | 1 \rangle}_{=0} + \langle \varphi_n | V - \varepsilon_1 | 0 \rangle = 0$$

como $|\varphi_n\rangle = |0\rangle \Rightarrow \varepsilon_1 = \langle \varphi_n | V | 0 \rangle = \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle$

Hasta acá tenemos:

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | V | \varphi_n \rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

CORRECCIÓN DEL AUTOVALOR A PRIMER ORDEN

CORRECCIÓN DEL AUTOVECTOR A 1^er ORDEN

$$|\psi(\lambda)\rangle \simeq |0\rangle + \lambda|1\rangle$$

A 1^er orden vale :

$$\left(H_0 - \varepsilon_0\right)|1\rangle = -\left(V - \varepsilon_1\right)|0\rangle$$

o

$$\left(H_0 - E_n^0\right)|1\rangle = -\left(V - E_n^1\right)|\varphi_n\rangle$$

$$(H_0 - E_n^0)|1\rangle = -(V - E_n^1)|\varphi_n\rangle$$

$|1\rangle$ debe satisfacer esta ecuación. El RHS es algo conocido. Buscamos solución de la forma:

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} |\varphi_p\rangle\langle\varphi_p|1\rangle$$

Se podría agregar $|\varphi_n\rangle$ pero no cambia el hecho de que $|1\rangle$ sea solución, porque $(H_0 - E_n^0)|\varphi_n\rangle = 0$

Proyectamos con $\langle \varphi_p |$:

$$\langle \varphi_p | H_0 - E_n^0 | 1 \rangle = - \langle \varphi_p | V - E_n^1 | \varphi_n \rangle$$

$$= - \langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle$$

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

$$\Rightarrow \quad \langle \varphi_p | 1 \rangle = \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0}$$

Entonces :

$$| 1 \rangle = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} | \varphi_p \rangle$$

Energías a segundo orden

Teníamos :

$$\left(H_0 - E_n^0\right)|2\rangle + (V - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2 |0\rangle = 0$$

Ya conocemos : $|0\rangle = |\varphi_n\rangle$

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | V | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p\rangle$$

Proyectamos con $\langle \varphi_n |$

Perturbaciones de un nivel no degenerado

Proyectamos con $\langle \varphi_n |$.

El primer término se va: $\langle \varphi_n | H_0 - E_n^0 | 2 \rangle = \overbrace{(E_n^0 - E_n^0)}^{\langle \varphi_n |} | 2 \rangle$

$$\langle \varphi_n | V - \varepsilon_1 | 1 \rangle - \varepsilon_2 \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 0 , \text{ pero } | \varphi_n \rangle \perp | 1 \rangle$$

$$\Rightarrow \varepsilon_2 = \langle \varphi_n | V | 1 \rangle$$

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

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

Resumen de la Clase **19**

En esta clase vimos:

- Operador paridad
- Funciones de onda y paridad
- Paridad de autoestados de H, reglas de selección
- Perturbaciones independientes del tiempo: Planteo del problema
- Perturbación de un nivel no degenerado