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:

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

Partícula: $x \longrightarrow x+\varepsilon$

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

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

Def: 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 1^{er} orden:

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

$\uparrow$ generador de traslaciones (hermítico)

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

Expandimos a primer orden:

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

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

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

$$\Rightarrow \quad G = P \; !$$

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

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

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

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

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle (t) = \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

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

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

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

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

Ehrenfest

27/10/2015 - 1

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 $L \neq L(x)$

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

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

$\Rightarrow p_i = \text{constante}$

Ej: $q_1 = \rho$, $q_2 = \phi$, $q_3 = z$ si $H \neq H(\phi)$

$$\Rightarrow P_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot\phi} = \cancel{L_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}} \quad \text{se conserva}$$

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

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

Simetrías 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 $\mathcal{U}$:

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

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 $\Rightarrow \vec{P} = \text{constante}$

Si H invariante frente a rotaciones $\Rightarrow \vec{J} = \text{constante}$

porque $R_{\hat u}(d\alpha) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} d\alpha\, \vec{J}\cdot\hat{u}$ ← $\vec{J}$ 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.

Sup. $[G, H] = 0$ —

Si $|\psi(t=t_0)\rangle = |g\rangle \qquad (G|g\rangle = g|g\rangle)$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad \text{ó} \quad |\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|g\rangle \right)$$

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

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

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

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

Degeneración del Hamiltoniano por simetrías

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

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

$\Rightarrow \mathcal{U}|n\rangle$ 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 continuo

Simetría de rotación

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

y esto implica $[\vec{J}, H] = 0$ 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 $[H, J_\pm] = 0$ y $\Rightarrow J_\pm\,|kjm\rangle \propto |kj\,m\pm 1\rangle$

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

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:

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

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

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

Operador paridad

Definimos

Introducimos operador unitario π

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

tal que

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

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

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

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

$\quad \hookrightarrow$ 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

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

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

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

$$\Downarrow$$

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

$\vec{p}$ es impar también

Paridad del momento angular

$$[\Pi, L_z] = [\Pi, \cancel{\vec{x} \times \vec{p}}\ x p_y - y p_x]$$

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

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

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

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

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

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

<u>Paridad del $\vec{J}$ y $\vec{S}$: pseudovectores</u>

Para matrices ortogonales de 3x3 vale:

$$M^{(\text{paridad})} M^{(\text{rot})} = M^{(\text{rot})} M^{(\text{par})}$$

porque $M^{(\text{par})} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

Suponiendo que lo mismo vale en QM para los operadores unitarios:

$$\Pi R = R \Pi \Rightarrow [\Pi, R] = 0$$

Como $R_{\hat{n}}(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \vec{J}\cdot\hat{n}$

$$\left.\begin{array}{l} \Rightarrow [\Pi, \vec{J}] = 0 \\ \text{y como } \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \text{ y también } [\Pi, \vec{L}] = 0 \end{array}\right\} \Rightarrow [\Pi, \vec{S}] = 0$$

$\vec{X}$, $\vec{P}$ son "impares" $\rightarrow$ vectores polares

$\vec{L}, \vec{S}, \vec{J}$ son "pares" $\rightarrow$ vectores axiales o pseudo vectores

<u>Pseudoescalares</u>

$$\{A, \Pi\} = 0 \leftrightarrow A\Pi + \Pi A = 0 \leftrightarrow \Pi^{-1} A \Pi = -A$$

Ej. $\vec{S}\cdot\vec{X}$. Escalar: $A = \vec{L}\cdot\vec{S}$

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 $\Rightarrow$

$$\pi|\psi\rangle = \pm |\psi\rangle$$

$\Rightarrow \langle \vec{x} | \pi | \psi \rangle = \pm \langle \vec{x} | \psi \rangle$

Por otro lado $\langle \vec{x} | \pi | \psi \rangle = \langle -\vec{x} | \psi \rangle$ $\Bigg\} \Rightarrow$

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

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:

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

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

~~por la~~ se puede ver que: $Y_l^m \to (-1)^l\, Y_l^m$

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

La paridad está dada por la paridad de l.

De otra forma:

$$[\Pi, L_\pm] = 0 \Rightarrow [\Pi, L^r_\pm] = 0$$

Entonces: $L^r_+ |l, m=0\rangle$ y $L^r_- |l, m=0\rangle$ tienen la misma paridad

Paridad de autoest. de H

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

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

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

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

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

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

Reglas de selección por paridad

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

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

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

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

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

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

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

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

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